

組み合わせ最適化問題と量子アニーリング¹

— 量子断熱発展の理論と性能評価 —

青山学院大学 理工学部 鈴木 正²

(2008 年 4 月 15 日受理)

組み合わせ最適化問題に物理的な過程を応用する方法がある。中でもシミュレーティッドアニーリングはよく知られている。シミュレーティッドアニーリングは熱揺らぎを制御して最適化問題の答えを導く。まず組み合わせ最適化問題を表すハミルトニアンを作り、それに相当する仮想的な物理系の高温の平衡状態を作る。温度が十分に高ければ平衡状態は容易に得られる。そこから系を徐々に冷却し、それに伴う系の緩和を通じて最後にハミルトニアンの基底状態に到達させる。比較的最近、シミュレーティッドアニーリングの類推として量子アニーリングが提案された。この方法は磁場などにより系にトンネル効果（運動エネルギー）を導入し、それを制御することで最適化問題を解く。どのように制御するかというと、まず運動エネルギーがハミルトニアンの中で支配的になるようにし、そこから時間とともに徐々に運動エネルギーの重みが小さくなるようにする。運動エネルギーが支配的な初期ハミルトニアンの基底状態は簡単にわかる。その状態を初期状態として状態を時間発展させ、運動エネルギーの重みが無くなった時点での状態を答えとする。状態が断熱的に発展すれば、終状態は古典ハミルトニアンの基底状態となる。これら二つの方法は基本的にどんな問題にも使える汎用的なものである。最近の研究の進展によって量子アニーリングの性質が徐々に明らかになってきている。注目すべきは古典的なシミュレーティッドアニーリングよりも量子力学的な量子アニーリングの方が終状態を早く基底状態に近づけることである。このことは現時点で一般的に証明されたわけではないが、数値的な状況証拠に加え、解析的な証拠も得られている。本論文ではまずシミュレーティッドアニーリングと量子アニーリングの方法について述べる。次に量子アニーリングの本質である量子状態の断熱発展に関する基礎理論をまとめる。後半では量子力学の断熱定理に基づいて有限系で一般的に成り立つ量子アニーリング後の残留エネルギーの減少則を導く。さらに 1 次元ランダムイジング模型を例題として、熱力学極限で量子アニーリングとシミュレーティッドアニーリングのダイナミクスを解析的に比較する。それによって量子アニーリングがシミュレーティッドアニーリングより早いことに対する解析的な証拠を与える。

¹ 本稿は、編集部の方から特にお願ひして執筆していただいた記事である。

² E-mail: sei@phys.aoyama.ac.jp

目 次

1	序論	600
2	組み合わせ最適化問題とランダムイジング模型	603
2.1	シミュレーティッドアニーリング	606
3	量子アニーリング	609
3.1	量子アニーリングのアルゴリズム	609
3.2	量子計算機による実行	610
3.2.1	NMRによる実験	611
3.3	古典計算機による実行	613
3.3.1	DMRGによる実行	613
3.3.2	量子モンテカルロ法による実行	615
3.4	シミュレーティッドアニーリングとの定性的な比較	616
4	量子断熱発展の基礎理論	618
4.1	断熱定理	619
4.2	Landau-Zener 公式	625
4.3	Kibble-Zurek 機構	628
4.4	量子モンテカルロ法による時間発展	631
5	有限系の残留誤差	637
5.1	数値計算	637
5.2	断熱定理による解析	640
6	熱力学極限における残留誤差	643
6.1	1次元ランダムイジング模型の量子アニーリング	643
6.2	シミュレーティッド・アニーリングとの比較	647
6.3	考察	652
7	展望	654
8	まとめ	655
A	2準位系のシミュレーティッドアニーリング	658
B	1次元ランダムイジング模型のグラウバーダイナミクスと緩和時間	661

1 序論

昔から人々は様々な場面で効率を求めてきた。効率を良くすることはコストを抑えることと同じである。自由度が離散的なコスト関数を最小化する問題は組み合わせ最適化問題と呼ばれる。組み合わせ最適化問題は計算科学の主要なテーマであるが、物理と直接関係があるわけではない。しかし、物理的な発想に基づくアルゴリズムが考え出されたり、物理の概念が適用できたりすることがわかり、現在では組み合わせ最適化問題は物理学の対象の一つとして認識されている。

組み合わせ最適化問題の特徴の一つに、こちらを立てればあちらが立たず、あちらを立てればこちらが立たず、というフラストレーションの存在が挙げられる。そのようなフラストレーションを含んだ物理系としてスピングラスがある。スピングラスの研究の歴史は 30 年以上前から現在まで続いており、解析的な方法から数値計算まで様々な角度から研究が行われている。実は、組み合わせ最適化問題は一種のスピングラスモデルのエネルギー最小化とみなすことができる。そのことから、組み合わせ最適化問題への物理からのアプローチはスピングラス理論の応用からなされてきた [1, 2]。

一種のスピングラスモデルを組み合わせ最適化問題に対応させるとすると、そのモデルの統計力学を考えることができる。その結果、問題の答えが何らかの秩序を持った状態だとして、問題に含まれるパラメータを変化させるとある閾値を境に異なる秩序状態が答えになったり、また秩序状態がある温度を境に無秩序状態になったり、といういわゆる相転移の概念が組み合わせ最適化問題にもたらされている。このような組み合わせ最適化問題の統計力学の中で考案されたアルゴリズムがシミュレーティッドアニーリングである。シミュレーティッドアニーリングは 1983 年代に提案され [3]、基本的にはどんな組み合わせ最適化問題にも使える汎用アルゴリズムとして広く使われている。

組み合わせ最適化問題はすべての組み合わせをしらみつぶしに調べればいつかは答えが見つかる。しかし、組み合わせの数は問題のサイズ（変数の数）とともに指数関数的に増大し、サイズが大きいと現実の時間では答えを見つけれなくなる。シミュレーティッドアニーリングでは温度を導入し、高温の平衡状態から平衡状態を保つように系を徐々に冷やし、最終的に絶対零度にしてエネルギー最小の基底状態を得る（図 1 参照）。いきなり低温あるいは絶対零度の平衡状態を得ようと思っても、緩和時間が永すぎて得ることは難しい。しかし高温では緩和時間が短いので平衡状態を得るのは容易である。平衡状態を保つように系を冷やすには温度をゆっくり下げないといけないが、あるスケジュールに従って無限に時間をかければ、絶対零度極限での状態が基底状態に収束することが証明されている [4]。実際に計算機で実行する際にはモンテカルロ法などによりシミュレーションを行い、有限の時間で近似的な基底状態を得ることになる。

高温から絶対零度への冷却という物理的過程を考えた時に気になるのは相転移である。ここで言う高温は、平衡状態が無秩序状態であるような温度である。絶対零度の基底状態はしばしば秩序を持つ。高温の平衡状態と絶対零度の基底状態の間には相転移があり、転移温度では相関距離が系のサイズの程度になるのに伴って緩和時間が発散する。素朴に考えて、有限の速さで高温から低温に系を冷やすと転移温度付近では状態の緩和が冷却速度に追いつかず、平衡状態が保てな

くなる。つまり、熱力学極限では秩序を持った基底状態は高温の平衡状態からの有限時間での冷却では得ることができない。したがって有限時間の冷却で得られた絶対零度の状態は近似的な基底状態となる。ここで重要なことは、冷却にかかる時間が永ければ永いほど近似の精度が上がることである。時間に対する精度の向上率、または誤差の減少率はシミュレーティッドアニーリングの性質を表す重要な指標となる。第 2.1 節で述べるが、シミュレーティッドアニーリングによる誤差の減少率に関しては Huse-Fisher 則が知られていて、それによると、熱力学極限で冷却後のエネルギーと真の基底エネルギーの差（残留エネルギー）は冷却にかかる時間 τ とともに

$$E_{\text{res}} \sim \frac{1}{(\ln \tau)^\zeta}, \quad \zeta \leq 2 \quad (1)$$

で減少する [5]。

ところで、1990 年前後から量子力学を使って計算をするという考えが広がり始めた [6]。一つの大きな契機となったのは有名な Shor による因数分解のアルゴリズムの発見である [7]。そんな中、量子力学を用いた組み合わせ最適化問題に対するアルゴリズムとして量子アニーリングが複数の分野で独立に提案された [8, 9, 10]³。その量子アニーリングはシミュレーティッドアニーリングからの類推で考え出されたと言ってもよく、シミュレーティッドアニーリングと同様に組み合わせ最適化問題に対する汎用アルゴリズムである [11, 12, 13]。そもそも組み合わせ最適化問題に対応する系は古典的な変数で書かれたハミルトニアンで表わされる。量子アニーリングではそのハミルトニアンをポテンシャルエネルギーとみなし、それと非可換な「運動エネルギー」を導入する。たとえば、ポテンシャルエネルギーがイジングスピンで表わされている時、単純な運動エネルギーはイジングスピンに垂直方向の磁場（横磁場）で与えられる。非可換な運動エネルギーは古典系にトンネル効果をもたらす。

始めに運動エネルギーが支配的であり、時間とともにその割合が小さくなり、最終的にポテンシャルエネルギーだけになるような時間とともに変化するハミルトニアンを考えよう。運動エネルギーが支配的なハミルトニアンの基底状態は簡単にわかる。横磁場イジング模型の場合には全てのスピンが横磁場の方向に揃った状態がそれである。その状態、すなわち初期ハミルトニアンの基底固有状態を始状態にとり、時間に依存するハミルトニアンのもとで状態を時間発展させる。状態の時間発展は Schrödinger 方程式に従う。状態が断熱的に発展すれば最終的にポテンシャルハミルトニアンの基底状態が得られる。それはまさに組み合わせ最適化問題の答えである。以上が量子アニーリングの手順となる。量子アニーリングは量子状態の断熱発展を利用したアルゴリズムであり、量子断熱計算とも呼ばれている。

有限系で特別な対称性がなければ、ハミルトニアンの各時刻における基底状態と励起状態の間のエネルギーギャップは閉じることはない。量子アニーリングはエネルギーギャップがあれば、断熱定理により、ハミルトニアンの変化が遅い極限でうまくいくことが保証される。ハミルトニアンの変化率が有限の場合には終状態は真の基底状態に対して必ず有限の誤差を持つが、誤差は変化率のべきで小さくなる [16]。このことは第 5 節で述べる。一方、熱力学極限では運動エネルギー

³Schrödinger 方程式による量子力学的なダイナミクスを考えないで、人口的なダイナミクスを用いる量子アルゴリズムとしての量子アニーリングは文献 [14, 15] で提案されている。

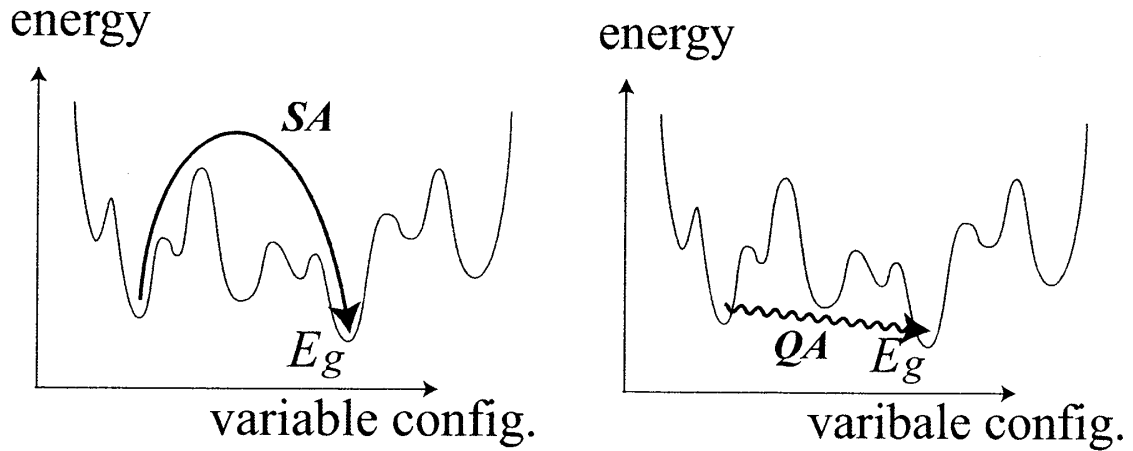


図 1: シミュレーティッドアニーリングと量子アニーリングのイメージ図。ハミルトニアンには局所的な極小が存在する。シミュレーティッドアニーリング (SA) では状態は熱揺らぎによって局所的な極小から別の極小へとエネルギー障壁を超えて飛び移る。量子アニーリング (QA) では状態はトンネル効果によって飛び移る。

を小さくする過程で量子相転移が起きる可能性があって [17]、その時にはエネルギーギャップが無限小になる。エネルギーギャップが閉じると断熱定理はもはや成り立たない。従ってハミルトニアンの変化率が有限である限り状態は転移点で非断熱遷移を起こす。しかし、ハミルトニアンの変化率を小さくすると状態の非断熱遷移の確率が小さくなり、終状態と基底状態の間の誤差が変化率とともに減少することは期待できる。残念ながら今のところシミュレーティッドアニーリングの Huse-Fisher 則のような一般論は存在しないが、ある非自明な模型については誤差が変化率の対数の逆ベキで減少することを示すことができる。

ここで量子アニーリングはシミュレーティッドアニーリングに比べて速いのかどうか、という疑問がわく。量子アニーリングの誤差に関する一般論がないために、この疑問に対する完全な答えは得られていない。しかし、いくつかの数値シミュレーションは量子アニーリングの優位性を示す結果を出している (第 3.4 節参照)。本論文の第 6 節では 1 次元模型ではあるが非自明なランダムイジング模型の最適化を例題に、熱力学極限で量子アニーリングによる誤差 (キंक密度) がハミルトニアンの変化率の逆数 τ とともに

$$\rho^{\text{QA}} \sim \frac{1}{(\ln \tau)^2} \quad (2)$$

で減少すること [19, 18]、シミュレーティッドアニーリングによるキंक密度が温度の変化率の逆数 τ とともに

$$\rho^{\text{SA}} \sim \frac{1}{\ln \tau} \quad (3)$$

で減少すること [20] を解析的に示す。この結果は、少なくとも 1 次元の非自明な模型で量子アニーリングの方が早く誤差が減少することを明らかにしている。

論文の構成

本論文では、まず組み合わせ最適化問題とイジング模型との対応、およびイジング模型のエネルギーマイニミゼーションを意図したシミュレーテッドアニーリングの方法を次節で紹介する。第3節から5節にかけてはシミュレーテッドアニーリングに比べてまだ新しい量子アニーリングについて掘り下げて述べる。具体的には第3節では量子アニーリングのアルゴリズムを説明し、数値シミュレーション、および関連する実験を紹介する。続く第4節には量子アニーリングの背後にある量子状態の断熱発展に関する4つの理論、断熱定理、Landau-Zener 理論、量子臨界点近傍におけるKibble-Zurek の議論、量子モンテカルロ法による状態発展の理論をまとめる。第5節では有限系で量子アニーリングを実行した場合の残留誤差を数値計算と断熱定理、Landau-Zener 公式に基づいて議論する。第6節は熱力学極限における量子アニーリングとシミュレーテッドアニーリングの比較に充てられる。1次元のイジング模型を考え、まず量子アニーリングによる誤差の減少率を導く。それ続いてシミュレーテッドアニーリング後の誤差の減少率を求め、結果として量子アニーリングによる誤差が速く減少することを示す。第7節では筆者の独断に基づいて今後の研究の発展を展望する。第8節はまとめである。

2 組み合わせ最適化問題とランダムイジング模型

ランダム K-SAT

5人の看護師 A, B, C, D, Eがいるとする。この5人で4組のペア (A, C), (B, C), (C, D), (A, E) を作る。それぞれのペアは次のように勤務時間が割り当てられる。

A と C	A : 日勤	C : 日勤
B と C	B : 夜勤	C : 日勤
C と D	C : 夜勤	D : 夜勤
A と E	A : 日勤	E : 夜勤

全ての人は日勤か夜勤のどちらか片方だけをして、各ペアで少なくとも1人は勤務しないといけないとする。条件を満足する勤務時間の割り当てはあるか？

これは充足 (Satisfiability, SAT) 問題と呼ばれる組み合わせ最適化問題である。この例題のように拘束条件が2人の間のみかかる時は特に2-充足 (SAT) 問題と呼ばれる。この問題をイジング模型であらわしてみたい。まず始めに、日勤に +1、夜勤に -1 をあてることにする。そして看護師 A, B, ..., E にイジングスピン $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_5$ を与える。拘束条件にはイジングスピン間の相互作用を対応させて、例えば A と C のペアの条件は $(1 - \sigma_1)(1 - \sigma_3)$ 、B と C のペアの条件は $(1 + \sigma_2)(1 - \sigma_3)$ とする。もしこれらの相互作用が0ならば条件が満たされており、4になれば満たされていないことになる。これらの相互作用を足し合わせて、次のハミルトニアンを作る。

$$H = \frac{1}{4}(1 - \sigma_1)(1 - \sigma_3) + \frac{1}{4}(1 + \sigma_2)(1 - \sigma_3) + \frac{1}{4}(1 + \sigma_3)(1 + \sigma_4) + \frac{1}{4}(1 - \sigma_1)(1 - \sigma_5) \quad (4)$$

このハミルトニアンは 0 以上の値をとり、基底状態がゼロエネルギーならば全ての条件を満足する勤務時間の割り当てがあることになる。今の場合、ゼロエネルギーの基底状態は存在して、

$$(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5) = (+1, -1, -1, \pm 1, \pm 1), (+1, \pm 1, +1, -1, \pm 1), (-1, \pm 1, +1, -1, -1) \quad (5)$$

となる。

ここで 2-SAT 問題を一般化したランダム 2-SAT 問題を定義する。 N 個のイジングスピン $\{\sigma_i\}$ ($i = 1, 2, \dots, N$) があるとする。そこから M 組のペアをランダムに選ぶ。 l 番目の組のペアを $(i_{1,l}, i_{2,l})$ と書くことにする。各ペアのそれぞれの要素に (日勤か夜勤に対応した) $+1$ か -1 をランダムに与える。それを ζ ($= \pm 1$) を書く。一つのペア $(i_{1,l}, i_{2,l})$ に対する拘束条件はイジングスピン間 $(1 - \zeta_{i_{1,l}} \sigma_{i_{1,l}})(1 - \zeta_{i_{2,l}} \sigma_{i_{2,l}})$ で表わされる。 $\sigma_{i_{1,l}}$ が $\zeta_{i_{1,l}}$ に等しいか、 $\sigma_{i_{2,l}}$ が $\zeta_{i_{2,l}}$ に等しいか、あるいはどちらも等しければ、相互作用は 0 になって拘束条件が満たされる。全てのペアに対する拘束条件を考慮したハミルトニアンは

$$H = \sum_{l=1}^M \frac{1}{4} (1 - \zeta_{i_{1,l}} \sigma_{i_{1,l}})(1 - \zeta_{i_{2,l}} \sigma_{i_{2,l}}) \quad (6)$$

で与えられる。このハミルトニアンのゼロエネルギー基底状態の有無を確認することがランダム 2-SAT 問題である。

ランダム 2-SAT 問題はさらに多体のランダム K-SAT 問題に拡張される。ランダム K-SAT 問題では N 個のスピンからランダムに K 個を選び、それをひと組として全部で M 組作る。各組の要素ひとつひとつに $\zeta = +1$ か $\zeta = -1$ をランダムに割り当てる。こうしてハミルトニアン

$$H = \sum_{l=1}^M \frac{1}{2^K} (1 - \zeta_{i_{1,l}} \sigma_{i_{1,l}})(1 - \zeta_{i_{2,l}} \sigma_{i_{2,l}}) \cdots (1 - \zeta_{i_{K,l}} \sigma_{i_{K,l}}) \quad (7)$$

を作る。このハミルトニアンのゼロエネルギー基底状態が存在するかどうかを確認するのがランダム K-SAT 問題である。

すでに明らかなようにハミルトニアン (5) および (7) で表わされるランダム K-SAT 問題はランダムイジング模型のエネルギー最小化問題と等価である。そもそもランダム K-SAT 問題は計算理論科学の基本問題であるが、ランダムイジング模型で表わされることから統計物理の研究テーマにもなっている。

統計物理の観点から興味深いことは、この問題は相転移を示すことである。容易に想像できるように、SAT 問題は拘束条件が増えれば増えるほど条件を満足する解 (SAT 解) は存在しにくくなる。拘束条件の数 M とイジングスピンの数 N の比 $\alpha = M/N$ を定義すると、 α にはある閾値 α_c があって、熱力学極限 $N \rightarrow \infty$ において $\alpha > \alpha_c$ で SAT 解は存在しなくなる。ランダム 2-SAT 問題では $\alpha_c = 1$ で、3-SAT 問題では $\alpha_c \approx 4.26$ と見積もられている。また、 α_c よりも小さい別の閾値 α_d を境に解を見つける困難さが急激に難しくなることも統計力学的な議論により示されている [21, 22, 23, 24]。

巡回セールスマン

5つの都市 1, 2, 3, 4, 5 がある。図 2にあるように都市 1 は都市 2, 3, 5 と結ばれている。その間の道のりがそれぞれ 9, 3, 5 だとする。同様に他の都市も別の都市と結ばれていて、その間の道のりが図のように与えられているとする。このとき、サラリーマンが都市 1 を出発して全ての都市を重複なく回って戻ってくるにはどのような順で行けばよいか？

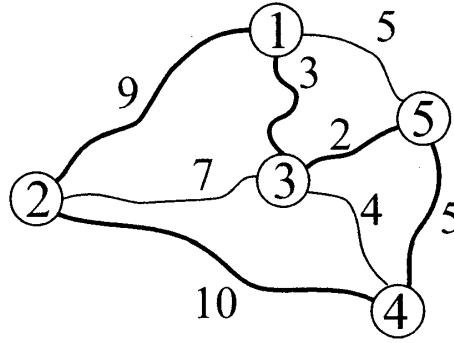


図 2: 巡回セールスマンのイメージ図。セールスマンは都市 1 から出発して全ての都市を訪れて元の都市に戻る。都市と都市を結ぶ道にはそれぞれ長さが割り振られている。どのような順番で都市を回ったらよいか。

この有名な巡回セールスマン問題をイジング模型で表わしてみる。都市と都市の間を結ぶ道をリンクと呼ぶことにする。リンクは次のように全部で 16 個ある。

$\langle 12 \rangle, \langle 13 \rangle, \langle 15 \rangle, \langle 21 \rangle, \langle 23 \rangle, \langle 24 \rangle, \langle 31 \rangle, \langle 32 \rangle, \langle 34 \rangle, \langle 35 \rangle, \langle 42 \rangle, \langle 43 \rangle, \langle 45 \rangle, \langle 51 \rangle, \langle 53 \rangle, \langle 54 \rangle$

リンク $\langle ij \rangle$ の道のりを $d_{\langle ij \rangle}$ と書く。図 2 の例では $d_{\langle 12 \rangle} = 9, d_{\langle 13 \rangle} = 3, \dots$ となる。各リンクにイジングスピン $\sigma_{\langle ij \rangle}$ を置く。リンクをサイトに見立てていることに注意してほしい。 $\sigma_{\langle ij \rangle} = +1$ ならそのリンクを通ることを意味し、 $\sigma_{\langle ij \rangle} = -1$ なら通らないことを意味する。全ての都市に必ず一回入って出ていくので、スピンには拘束条件 $\sum_j \sigma_{\langle ji \rangle} = 1$ かつ $\sum_j \sigma_{\langle ij \rangle} = 1$ (全ての i について) が課せられる。前者は必ず一回入ってくることを意味し、後者は出ていくことを意味する。巡回セールスマン問題はハミルトニアン

$$H = \sum_{\text{all links}} d_{\langle ij \rangle} \frac{\sigma_{\langle ij \rangle} + 1}{2} \quad (8)$$

を拘束条件

$$\sum_j \sigma_{\langle ji \rangle} = 1 \quad \text{かつ} \quad \sum_j \sigma_{\langle ij \rangle} = 1 \quad (\text{全ての } i \text{ について})$$

のもとで最小化する問題となる。この問題は拘束条件のついたランダム磁場中イジングスピンの問題である [25]。

スピングラス

スピングラスとは乱れを持った磁性であり、スピンの乱雑な相互作用により低温でランダムな配置で凍結してしまうスピンの「ガラス」を指す。スピングラスの研究は計算科学や情報科学における統計力学的研究の進展に多大な影響をもたらしている。ここには2つの標準的なスピングラスの理論模型を紹介する。

スピングラスの代表的な模型は

$$H = - \sum J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (9)$$

で表わされる。結合定数 $\{J_{ij}\}$ は与えられた分布に従ってランダムに選んで割り当てられる。

$$P_{\pm J}(J_{ij}) = q\delta(J_{ij} - J) + (1 - q)\delta(J_{ij} + J) \quad , \quad 0 \leq q \leq 1 \quad (10)$$

$$P_{\text{Gauss}}(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta J} \exp \left[-\frac{1}{2(\Delta J)^2} (J_{ij} - J)^2 \right] \quad , \quad \Delta J > 0 \quad (11)$$

前者は J_{ij} が確率 q で $+J$ 、 $(1 - q)$ で $-J$ となる。後者は J_{ij} が中心 J 、分散 $(\Delta J)^2$ の Gauss 分布に従っている。これらのように J_{ij} が正負の値をランダムにとるとき、式 (9) は Edwards-Anderson 模型と呼ばれる [26]。

Edwards-Anderson 模型のうちで、 J_{ij} が Gauss 分布に従い、一つのスピンの他の全てのスピンと結合している無限次元のものを Sherrington-Kirkpatrick 模型と呼ぶ。

$$H_{\text{SK}} = - \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (12)$$

Sherrington-Kirkpatrick 模型はレプリカ法を用いた平均場理論が厳密な結果を与える可解模型である [27]。この模型はスピングラス相の存在やレプリカ対称性の破れなどスピングラスの研究に本質的な役割を果たしている。

現実のスピングラスに近い模型は有限次元の Edwards-Anderson 模型である。2次元以上の有限次元模型は一般には解析的に解けないので、数値的な研究が行われている。Edwards-Anderson 模型のエネルギー最小化問題に注目すると、2次元は比較的短い（系のサイズとともに多項式で増える）計算時間で正しい解を得ることが可能である [28, 29]。3次元以上は NP 完全問題であることが証明されている [30]。NP 完全問題に対しては、計算時間が系のサイズとともに多項式で増大するようなアルゴリズムが存在しないと考えられている [31, 32]。

2.1 シミュレーティッドアニーリング

ランダムイジング模型のエネルギー最小化は一般には達成することが難しい。最も単純な方法はすべてのスピン配置を片っ端から調べあげることであるが、これには 2^N 回（ N はスピン数）の手間がかかり、現在の最先端の計算機を使っても $N = 100$ ですら厳密な答えを見つけることが一般にはできない。調べ上げとは全く別のアプローチとして最速降下法があるが、ランダムな模型には局所的なエネルギーの谷が存在するためにこの方法は使えない。模型によっては、たとえば2次元の Edwards-Anderson 模型のようにその模型に特化したアルゴリズムがあって、 N の多項式の手間で答えが得られる [28]。しかし、そのようなアルゴリズムは汎用性がない。シミュレー

ティッドアニーリングはそのようなランダムイジング模型に対して汎用的に使える、現実的な時間で近似的な答えを出すアルゴリズムである [3]。

シミュレーティッドアニーリングはもともとの絶対零度におけるイジング模型に有限温度の統計力学を応用する。温度が高くと、スナップショットを撮った時にある局所的なエネルギー極小に対応する状態が得られたとしても、次のショットでは別の極小に対応する状態が得られうる。つまり状態は熱運動によりエネルギー障壁を飛び越えて別の状態に時々刻々移っている（図 1 左参照）。平衡状態ではスピン配置 $(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ は Boltzmann 因子

$$\exp \left[-\frac{1}{T} H(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) \right] / \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[-\frac{1}{T} H(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) \right] \quad (13)$$

により分布する。高温であればあるほど状態間の移動は頻繁に起き、平衡状態までの緩和時間は短い。今、ランダムイジング模型で表わされる系が高温の熱浴に接していて、その温度の平衡状態にあるとしよう。そこから徐々に熱浴の温度を下げていく。温度の下げ方がゆっくりならば系は各温度での平衡状態を保つであろう。その結果、絶対零度において基底状態が得られることになる。

もちろん温度変化が速すぎると系はその変化についてゆけずに平衡状態からずれてしまう。ではどれくらいまで速く下げても大丈夫なのだろうか？ Geman-Geman [4] は、系のサイズ N が有限のとき、温度 $T(t)$ の変化が

$$T(t) = \frac{AN}{\ln(t+2)} \quad (14)$$

よりもゆっくりならば $t \rightarrow \infty$ つまり $T(t) \rightarrow 0$ で系の状態は基底状態に収束することを示した。ただし t は時間、 A は模型に依存する定数である。同様の結論は最近、絶対零度の量子系を有限温度の古典系に写像することで量子力学の断熱定理からも導かれている [33]。

実際にシミュレーションを行う時は t は有限で打ち切らなければいけない。またサイズ N が大きくて、有限といえども熱力学極限の系と近似的にみなせる状況もあり得る。Huse-Fisher は熱力学極限でシミュレーティッドアニーリング後の残留エネルギーが時間とともにどのように減少するかを明らかにした [5]。ここで残留エネルギーはアニーリング後の系のエネルギーと基底エネルギーの差である。彼らが導いた結論は、時間 τ かけてアニーリングを行うと残留エネルギーは τ の関数として

$$E_{\text{res}} \sim 1/(\ln \tau)^\zeta, \quad \zeta \leq 2 \quad (15)$$

で減少することである。ただし ζ は模型の詳細（結合定数 J_{ij} の分布や系の次元）によって異なる値をとりうる。

Huse-Fisher による式 (15) の導出は以下のようなものである。彼らは多数のエネルギーの谷を持った系を 2 準位系の集まりと考えた。今、2 準位間のエネルギー差を Δ 、2 準位間に横たわるエネルギー障壁の大きさを B とする（図 3）。 $p(t; \Delta, B)$ を時刻 t で系が高い方の準位に励起している確率とする。 $p(t; \Delta, B)$ が従うマスター方程式は

$$\frac{d}{dt} p(t; \Delta, B) = e^{-(B+\Delta)/T(t)} (1 - p(t; \Delta, B)) - e^{-B/T(t)} p(t; \Delta, B) \quad (16)$$

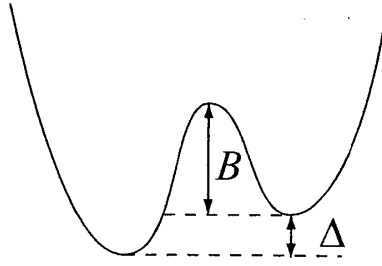


図 3: 2 準位系の概念図。

で与えられる。温度は時間 τ かけて $T(0) = T_0$ から $T(\tau) = 0$ まで下げられるとする。素朴に考えると、単位時間に上の準位から下の準位に移る遷移確率 $e^{-B/T}$ が $\tau e^{-B/T^*} = 1$ となるような温度 T^* で系は平衡状態を保てなくなる。つまり温度を T^* 以下に下げても系は T^* での平衡状態で止まってしまう。したがって温度がゼロになった時の励起確率は $p(\tau; \Delta, B) \approx e^{-\Delta/T^*} = \tau^{-\Delta/B}$ となる。このことは方程式 (16) の解を漸近解析することによって実際に確かめることもできる (Appendix A)。終時刻における励起確率から 2 準位系の残留エネルギーは $\Delta p(\tau; \Delta, B)$ で与えられる。これより、 B と τ が与えられた時に残留エネルギーを最大にするエネルギーギャップ Δ は $\frac{d}{d\Delta}(\Delta p(\tau; \Delta, B)) = 0$ より $\Delta = B/\ln \tau$ であることがわかる。すなわち、様々な Δ を持った 2 準位系の集合を考えると、 τ が大きい極限では全体の残留エネルギーは Δ が小さい 2 準位系が支配することになる。

ここでエネルギーギャップ Δ 、および障壁 B を持つような 2 準位系の密度 $\Phi(\Delta, B)$ を導入する。 B を固定した時にギャップ Δ が無限小の 2 準位系が有限の密度 $\Phi(0, B) > 0$ で存在すると仮定する。全体の残留エネルギー密度は

$$\epsilon(\tau) = \int_0^\infty dB \int_0^\infty d\Delta \Phi(\Delta, B) \Delta p(\tau; \Delta, B) \quad (17)$$

で与えられる。 $\Phi(\Delta, B)$ は $\Delta p(\tau; \Delta, B)$ に比べて Δ の関数としてなめらかであるとしてよく、 $\Delta p(\tau; \Delta, B)$ は $\Delta = B/\ln \tau$ で極大となることを使うと

$$\epsilon(\tau) \approx \int_0^\infty dB \Phi(B/\ln \tau, B) \int_0^\infty d\Delta \Delta p(\tau; \Delta, B) \quad (18)$$

となる。大きな障壁 B を持つ 2 準位系の密度は無視できるとすると積分の中では τ が大きい極限で $\Phi(B/\ln \tau, B) \approx \Phi(0, B)$ としてよい。公式 $\int_0^\infty dx x e^{-x/a} = a^2$ を用いると、結局

$$\epsilon(\tau) \approx \frac{1}{(\ln \tau)^2} \int_0^\infty dB \Phi(0, B) B^2 \quad (19)$$

が得られる。ただし大きな障壁 B を持つ 2 準位系の密度が無視できないときは $\ln \tau$ のべきが小さくなって $\epsilon(\tau)$ の減少率がより小さくなりうる。一方、ギャップ $\Delta \rightarrow 0$ で 2 準位系の密度がなくなる時は $\epsilon(\tau)$ は $\ln \tau$ ではなく τ のべきで減少する。

なお、Shinomoto-Kabashima はスピングラス模型ではなく 1 次元調和ポテンシャル中の粒子の拡散の問題を解き、粒子が位置を変えようとすると必ずある高さのエネルギー障壁を超えないといけないとした場合には残留エネルギーは $1/\ln \tau$ に比例して減少することを示している [34]。

3 量子アニーリング

このセクションでは量子アニーリングの実行法について具体的に説明し、その後に幾つかの実行例と実験を紹介する。

3.1 量子アニーリングのアルゴリズム

N 個のイジングスピン $(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) = (\{\sigma_i\})$ の関数であるハミルトニアン $H_{\text{pot}}(\{\sigma_i\})$ があるとする。この最小値とそれを与えるイジングスピンの配置を求めることが課せられた問題である。全てのスピン配置 $(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ をしらみつぶしに調べれば問題の答えを得ることができるが、 N が大きいと不可能である。

ここで、問題を線形空間の中で定義しなおそう。イジングスピン $(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ は Pauli スピン演算子の z 成分に置き換える。演算子 $\hat{\sigma}_1^z, \hat{\sigma}_2^z, \dots, \hat{\sigma}_N^z$ の固有状態ベクトルを $|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle$ とする。問題は $H_{\text{pot}}(\{\hat{\sigma}_i^z\})$ の基底固有エネルギーと基底固有状態を求めることになる。

量子アニーリングではここで「運動エネルギー」を導入する。ただし、ここでいう「運動エネルギー」はその基底固有状態が自明にわかり、かつその状態に求めたい H_{pot} の基底状態が重ね合わせとして含まれていないといけない。そのような運動エネルギーには選択の自由度があるが [35]、Pauli スピン演算子の x 成分 $\hat{\sigma}_i^x$ を用いて $H_{\text{kin}}(\{\hat{\sigma}_i^x\}) = -\sum_i \hat{\sigma}_i^x$ 、つまり横磁場による Zeeman エネルギーを運動エネルギーにとるのが単純である。ポテンシャルエネルギー $H_{\text{pot}}(\{\hat{\sigma}_i^z\})$ と運動エネルギー $H_{\text{kin}}(\{\hat{\sigma}_i^x\})$ は非可換であり、 H_{kin} の基底状態には H_{pot} の固有状態はすべて含まれている。

次に運動エネルギー $\hat{H}_{\text{kin}} \equiv H_{\text{kin}}(\{\hat{\sigma}_i^x\})$ とポテンシャルエネルギー $\hat{H}_{\text{pot}} \equiv H_{\text{pot}}(\{\hat{\sigma}_i^z\})$ を使って次のような時間に依存したハミルトニアンを作る。

$$\hat{H}(t) = f(t)\hat{H}_{\text{kin}} + g(t)\hat{H}_{\text{pot}}. \quad (20)$$

ここで $f(t)$ と $g(t)$ は $\hat{H}(t)$ の中の $\hat{H}_{\text{kin}}$ と $\hat{H}_{\text{pot}}$ の重みを時刻 t とともに変える因子で、 $t = 0$ で $f(t)/g(t) \rightarrow \infty$ 、 $t \rightarrow \tau$ で $f(t)/g(t) \rightarrow 0$ となるようにする。 τ は終時刻を表わす正の数である。そのような $f(t)$ と $g(t)$ はいくらでも作れるが、 t に線形な

$$f(t) = 1 - \frac{t}{\tau}, \quad g(t) = \frac{t}{\tau} \quad (21)$$

が単純なものである。

系の状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ の時間発展は Schrödinger 方程式

$$i\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\Psi(t)\rangle \quad (22)$$

に従う。 $t = 0$ の初期状態として $\hat{H}_{\text{kin}}$ の基底状態 $|\Psi_{\text{kin}}^0\rangle$ を用意する。 $t = \tau$ まで時間発展すると、 τ が十分永ければ状態は断熱的に発展して $|\Psi(\tau)\rangle$ は $\hat{H}_{\text{pot}}$ の基底状態となる。図 4 は状態の断熱発展により自明な $\hat{H}_{\text{kin}}$ の基底状態から $\hat{H}_{\text{pot}}$ の基底状態を得ることを示したものである。このよう

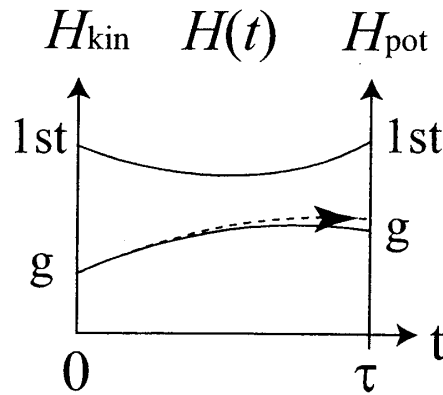


図 4: $\hat{H}_{\text{kin}}$ の自明な基底状態から求めたい $\hat{H}_{\text{pot}}$ の基底状態へと状態が断熱的に発展することを表す概念図。

に量子アニーリングは状態の量子力学的な断熱発展を利用して $\hat{H}_{\text{pot}}$ のエネルギー最小化を行う。このことから量子アニーリングは**量子断熱計算 (quantum adiabatic computation)** とも呼ばれている。

ここでシミュレーテッドアニーリングと量子アニーリングの違いについて触れておきたい。前者は温度を導入し、いろいろな状態の混合状態をつくる。そこから温度冷却しながら系を時間発展させ、絶対零度極限で基底状態を得る。物理量は状態の確率分布によって求められ、確率分布の時間発展はマスター方程式によって記述される。一方、後者では温度は絶対零度のままで量子的な「運動エネルギー」を導入することによりいろいろな古典状態（イジングスピンの固有状態）の重ね合わせ状態を作る。そこから運動エネルギーを減らしつつ状態を断熱発展させ、運動エネルギーゼロの極限でポテンシャルエネルギーの基底状態を得る。物理量は状態の確率分布によって求められるが、確率分布は状態ベクトルの絶対値 2 乗で与えられる。そして状態ベクトルの時間発展は Schrödinger 方程式によって記述される。このように、シミュレーテッドアニーリングと量子アニーリングでは古典状態間の飛び移りとしてそれぞれ熱と運動エネルギーを導入する。これが違いの一つである。もう一つはマスター方程式と Schrödinger 方程式という運動法則の違いである。これらの違いがシミュレーテッドアニーリングと量子アニーリングで終状態にどのような違いをもたらすかは非常に興味深い問題である。

3.2 量子計算機による実行

量子計算機ではイジングスピンに対応する二つの状態 $|0\rangle$ 、 $|1\rangle$ の任意の重ね合わせを量子ビット（またはキュービット）と呼ぶ。 i サイト上の状態 $|0\rangle_i$ 、 $|1\rangle_i$ が Pauli スピンの z 成分 $\hat{\sigma}_i^z$ の固有状態であるとする。すなわち $\hat{\sigma}_i^z|0\rangle_i = |0\rangle$ 、 $\hat{\sigma}_i^z|1\rangle_i = -|1\rangle$ が成り立つとする。Pauli スピンの x 成分については $\hat{\sigma}_i^x|0\rangle = |1\rangle$ 、 $\hat{\sigma}_i^x|1\rangle = |0\rangle$ が成り立つ。今、量子ビット間のイジング模型的な相互作用 $\hat{\sigma}_i^z\hat{\sigma}_j^z$ の結合が操作できて、なおかつ横磁場の強さを変えられる装置を作れたとする。その装置は横磁場中のランダムイジング模型を実現することができ、さらに量子アニーリング（量子断熱計

算)によってランダムイジング模型の基底状態を求めることができる。言い換えれば装置は量子計算機であり、量子アニーリングは計算のアルゴリズムである。

量子計算機により量子アニーリングの手法によって組み合わせ最適化問題を解くという試みは Farhi らによって提案された [10]。彼らは Schrödinger 方程式を数値的に解くことにより 20 量子ビットまでの系で量子アニーリングを実行し、充足問題の一種である Exact Cover 問題を解いた。結果は一定精度のもとで解を得るためにかかる時間がサイズの 2 次多項式でフィットできるというものだった [36]。彼らが解いた Exact Cover 問題は NP-完全問題の一種であり、古典計算機で解くのに必要な時間はサイズの指数関数で増加すると信じられている。Farhi らの結果は量子計算が NP-完全問題を多項式時間で解くかもしれないということを示唆する。しかし、数値計算を行ったサイズが小さいことや、別の NP-完全問題で指数関数的に増加する場合は報告されていることから [37, 38, 39]、文献 [36] の結果は必ずしも受け入れられているとは言い難い。いずれにせよ、量子アニーリングのアルゴリズムを使って組み合わせ最適化問題を量子計算で解くことができることは重要であり、現在も盛んに研究が行われている。ちなみに量子断熱計算という言葉は Farhi らによってつけられた。量子計算の分野では量子アニーリングよりも量子断熱計算の呼び名の方が定着している。

量子断熱計算を実際に行う量子計算機は今のところ存在しない⁴。しかし、量子断熱計算の基礎実験は行われている。次に NMR を用いた実験と超伝導磁束量子ビットを用いた実験について触れる。

3.2.1 NMR による実験

Steffen らは NMR を用いて量子断熱計算を行い、3 スピンの MAXCUT 問題を解いた [42]。MAXCUT 問題は、多角形を線で二つに切り分ける最適なやり方を探す問題で、多角形の各辺には重みが与えられており、線が切る辺の重みの和が最大になるようなものを探す。この問題に対して、頂点にイジングスピンを与え、線で切り取られた片側の頂点は +1、もう片側の頂点は -1 を取るようにする。各頂点にも重みがあるとして、+1 の側の頂点の重みも含めるように拡張した MAXCUT 問題のポテンシャルハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_{\text{pot}} &= \sum_i w_i \frac{1}{2} (1 + \sigma_i) + \sum_{i \neq j} w_{ij} \frac{1}{4} (1 + \sigma_i)(1 - \sigma_j) \\ &= \sum_i w_i \frac{1}{2} \sigma_i - \sum_{i < j} w_{ij} \frac{1}{2} \sigma_i \sigma_j \end{aligned} \quad (23)$$

となる。ただし二つめの等号では定数項は無視している。ここで w_i は頂点の重み、 w_{ij} は辺の重みである。以下では頂点の重みは頂点によらず一定であるとする。問題はこのポテンシャルハミルトニアンを最大エネルギーとそれを与えるスピン配置を求めることとなる。

⁴2007 年 2 月にカナダの D-Wave 社が量子断熱計算を行う 16 量子ビットの計算機を作り、数独パズルを解いたという驚くべきプレスリリースを行った [41]。彼らはさらに 2008 年末までに 1000 量子ビットの計算機を作って商品化すると言っている。ただし、彼らの作った計算機が本当に量子計算機で量子断熱計算を行っているかどうかは、論文になっていないわけでもなく注目には値するが真偽は不明である。

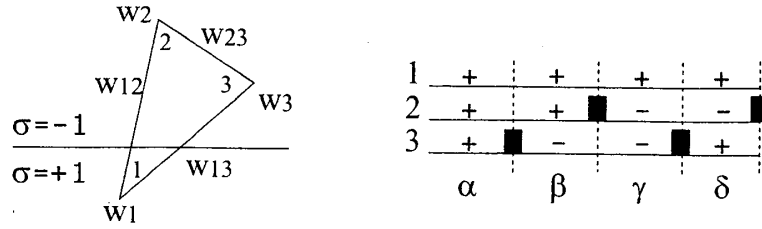


図 5: 左: 3 体 MAXCUT 問題の説明図。各頂点に重み w_i が与えられ、頂点を結ぶ辺には重み w_{ij} が与えられる。この図形を線で切り分けることを考える。MAXCUT 問題は切られる辺の重みの和が最大になるような切り方を探す問題である。MAXCUT 問題の拡張版では、頂点の重みも含めて、 $H = \sum_i w_i \sigma_i + \sum_{i,j} \sigma_i (1 - \sigma_j) w_{ij}$ を最大にするような $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ の配置を求める。ここで頂点にはイジングスピン σ_i を与え、線で分けられた同じグループに属する頂点は同じスピンを持つとする。右: NMR で用いるスピンの向きの平均化を表す模式図。

Steffen らの実験では ^1H 、 ^{19}F 、 ^{13}C の三つの原子核スピンにより 3 体のハミルトニアン、式 (23) を構成した。大きさ $\frac{1}{2}$ の核スピンの演算子を $\hat{\sigma}_i^{x,y,z}$ と書くことにする。三つの原子核が相互作用しており、そこに磁場 B_0 をかけると相互作用が異方的になり、近似的に $\hat{H} = -\sum_i \frac{1}{2} \omega \hat{\sigma}_i^z + \sum_{i<j} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z$ というハミルトニアンで系を記述できる。ここで ω は磁場によるラーモア振動数、 J_{ij} は核スピン間の相互作用定数である。MAXCUT 問題を作るには核スピン間の相互作用を問題の値に調節しないといけないが、そのような系を始めから作るのは難しい。そこで B_0 に垂直な方向に交流磁場 B_1 をかける。核スピンによって共鳴周波数が異なることから、 B_1 を一つの核スピンの共鳴周波数で適当な時間幅でパルス的にかける (π パルス) と核スピンを一つだけを反転させることができる。図 5 の右には B_1 をかけるスケジュールと核スピンの向きが示されている。始めのスピンの向きを $+$ とし、 α 時間後に核 3 の共鳴周波数でスピンの反転するように π パルスにかかる。すると核 3 のスピンは $-$ となる。次に β 時間後に今度は核 2 の共鳴周波数で π パルスにかかる。さらに γ 時間後に核 3 の共鳴周波数で π パルスにかかる。最後に δ 時間後に核 2 の周波数で π パルスにかかる。その結果、すべての核スピンはもとの $+$ の状態にもどる。この時、最初の $\alpha + \beta$ の間は核 1 と 2 の間の相互作用は J_{12} であるが、次の $\gamma + \delta$ の間は $-J_{12}$ となる。全部の時間で平均すると有効的な相互作用は $(\alpha + \beta - \gamma - \delta) J_{12}$ となり、これを w_{12} とおく。同様に核 1 と 3 の相互作用は $(\alpha - \beta - \gamma + \delta) J_{13} = w_{13}$ 、2 と 3 は $(\alpha - \beta + \gamma - \delta) J_{23} = w_{23}$ とする。これらの方程式を α 、 β 、 γ 、 δ について解き、そのスケジュールで共鳴磁場をかけることで問題の w_{ij} を実現させる。

横磁場のハミルトニアン $\hat{H}_{\text{kin}} = \sum_i \hat{\sigma}_i^x$ は核スピンのそれぞれの共鳴周波数で垂直磁場 B_1 をかけることで実現できる。初期状態は $\hat{H}_{\text{kin}}$ の最大エネルギー固有状態にとる。それはそれぞれの核スピンの x 方向を向いた状態である。それは z 方向に向いているスピンに x 方向に $\pi/2$ パルスをかけて $-y$ 方向に向かせ、さらに z 方向に $\pi/2$ パルスをかけて x 方向に向かせれば作られる (Hadamard ゲート)。

さて、量子断熱計算を行うにはハミルトニアンを時間変化させないといけない。今の場合、横磁場とポテンシャルを同時にスイッチオンすることができない。そこで、計算時間 τ を 1 ずつ分

割し、さらに各区間を τ 等分する。最初の区間では横磁場ハミルトニアン H_x の時間とポテンシャルハミルトニアン H_z の時間を $\tau-1$ 対 1 とする。次の区間では $\tau-2$ 対 2、次は $\tau-3$ 対 3、... という具合に徐々にポテンシャルハミルトニアン H_z の時間を延ばしていく。最後の区間はポテンシャルハミルトニアン H_z だけの時間となる。

以上のようにして Steffen らは実際に量子断熱計算を行い、 τ が大きくなると終状態が MAXCUT 問題の答えの状態に近づくことを確かめた。

NMR 以外にも超伝導磁束量子ビットを用いた実験も行われている。やはり 3 体の MAXCUT 問題が取り上げられているが、今のところ横磁場イジング模型の系を作ることに成功している段階である。ハミルトニアンを変化させ、状態を断熱発展させて計算を行うまでには至っていない [43]。

3.3 古典計算機による実行

量子アニーリングが量子計算のアルゴリズムになっていることを述べたが、現在のところ実用的な量子計算機は実現しておらず、具体的に組み合わせ最適化問題を解くためには古典計算機に頼らざるを得ない。このセクションでは古典計算機で量子アニーリングを実行する方法について述べる。

3.3.1 DMRG による実行

量子アニーリングを実行するためには Schrödinger 方程式を解いて状態ベクトルの時間発展を計算しないといけない。状態ベクトルの成分数はスピンの数を N とすると 2^N なので、それらの連立微分方程式を数値的にまともに解くことは $N \sim 10$ 程度が限界である。その程度ならすべてのスピン配置をしらみつぶしに調べた方が早い。大きな N に対して数値計算を行うためには何らかの工夫が必要である。密度行列繰り込み群 (DMRG) による時間発展の方法 [44] は $N \gtrsim 10^2$ に対する計算を可能にする方法である。

ハミルトニアン $\hat{H}(t)$ が与えられているとして、状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ が時刻 t から微小時間 Δt だけ時間発展したとする。Schrödinger 方程式 (22) に従った時間発展は

$$|\Psi(t + \Delta t)\rangle \approx e^{-i\hat{H}(t)\Delta t} |\Psi(t)\rangle \quad (24)$$

となる。ここで $e^{-i\hat{H}(t)\Delta t}$ は時間発展演算子と呼ばれる。この演算子を繰り返し作用させることで、時刻 $t = 0$ から τ まで時間発展した状態ベクトルが得られる。

$$|\Psi(\tau)\rangle \approx e^{-i\hat{H}((N_\tau-1)\Delta t)\Delta t} \dots e^{-i\hat{H}(\Delta t)\Delta t} e^{-i\hat{H}(0)\Delta t} |\Psi(0)\rangle. \quad (25)$$

ここで N_τ は $\tau = N_\tau \Delta t$ を満たす数である。式 (24) は t から $t + \Delta t$ の間にハミルトニアン $\hat{H}(t)$ が変化しなければ厳密に成り立つ。したがって、 n を 0 から $N-1$ までの整数とすると、ハミルトニアンが $n\Delta t \leq t \leq (n+1)\Delta t$ の間 $\hat{H}(t) = \hat{H}(n\Delta t)$ であるような離散的な時間変化をするときには式 (25) は厳密となる。

以下、1次元の量子スピン系を考える。自由境界条件を仮定し、相互作用は最近接対にのみ働くものとする。ハミルトニアン $\hat{H}(t)$ は局所的なハミルトニアンの和として $\hat{H}(t) = \hat{H}_1(t) + \hat{H}_2(t) + \dots + \hat{H}_{N-1}(t)$ のように書ける。 $\hat{H}_i(t)$ はサイト i と $i+1$ の間の相互作用と外場による一体の項を含む。 N はサイトの数である。時間発展演算子は局所的なハミルトニアンにより次のように分割される。

$$e^{-i\hat{H}\Delta t} \approx e^{-i\hat{H}_1\Delta t/2} \dots e^{-i\hat{H}_{N-1}\Delta t/2} e^{-i\hat{H}_{N-1}\Delta t/2} \dots e^{-i\hat{H}_1\Delta t/2}. \quad (26)$$

ただしハミルトニアンが時間に依存することを意味する (t) は省略した。ここでの近似は $\mathcal{O}((\Delta t)^2)$ までは正しい。

DMRG では1次元スピン系を左ブロック、 i サイト、 $i+1$ サイト、右ブロックの4つに分け、状態ベクトルを

$$|\Phi\rangle = \sum_{a,b,k,l} \phi_{a,b,k,l} |a\rangle_L |k\rangle_i |l\rangle_{i+1} |b\rangle_R \quad (27)$$

のように表現する。ただし、 $|a\rangle_L$ 、 $|b\rangle_R$ 、 $|k\rangle_i$ 、 $|l\rangle_{i+1}$ はそれぞれ右ブロック、左ブロック、 i サイト、 $i+1$ サイトの基底を表す。 $|k\rangle_i$ と $|l\rangle_{i+1}$ を $\hat{\sigma}_i^z$ や $\hat{\sigma}_{i+1}^z$ の固有状態のような自明な基底にしておけば、局所的な時間発展演算子 $e^{-i\hat{H}_i\Delta t/2}$ のそれらの基底における行列要素は書き下せるので、

$$e^{-i\hat{H}_i\Delta t/2} |\Phi\rangle = \sum_{a,b,k,l} \tilde{\phi}_{a,b,k,l} |a\rangle_L |k\rangle_i |l\rangle_{i+1} |b\rangle_R \quad (28)$$

$$\tilde{\phi}_{a,b,k,l} = \sum_{k',l'} \left[e^{-i\hat{H}_i\Delta t/2} \right]_{kl,k'l'} \phi_{abk'l'} \quad (29)$$

を求めることができる。

次の局所的な時間発展演算子 $e^{-i\hat{H}_{i+1}\Delta t/2}$ を作用させるために状態ベクトルの基底を取り直す。そのためにまず密度行列を $\tilde{\phi}_{a,b,k,l}$ からつくり、それをユニタリ一行列により対角化する。

$$\rho_{ak;a'k'} \equiv \sum_{b,l} \tilde{\phi}_{a,b,k,l} \tilde{\phi}_{a',b,k',l}^* = \sum_c u_{c,ak} d_c u_{c,a'k'}^*. \quad (30)$$

ただし、 d_c は密度行列の固有値で、 $u_{c,ak}$ はユニタリ一行列である。このユニタリ一行列を使って左ブロックと i サイトを束ねる新しい基底を作る。

$$|a\rangle_{L'} = \sum_{a',k'} u_{a,a'k'} |a'\rangle_L |k'\rangle_i. \quad (31)$$

この基底は密度行列の固有値 d_a の固有ベクトルに対応する。基底の数は密度行列の次元の数だけあるが、固有値がある程度大きいものだけを残し、小さいものを捨てるのが密度行列繰り込み群の方法である [45]。密度行列の固有値が大きい固有状態を基底にとることは、状態のノルムを保つように近似を行うことに相当する。1次元系ではいくらサイズが大きくなっても密度行列の固有値で無視できない値を持つ数はたかが知れていて、多くても計算機のメモリーに収まる程度であることが知られている。さて、右ブロックの基底は以前にそのブロックを作る時に使ったユニタ

リー行列 $v_{b,lb'}$ と $i+2$ サイトの基底 $|l\rangle_{i+2}$ 、左端のサイトを切り離れた一つ少ない右ブロックの基底 $|b'\rangle_{R'}$ を用いて

$$|b\rangle_R = \sum_{l,b'} v_{b,lb'} |l\rangle_{i+2} |b'\rangle_{R'} \quad (32)$$

と表す。式 (31) と (32) により式 (28) を

$$\sum_{a,b,k,l} \tilde{\phi}_{a,b,k,l} |a\rangle_L |k\rangle_i |l\rangle_{i+1} |b\rangle_R = \sum_{a,b,k,l} \phi'_{a,b,k,l} |a\rangle_{L'} |k\rangle_{i+1} |l\rangle_{i+2} |b\rangle_{R'} \quad (33)$$

$$\phi'_{a,b,k,l} = \sum_{a',b',k'} \tilde{\phi}_{a',b',k',k} u_{a,a'}^* v_{b',lb} \quad (34)$$

と書き換えておく。この表式により $e^{-i\hat{H}_{i+1}\Delta t/2}$ を作用させることが可能となる。このようにして密度行列の固有状態で基底を変換しながら局所的な時間発展演算子を次々に作用させて状態を時間発展させる方法が密度行列繰り込み群による時間発展の方法である。

DMRG の方法は密度行列の固有値で無視できないものの数が多いと精度を保つのが難しい。最近接間のみで相互作用がある 1 次元量子スピン系はその数が多くないことがわかっている。逆に高次元では多くなる。従って DMRG による時間発展の方法も今のところ 1 次元系かそれに準ずる系のみで有効である。高次元の系に対しては今後の大幅な改良がない限り有効ではない。その方面の研究は行われているので今後の発展が期待される [46, 47]。仮に 1 次元系のみにも有効だとしても、そこには様々なタイプの模型があり、さらにまともにはとても解くことができない大きな系の Schrödinger 方程式を解くことができる点で DMRG の時間発展の方法は意義深い [48, 49]。

3.3.2 量子モンテカルロ法による実行

組み合わせ最適化問題を解くことを目的とするならば必ずしも Schrödinger 方程式に従った時間発展にこだわる必要はない。ここで述べる量子モンテカルロ法 [50, 51] による量子アニーリングは Schrödinger 方程式の代わりに確率的な時間発展を用いる。したがって量子モンテカルロ法による方法はもはや量子計算とは言えない。しかしスピン数 $N \sim 10^4$ を超えるサイズの系で計算を行える唯一の方法と言ってよい。以下では演算子につけていた $\hat{\cdot}$ を省略する。

横磁場中のイジング模型

$$H = -\Gamma \sum_i \sigma_i^x + \Lambda H_{\text{pot}}(\{\sigma_i^z\}) \quad (35)$$

を考える。 Γ と Λ は横磁場とイジングハミルトニアンを調節するパラメータである。逆温度を β として分配関数 $\text{Tr}[e^{-\beta H}]$ を Suzuki-Trotter 分解する。

$$\begin{aligned} \text{Tr}[e^{-\beta H}] &= \sum_{\{\sigma_i^{(1)}\}} \sum_{\{\sigma_i^{(2)}\}} \cdots \sum_{\{\sigma_i^{(M)}\}} \langle \{\sigma_i^{(1)}\} | e^{-\Delta\beta H} | \{\sigma_i^{(2)}\} \rangle \\ &\quad \times \langle \{\sigma_i^{(2)}\} | e^{-\Delta\beta H} | \{\sigma_i^{(3)}\} \rangle \cdots \langle \{\sigma_i^{(M)}\} | e^{-\Delta\beta H} | \{\sigma_i^{(1)}\} \rangle. \end{aligned} \quad (36)$$

ここで M は Trotter 数で、 $\Delta\beta = \beta/M$ である。 M が大きい極限では次の式変形ができる。

$$\begin{aligned} \langle \{\sigma_i\} | e^{-\Delta\beta H} | \{\sigma'_i\} \rangle &\approx \langle \{\sigma_i\} | e^{-\Delta\beta \Lambda H_{\text{pot}}(\{\sigma_i^z\})} e^{\Delta\beta \Gamma \sum_i \sigma_i^z} | \{\sigma'_i\} \rangle \\ &= (\cosh \Delta\beta \Gamma \sinh \Delta\beta \Gamma)^{N/2} \\ &\quad \times \exp \left[-\Delta\beta \Lambda H_{\text{pot}}(\{\sigma_i\}) - \frac{1}{2} \ln(\tanh \Delta\beta \Gamma) \sum_i \sigma_i \sigma'_i \right] \end{aligned} \quad (37)$$

式 (37) を (36) に代入すると次式が得られる。

$$\text{Tr}[e^{-\beta H}] = (\cosh \Delta\beta \Gamma \sinh \Delta\beta \Gamma)^{MN/2} \sum_{\{\sigma_i^{(1)}\}} \sum_{\{\sigma_i^{(2)}\}} \cdots \sum_{\{\sigma_i^{(M)}\}} e^{-\Delta\beta \tilde{H}(\{\sigma_i^{(l)}\})} \quad (38)$$

$$\tilde{H}(\{\sigma_i^{(l)}\}) = \Lambda \sum_{l=1}^M H(\{\sigma_i^{(l)}\}) - \frac{1}{\Delta\beta} \ln(\coth \Delta\beta \Gamma) \sum_i \sum_{l=1}^M \sigma_i^{(l)} \sigma_i^{(l+1)} \quad (39)$$

式 (39) のハミルトニアンは $\Lambda H_{\text{pot}}(\{\sigma_i\})$ で表わされる系のレプリカが M 個あり、隣のレプリカの対応するスピン同士が $J = \frac{1}{\Delta\beta} \ln(\coth \Delta\beta \Gamma)$ の強さで強磁性的に相互作用している系を表す。この模型に対してモンテカルロシミュレーションを行うのが横磁場イジング模型 (35) の最も単純な量子モンテカルロ法である。

ここで量子アニーリングを行うことを考える。基底状態を実現できるように逆温度 β は大きくとり、Suzuki-Trotter 分解の誤差を小さくするために $\Delta\beta$ は十分に小さくとる。横磁場とイジングハミルトニアンの比 Γ/Λ を大きくとり、ある程度モンテカルロ計算を行って低温の平衡状態を得る。そこから、モンテカルロステップを進めるごとに徐々に Γ を小さくしながら Λ を大きくしていく。最終的には $\Gamma = 0$ 、 $\Lambda = 1$ になるようにする。 $\Gamma = 0$ と $\Lambda = 1$ が変化していても、それぞれの値での平衡状態のまま発展していけば最終的にイジングハミルトニアン H_{pot} の平衡状態が得られると期待できる。温度が十分低温ならばそれは近似的に基底状態である。

量子モンテカルロ法による量子アニーリングは真の意味で Schrödinger 方程式に従う量子力学的な時間発展を利用していない。しかし、実際にシミュレーションを行ってある程度うまくいくことが確かめられている。さらに上記の方法で逆温度 β のもとで量子アニーリングを行って、横磁場の平衡状態から H_{pot} の平衡状態に収束することが数学的にも証明されている [52]。証明については第 4.4 節で述べることにする。

3.4 シミュレーティッドアニーリングとの定性的な比較

Kadowaki-Nishimori は論文 [9] の中で、8 スピン系のイジング模型に対して量子アニーリングとシミュレーティッドアニーリングを比較した。8 スピン系では時間発展の方程式を数値的に解くことが可能である。彼らは量子アニーリングについては Schrödinger 方程式を、シミュレーティッドアニーリングについてはマスター方程式を実際に解いた。量子アニーリングでは横磁場を $\Gamma = 3/\sqrt{t}$ 、シミュレーティッドアニーリングでは温度を $T = 3/\sqrt{t}$ で下げる。時間発展後の状態と真の基底状態とのオーバーラップは長時間極限で量子アニーリングの方が大きくなるという結果が得られている [9]。

Kadowaki はさらに量子モンテカルロ法による量子アニーリングとシミュレーティッドアニーリングを比較した [53]。\$N = 51\$ の Sherrington-Kirkpatrick 模型 (式 (12)) に対してはやはり横磁場を \$\Gamma = 3/\sqrt{t}\$、温度を \$T = 3/\sqrt{t}\$ で下げると基底状態とのオーバーラップは量子アニーリングの方が大きくなっている。さらに 16 都市の巡回セールスマン問題に対して同様のシミュレーションを行った場合は、長時間極限で量子アニーリングの方が経路長が短くなっている。

Santoro らは \$80 \times 80\$ サイトの 2 次元正方格子 Edwards-Anderson 模型に対してモンテカルロシミュレーションを行った [54, 55]。彼らはアニーリング後の残留エネルギー (時間発展後の状態のエネルギーと基底エネルギーの差) を調べた。基底エネルギーは他の方法で求めることが可能である [29]。横磁場あるいは温度はモンテカルロステップとともに線形に下げられた。結果は量子アニーリングの方がモンテカルロステップとともに速く残留エネルギーを減少させるというものである。2.1 節で述べられた Huse-Fisher 理論によるとシミュレーティッドアニーリング後の残留エネルギーはアニーリングを行った時間 (モンテカルロステップ) を \$\tau\$ とすると \$\epsilon_{\text{res}}^{\text{SA}} \sim 1/(\ln \tau)^{\zeta_{\text{SA}}}\$, \$\zeta_{\text{SA}} \leq 2\$ となるはずである。Santoro らは量子アニーリング後の残留エネルギーも \$\epsilon_{\text{res}}^{\text{QA}} \sim 1/(\ln \tau)^{\zeta_{\text{QA}}}\$ となることを予想したがシミュレーションで確かめるに至っていない。ただし、シミュレーション結果は、残留エネルギーの減少率は量子アニーリングの方が急であり、したがって \$\zeta_{\text{QA}} > \zeta_{\text{SA}}\$ を示唆している。

Martoňák らは 1002 都市という大規模な巡回セールスマン問題をモンテカルロ法により調べた [56]。用いた問題の最適な経路はあらかじめわかっている [57]。アニーリング法により得られた最適化後の残留超過距離は上述の 2 次元 Edwards-Anderson の残留エネルギーと同じような振る舞いを示している。アニーリングを行ったモンテカルロステップ数を増やすことによる超過距離の減少率は量子アニーリングの方が早く、ステップ数が長い極限では量子アニーリングによる超過誤差はシミュレーティッドアニーリングのそれより短くなる。

Sarjala らはランダム磁場イジング模型の最適化問題をモンテカルロ法により解いた [58]。ランダム磁場イジング模型のハミルトニアンは

$$H_{\text{pot}}^{\text{RFIM}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^z \quad (40)$$

で与えられる。文献 [58] では各サイトにかけられるランダム磁場 \$h_i\$ は平均 0、分散 1 のガウス分布で与えられている。この模型の面白いところは \$J\$ の大きさと次元によって基底状態が強磁性秩序状態になったり無秩序状態になったりするところである。Sarjala らは量子アニーリングでもシミュレーティッドアニーリングでもスピンあたりの残留エネルギー \$\epsilon_{\text{res}}\$ がアニーリングを行ったモンテカルロステップ数 \$\tau\$ とともに \$1/(\ln \tau)^\zeta\$ で減少することをシミュレーションにより示した。さらに、基底状態が無秩序状態の場合、\$\zeta_{\text{QA}} > \zeta_{\text{SA}}\$ すなわち量子アニーリングの方がシミュレーティッドアニーリングよりも残留エネルギーの減少率が急であり、秩序状態の場合、\$\zeta_{\text{QA}} \approx \zeta_{\text{SA}}\$ すなわちどちらでも残留エネルギーの減少率はほぼ同じであることを報告した。このことは始状態の無秩序状態と終状態の間に量子相転移があると残留エネルギーの減少率が小さくなることを示唆している。

Battaglia らはランダム 3-SAT 問題を調べた [59]。サイズ（イジングスピンの数）は $N = 10^4$ である。拘束条件の数 M とサイズの比 $\alpha = M/N$ を 4.24 ($\approx \alpha_c$) にとり、ランダムに選んだ問題が SAT 解を持つことをあらかじめ別の方法で確かめている。サイズや問題の性質からして、この問題は上に述べた中で最も難しい組み合わせ最適化問題と言える。この問題に対してはシミュレーティッドアニーリングの方が残留エネルギーの減少率が急になることが文献 [59] で報告された。

さらに Lee-Berne は量子モンテカルロ法に Migdal-Kadanoff の繰り込みを組み合わせ、量子アニーリングとシミュレーティッドアニーリングを繰り返して行う方法をタンパク質の構造安定化問題に適用した [60]。彼らの手法は普通のシミュレーティッドアニーリングよりもすぐれた最適化効率を示している。また、Das らは 1 次元の運動束縛系で量子アニーリングとシミュレーティッドアニーリングを比較した [61]。運動束縛系は自明な基底状態を持つにも関わらず、ダイナミクスに非自明な性質を持つ模型である。彼らが半古典的なモンテカルロ法により調べた結果はやはり量子アニーリングがシミュレーティッドアニーリングよりも速く基底状態に収束するというものである。

以上の数値実験でわかることは、ランダム 3-SAT 問題を除いて、量子アニーリングの方がシミュレーティッドアニーリングよりも早く基底状態に近づく傾向にあるということである。ただし、ここでの結果は状況証拠に過ぎず、シミュレーティッドアニーリングに比較した量子アニーリングの性質を明らかにするためには、より詳細な解析が必要である。

最後に、シミュレーションではないが、Brooke らは $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ という物質を用いて量子アニーリングとシミュレーティッドアニーリングの比較を行っている [62]。 $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ は Edwards-Anderson 模型を体現する物質である。この物質に対して、高温 (T_0)、ゼロ横磁場 ($\Gamma = 0$) の状態から次の 2 通りの方法で $\Gamma = 0$, $T = 0$ にする。(A) 横磁場を強くし ($\Gamma = 0 \rightarrow \Gamma_0$)、そこで温度を下げる ($T = T_0 \rightarrow 0$)、そこから量子アニーリングを行う ($\Gamma = \Gamma_0 \rightarrow 0$)。(B) 横磁場をゼロにしたまま温度を下げてシミュレーティッドアニーリングを行う ($T = T_0 \rightarrow 0$)。Brooke らは (A) と (B) の操作を同じ時間かけて行い、その結果 (A) の方が基底状態に近い状態が得られることを報告している。

4 量子断熱発展の基礎理論

前節では量子アニーリングのアルゴリズムを説明し、実行方法、量子モンテカルロ法によるシミュレーションなどを紹介した。モンテカルロシミュレーションや $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ の実験によると量子アニーリングはシミュレーティッドアニーリングより最適化効率がよい傾向が見られている。量子アニーリングの効率をより明確にするためには、量子アニーリングの本質である量子状態の断熱発展を詳細に調べる必要がある。この節では量子状態の断熱発展に関する基礎的な理論を紹介する。以下では演算子につけていた $\hat{\cdot}$ を省略する。

4.1 断熱定理

量子力学における断熱定理とは、簡単にいえば「ハミルトニアンが時間とともにゆっくり変化しても始状態がハミルトニアン固有状態なら固有状態のまま時間発展する」というものである。以下に文献 [63] にそってこの定理を詳細に説明する。

時刻を t で表わし、 $t = 0$ から τ までの範囲を考える。ハミルトニアンは時間に依存しているが、ただし τ で規格化された時刻 $s \equiv t/\tau$ のみに依存するとする。具体的には式 (20) のような

$$H(s) = f(s)H_{\text{kin}} + g(s)H_{\text{pot}} \quad (41)$$

を考える。状態ベクトルは t の関数だが、それは τ と s に依存するものなので $|\psi_\tau(s)\rangle$ と書くことにする。Schrödinger 方程式は規格化された時刻を用いて

$$i \frac{d}{ds} |\psi_\tau(s)\rangle = \tau H(s) |\psi_\tau(s)\rangle \quad (42)$$

と書ける。時間発展演算子 $U_\tau(s)$ を

$$|\psi_\tau(s)\rangle = U_\tau(s) |\psi_\tau(0)\rangle \quad (43)$$

を満たすように導入すると、Schrödinger 方程式 (42) は次のように書ける。

$$i \frac{d}{ds} U_\tau(s) = \tau H(s) U_\tau(s). \quad (44)$$

任意の状態ベクトルを時刻 s におけるハミルトニアンの固有状態に射影する射影演算子を導入する。 $H(s)$ の固有エネルギーを $\varepsilon_l(s)$ と書くと射影演算子 $P_l(s)$ は

$$H(s)P_l(s)|\phi\rangle = \varepsilon_l(s)P_l(s)|\phi\rangle, \quad P_l(s)P_m(s) = \delta_{lm}P_l(s), \quad \sum_l P_l(s) = 1 \quad (45)$$

を満たす。ここで $|\phi\rangle$ は任意の状態ベクトルで、 δ_{lm} はクロネッカーのデルタである。ハミルトニアンは射影演算子を用いて

$$H(s) = \sum_l \varepsilon_l(s) P_l(s) \quad (46)$$

と表せる。軸回転演算子 $A(s)$ を次式で定義する。

$$P_l(s) = A(s)P_l(0)A^\dagger(s) \quad (47)$$

軸回転演算子は射影演算子の射影軸を $s = 0$ のものから s のものに「回転」させる意味を持つ。 $A(s)$ はユニタリー演算子で $A(s)A^\dagger(s) = A^\dagger(s)A(s) = 1$ を満たす。この式を s で微分すると $\frac{dA(s)}{ds}A^\dagger + A\frac{dA^\dagger(s)}{ds} = 0$ と $\frac{dA^\dagger(s)}{ds}A(s) + A^\dagger(s)\frac{dA(s)}{ds} = 0$ が得られるが、これらから

$$\left\{ i \frac{dA(s)}{ds} A^\dagger(s) \right\}^\dagger = \left\{ -i A(s) \frac{dA^\dagger(s)}{ds} \right\}^\dagger = i \frac{dA(s)}{ds} A^\dagger = -i A \frac{dA^\dagger(s)}{ds} \quad (48)$$

がわかる。ここで $i\frac{dA(s)}{ds}A^\dagger(s) = -iA(s)\frac{dA^\dagger(s)}{ds} = K(s)$ とおくと、軸回転演算子に関する次の運動方程式が得られる。

$$i\frac{d}{ds}A(s) = K(s)A(s), \quad -i\frac{d}{ds}A^\dagger(s) = A^\dagger K(s). \quad (49)$$

ただし、 $K(s)$ はエルミート演算子である。また、射影演算子に関する運動方程式も $K(s)$ により次のように与えられる。

$$\frac{d}{ds}P_l(s) = -i[K(s), P_l(s)]. \quad (50)$$

ただし、 $[A, B] = AB - BA$ である。式 (50) が式 (47) の必要十分条件であることは次のようにして確かめることができる。

まず式 (47) を仮定すると

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds}P_l(s) &= \frac{d}{ds} \left(A(s)P_l(0)A^\dagger(s) \right) \\ &= \frac{dA(s)}{ds}P_l(0)A^\dagger(s) + A(s)P_l(0)\frac{dA^\dagger(s)}{ds} \\ &= -i[K(s), P_l(s)] \end{aligned}$$

が導かれる。

逆に式 (50) を仮定すると

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \left(A^\dagger(s)P_l(s)A(s) \right) &= \frac{dA^\dagger(s)}{ds}P_l(s)A(s) + A^\dagger(s)\frac{dP_l(s)}{ds}A(s) + A^\dagger(s)P_l(s)\frac{dA(s)}{ds} \\ &= iA^\dagger(s) \left(K(s)P_l(s) - [K(s), P_l(s)] - P_l(s)K(s) \right) A(s) \\ &= 0 \end{aligned}$$

であり、 $A(0) = A^\dagger(0) = 1$ を用いると

$$A^\dagger(s)P_l(s)A(s) = A^\dagger(0)P_l(0)A(0) = P_l(0)$$

が得られる。これより $P_l(s) = A(s)P_l(0)A^\dagger$ が成り立つ。

ところで、式 (50) は任意のエルミート演算子 O_l による $K(s) \mapsto K(s) + \sum_l P_l(s)O_l(s)P_l(s)$ という変換のもとで不変である。このあいまいさは $K(s)$ の対角行列要素が式 (49)、(50) により定まらないことに起因している。そこで対角行列要素を定めるために全ての l に対して

$$P_l(s)K(s)P_l(s) = 0 \quad (51)$$

を課すことにする。

さて、軸回転演算子を用いて軸回転表示を定義する。

$$H^A(s) \equiv A^\dagger(s)H(s)A(s) = \sum_l \varepsilon_l(s)A^\dagger(s)P_l(s)A(s) = \sum_l \varepsilon_l(s)P_l(0), \quad (52)$$

$$U_\tau^A(s) = A^\dagger(s)U_\tau(s). \quad (53)$$

軸回転表示での時間発展演算子 $U_\tau^A(s)$ は次の運動方程式を満たす。

$$\begin{aligned} i \frac{d}{ds} U_\tau^A(s) &= i \frac{dA^\dagger(s)}{ds} U_\tau(s) + i A^\dagger(s) \frac{dU_\tau(s)}{ds} \\ &= \left(\tau H^A(s) - K^A(s) \right) U_\tau^A(s). \end{aligned} \quad (54)$$

ただし 2 番目の等号で式 (44) と (49) を用いた。また、 $K^A(s) \equiv A^\dagger(s)K(s)A(s)$ を定義した。上式の右辺で $H^A(s)$ と $K^A(s)$ は τ によらない。したがって τ が大きい極限では第一項が右辺の中で支配的になるはずである。すなわち、 $\tau \rightarrow \infty$ で上式は

$$i \frac{d}{ds} U_\tau^A(s) \approx \tau H^A(s) U_\tau^A(s) \quad (55)$$

に近似されるはずである。そこで $V_\tau^A(s)$ を

$$i \frac{d}{ds} V_\tau^A(s) = \tau H^A(s) V_\tau^A(s) \quad (56)$$

を満たす演算子とする。この演算子を射影演算子を用いて次のように展開する。

$$V_\tau^A(s) = \sum_l \eta_{\tau,l}(s) P_l(0). \quad (57)$$

式 (52) とこの式を式 (56) に代入すると

$$i \frac{d}{ds} \eta_{\tau,l}(s) = \tau \varepsilon_l(s) \eta_{\tau,l}(s) \quad (58)$$

が得られ、積分すると

$$\eta_{\tau,l}(s) = \exp[-i\tau\phi_l(s)], \quad \phi_l(s) \equiv \int_0^s ds' \varepsilon_l(s'), \quad (59)$$

従って

$$V_\tau^A(s) = \sum_l e^{-i\tau\phi_l(s)} P_l(0) \quad (60)$$

が得られる。 $U_\tau^A(s)$ と $V_\tau^A(s)$ の方程式を比べると、 $\tau \rightarrow \infty$ で $U_\tau^A(s) \approx V_\tau^A(s)$ 、すなわち $U_\tau(s) \approx A(s)V_\tau^A(s)$ が予想される。

ここで U_τ^A と V_τ^A の違いを評価するために二つの間のオーバーラップを定義する。

$$W(s) = V_\tau^{A\dagger}(s) U_\tau^A(s) = V_\tau^{A\dagger}(s) A^\dagger(s) U_\tau(s). \quad (61)$$

式 (54) と (56) より $W(s)$ の運動方程式は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} i \frac{d}{ds} W(s) &= i \frac{d}{ds} V_\tau^{A\dagger}(s) U_\tau^A(s) + i V_\tau^{A\dagger}(s) \frac{d}{ds} U_\tau^A(s) \\ &= -V_\tau^{A\dagger}(s) K^A(s) U_\tau^A(s) \\ &= -\sum_{l,m} e^{i\tau(\phi_l(s)-\phi_m(s))} P_l(0) K^A(s) P_m(0) W(s) \\ &= -\sum_{l,m} e^{i\tau(\phi_l(s)-\phi_m(s))} K_{lm}^A(s) W(s). \end{aligned} \quad (62)$$

ここで $K^A(s)$ の行列要素

$$\begin{aligned} K_{lm}^A(s) &\equiv P_l(0)K^A(s)P_m(0) = P_l(0)A^\dagger(s)K(s)A(s)P_m(0) \\ &= A^\dagger(s)P_l(s)K(s)P_m(s)A(s). \end{aligned} \quad (63)$$

を定義した。対角要素は条件 (51) により $K_{ll}^A(s) = 0$ である。

次の積分を定義する。

$$\begin{aligned} F_{\tau,lm}(s) &= \int_0^s ds' e^{i\tau(\phi_l(s')-\phi_m(s'))} K_{lm}^A(s') \\ &= \frac{1}{i\tau} \left[e^{i\tau(\phi_l(s')-\phi_m(s'))} \frac{K_{lm}^A(s')}{\varepsilon_l(s') - \varepsilon_m(s')} \right]_0^s \\ &\quad - \int_0^s ds' e^{i\tau(\phi_l(s')-\phi_m(s'))} \frac{d}{ds'} \left[\frac{K_{lm}^A(s')}{\varepsilon_l(s') - \varepsilon_m(s')} \right]. \end{aligned} \quad (64)$$

2 番目の等号では $\frac{d}{ds}(\phi_l(s) - \phi_m(s)) = \varepsilon_l(s) - \varepsilon_m(s)$ を使った。 $K^A(s)$ と同様に $F_\tau(s)$ の対角要素もゼロである。非対角要素については、 $l > m$ なら $\phi_l(s) - \phi_m(s)$ が s の単調増加関数であり、 τ が $\max[1/(\varepsilon_l(s) - \varepsilon_m(s))]$ より十分大きければ上式右辺第 2 項の被積分関数は激しく振動して、第 2 項は第 1 項に比べてオーダー $1/\tau$ 程度小さい。第 1 項はエネルギー固有値に縮退がなく $\varepsilon_l(s) \neq \varepsilon_m(s)$ なら発散することはない。従って、 τ が大きい極限で $F_{\tau,lm}(s)$ は $1/\tau$ のオーダーの大きさとなる。ところで $W(s)$ の運動方程式 (62) は次のように積分方程式に書き換えられる。

$$W(s) = 1 + i \sum_{l,m} \int_0^s ds' e^{i\tau(\phi_l(s')-\phi_m(s'))} K_{lm}^A(s') W(s'). \quad (65)$$

式 (64) を考慮して上式を $F_{\tau,lm}$ により級数展開する。

$$W(s) = 1 + i \sum_{l,m} F_{\tau,lm}(s) + \frac{1}{2!} \left(i \sum_{l,m} F_{\tau,lm}(s) \right)^2 + \cdots \quad (66)$$

F_τ の 1 次まで残せば上式は

$$W(s) \approx 1 + i \sum_{l,m} F_{\tau,lm} \quad (67)$$

となり、時間発展演算子は

$$U_\tau(s) \approx A(s)V_\tau^A(s) \left(1 + i \sum_{l,m} F_{\tau,lm} \right) \quad (68)$$

と書ける。 $\tau \rightarrow \infty$ で $F_{\tau,lm} \rightarrow 0$ なので $U_\tau(s) \rightarrow A(s)V_\tau^A(s)$ となる。これが断熱定理である。

ここから、時刻 $t = 0$ でハミルトニアン $H(0)$ の基底固有状態にある状態の時間発展を考える。ハミルトニアンの各時刻における固有状態を $|n(s)\rangle$ と書くことにする。初期状態は $|\psi_\tau(0)\rangle = |0(0)\rangle$ である。時刻 $t = \tau s$ のハミルトニアンの固有状態は時刻 $t = 0$ のそれと $|n(s)\rangle = A(s)V_\tau^A(s)|n(0)\rangle$

という関係で結びつく。初期状態から時刻 $t = \tau s$ まで時間発展した状態の固有基底状態からのずれを

$$\begin{aligned}
 \eta &= \sum_{n>0} |\langle n(s) | U_\tau(s) | 0(0) \rangle|^2 \\
 &= \sum_{n>0} \langle 0(0) | U_\tau^\dagger(s) A(s) V_\tau^A(s) | n(0) \rangle \langle n(0) | V_\tau^{A\dagger}(s) A^\dagger(s) U_\tau(s) | 0(0) \rangle \\
 &= \sum_{n>0} \langle 0(0) | W^\dagger(s) | n(0) \rangle \langle n(0) | W(s) | 0(0) \rangle
 \end{aligned} \tag{69}$$

で表わすことにする。この量は時間発展した状態の中に基底状態以外の励起状態が含まれる割合を意味する。上式に式 (67) を代入すると、オーダー $1/\tau$ までの近似で

$$\eta \approx \sum_{n \neq 0} \langle 0(0) | F_{\tau 0n}^*(s) | n(0) \rangle \langle n(0) | F_{\tau n0}(s) | 0(0) \rangle \tag{70}$$

となる。ここで式 (64) を思い出し、 $K^A(s)$ の定義 (63) と式 (47)、(49)、(50) を用いて変形すると

$$\langle n(0) | F_{\tau n0}(s) | 0(0) \rangle \tag{71}$$

$$\begin{aligned}
 &= \int_0^s ds' e^{i\tau(\phi_n(s') - \phi_0(s'))} \langle n(0) | P_n(0) A^\dagger(s') K(s') A(s') P_0(0) | 0(0) \rangle \\
 &= \int_0^s ds' e^{i\tau(\phi_n(s') - \phi_0(s'))} \langle n(0) | A^\dagger(s') i \sum_l \frac{dP_l(s')}{ds'} P_l(s') A(s') | 0(0) \rangle \\
 &= i \int_0^s ds' e^{i\tau(\phi_n(s') - \phi_0(s'))} \langle n(0) | A^\dagger(s') \sum_l \frac{dP_l(s')}{ds'} A(s') P_l(0) | 0(0) \rangle \\
 &= i \int_0^s ds' e^{i\tau(\phi_n(s') - \phi_0(s'))} \langle n(0) | A^\dagger(s') \frac{dP_0(s')}{ds'} A(s') | 0(0) \rangle
 \end{aligned} \tag{72}$$

となる。ただし、2つ目の等式では式 (49) と (50) から導かれる $K(s)$ と $P_l(s)$ の間の関係式

$$i \sum_l \frac{dP_l(s)}{ds} P_l(s) = \sum_l \left(K(s) P_l(s)^2 - P_l(s) K(s) P_l(s) \right) = K(s) \tag{73}$$

を用いた。式 (72) をさらに変形するために上式と同様な次の関係式も書いておく。

$$-i \sum_l P_l(s) \frac{dP_l(s)}{ds} = - \sum_l \left(P_l(s) K(s) P_l(s) - P_l(s)^2 K(s) \right) = K(s) \tag{74}$$

これら二つの式から次を導くことができる。

$$P_l(s) K(s) P_m(s) = i \sum_n P_l(s) \frac{dP_n(s)}{ds} P_n(s) P_m(s) = i P_l(s) \frac{dP_m(s)}{ds} P_m(s), \tag{75}$$

$$= -i \sum_n P_l(s) P_n(s) \frac{dP_n(s)}{ds} P_m(s) = -i P_l(s) \frac{dP_l(s)}{ds} P_m(s). \tag{76}$$

これより次の式を得ることができる。

$$P_l(s) \frac{dP_m(s)}{ds} P_m(s) = -P_l(s) \frac{dP_l(s)}{ds} P_m(s). \tag{77}$$

ここで式 (46) のように書けるハミルトニアンに $P_l(s) = P_l(s)^2$ を代入して微分する。

$$\frac{dH(s)}{ds} = \sum_l \frac{d\varepsilon_l(s)}{ds} P_l(s) + \sum_l \varepsilon_l(s) \left(\frac{dP_l(s)}{ds} P_l(s) + P_l(s) \frac{dP_l(s)}{ds} \right). \quad (78)$$

上式の行列要素は次のようになる。

$$\begin{aligned} P_l(s) \frac{dH(s)}{ds} P_m(s) &= \sum_n \varepsilon_n(s) P_l(s) \left(\frac{dP_n(s)}{ds} P_n(s) + P_n(s) \frac{dP_n(s)}{ds} \right) P_m(s) \\ &\quad + \sum_n \frac{\varepsilon_n(s)}{ds} P_l(s) P_n(s) P_m(s) \\ &= \varepsilon_m(s) P_l(s) \frac{dP_m(s)}{ds} P_m(s) + \varepsilon_l(s) P_l(s) \frac{dP_l(s)}{ds} P_m(s) + \delta_{lm} \frac{d\varepsilon_l(s)}{ds} \\ &= (\varepsilon_m(s) - \varepsilon_l(s)) P_l(s) \frac{dP_m(s)}{ds} P_m(s) + \delta_{lm} \frac{d\varepsilon_l(s)}{ds}. \end{aligned} \quad (79)$$

この式を用いると式 (72) 右辺の行列要素は次のように変形される。

$$\begin{aligned} \langle n(0) | A^\dagger(s) \frac{dP_0(s)}{ds} A(s) | 0(0) \rangle &= e^{-i\tau(\phi_n(s) - \phi_0(s))} \langle n(s) | P_n(s) \frac{dP_0(s)}{ds} P_0(s) | 0(s) \rangle \\ &= e^{-i\tau(\phi_n(s) - \phi_0(s))} \frac{-1}{\varepsilon_n(s) - \varepsilon_0(s)} \langle n(s) | \frac{dH(s)}{ds} | 0(s) \rangle = \frac{-1}{\varepsilon_n(s) - \varepsilon_0(s)} \langle \bar{n}(s) | \frac{dH(s)}{ds} | \bar{0}(s) \rangle \end{aligned} \quad (80)$$

ただし $|\bar{n}(s)\rangle \equiv e^{i\tau\phi_n(s)} |n(s)\rangle$ は $|n(s)\rangle$ における $|n(0)\rangle$ からの相対的な位相を消去した状態である。エネルギー固有値の差を $\omega_{lm}(s) \equiv \varepsilon_l(s) - \varepsilon_m(s)$ と書くと、式 (72) は結局

$$\langle n(0) | F_{\tau, n0}(s) | 0(0) \rangle = \int_0^s ds' e^{i\tau(\phi_n(s') - \phi_0(s'))} \frac{-1}{\omega_{n0}(s')} \langle \bar{n}(s') | \frac{dH(s')}{ds} | \bar{0}(s') \rangle \quad (81)$$

と書ける。もし $\omega_{n0}(s)$ と $dH(s)/ds$ の行列要素が時間に依存しなければ、上式の積分は実行できて、

$$|\langle n(0) | F_{\tau, n0}(s) | 0(0) \rangle|^2 = \frac{1}{\tau^2} \frac{2}{\omega_{n0}^4} |\langle n(s) | \frac{dH(s)}{ds} | 0(s) \rangle|^2 (1 - \cos \omega_{n0} \tau s) \quad (82)$$

となる。 $\omega_{n0}(s)$ と $dH(s)/ds$ の行列要素が時間とともに変化するとき、時間変化が穏やかなら積分は $\omega_{n0}(s)$ の最小値と行列要素の最大値によって評価できる。

$$|\langle n(0) | F_{\tau, n0}(s) | 0(0) \rangle|^2 \lesssim \frac{1}{\tau^2} \frac{1}{\min[\omega_{n0}(s)]^4} \max \left[\left| \langle \bar{n}(s) | \frac{dH(s)}{ds} | \bar{0}(s) \rangle \right| \right]^2. \quad (83)$$

この式の右辺が 1 よりずっと小さい時、式 (67) で F_τ のオーダーの項まで残すという断熱近似が正当化される。つまり、断熱近似が正しいための判断基準は

$$\tau \gg \frac{\max \left[\left| \langle \bar{1}(s) | \frac{dH(s)}{ds} | \bar{0}(s) \rangle \right| \right]}{\min [\omega_{10}(s)]^2} \quad (84)$$

が満たされることである。

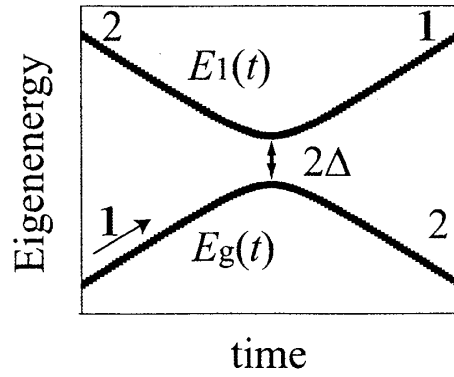


図 6: Landau-Zener 模型の 2 つのエネルギー準位。

4.2 Landau-Zener 公式

2 つの時間的に変化するエネルギー準位があるとする。初めにそれらは互いに離れているが、時間とともに近づき、再び離れる。準位が離れている時はお互いの性格が保たれるが、近い時は準位間の相互作用によりお互いの性格は混ざり合って、離れている時の性格はわからなくなる。もし準位間の相互作用がなければ二つのエネルギー準位が交差するときにエネルギーは縮退する。しかし、相互作用があるときは準位の交差は起きずに分裂する。図 6 は Landau-Zener 理論で考える 2 つのエネルギー準位を表している。このような 2 つの準位があって、初期状態を基底状態とした時の時間発展を考えていく。

Landau-Zener 模型では始めに 2 つの準位は無限に離れている。もしハミルトニアンの変数が緩やかならば、状態は断熱的に発展してずっと基底状態であり続ける。しかし、ある程度ハミルトニアンの変化が速いと、エネルギー準位が近づいた時に非断熱遷移が起きる。Landau-Zener 理論では Landau-Zener 模型で非断熱遷移が起きる確率を求める [64, 65]。

まず、次の時間に依存した準位間相互作用のないハミルトニアンを考える。

$$H_0(t) = \varepsilon_1(t)|1\rangle\langle 1| + \varepsilon_2(t)|2\rangle\langle 2|. \quad (85)$$

ここで $\varepsilon_i(t)$ と $|i\rangle$ はそれぞれ $H_0(t)$ の各時刻における固有エネルギーと固有状態を表す。 $\varepsilon_i(t)$ に含まれる時間変化は時刻 t に線形で

$$\varepsilon_1(t) - \varepsilon_2(t) = \alpha t \quad (86)$$

を満足すると仮定する。 $\alpha (> 0)$ は準位間隔の傾きである。準位間の相互作用を表すハミルトニアンは

$$H_1 = -\Delta(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|) \quad (87)$$

とする。 Δ は正で、時間によらないとする。全ハミルトニアンは

$$H(t) = H_0(t) + H_1(t) \quad (88)$$

で与えられる。この模型で、2つの準位は $t = 0$ で最も近接し、エネルギーギャップはその時に最小値 2Δ をとる。図6は Landau-Zener 模型 (88) のエネルギー準位を表わしている。

式 (88) のハミルトニアンのもとで時間に依存した Schrödinger を解く。まず、時刻 t における状態ベクトルを $|i\rangle$ で展開し、

$$|\psi(t)\rangle = \tilde{C}_1(t)|1\rangle + \tilde{C}_2(t)|2\rangle \quad (89)$$

と表す。Schrödinger 方程式 (42) は $\tilde{C}_1(t)$ と $\tilde{C}_2(t)$ に関する次の連立方程式を与える。

$$i\frac{d}{dt}\tilde{C}_1(t) = \varepsilon_1(t)\tilde{C}_1(t) - \Delta\tilde{C}_2(t), \quad (90)$$

$$i\frac{d}{dt}\tilde{C}_2(t) = \varepsilon_2(t)\tilde{C}_2(t) - \Delta\tilde{C}_1(t). \quad (91)$$

次の変換を行う。

$$\tilde{C}_1(t) = C_1(t)e^{-i\int_{-\infty}^t dt' \varepsilon_1(t')}, \quad \tilde{C}_2(t) = C_2(t)e^{-i\int_{-\infty}^t dt' \varepsilon_2(t')} \quad (92)$$

$C_1(t)$ と $C_2(t)$ を用いると式 (90)、(91) は次のようになる。

$$i\frac{d}{dt}C_1(t) = -\Delta C_2(t)e^{i\int_{-\infty}^t dt' (\varepsilon_1(t') - \varepsilon_2(t'))}, \quad (93)$$

$$i\frac{d}{dt}C_2(t) = -\Delta C_1(t)e^{-i\int_{-\infty}^t dt' (\varepsilon_1(t') - \varepsilon_2(t'))}. \quad (94)$$

初期条件として $t = -\infty$ で状態は $|1\rangle$ にあったと仮定する。それを C_1 と C_2 で書くと

$$|C_1(-\infty)| = 1, \quad C_2(-\infty) = 0 \quad (95)$$

となる。 C_1 と C_2 は規格化条件 $|C_1(t)|^2 + |C_2(t)|^2 = 1$ を満たしていないといけない。

式 (93) と (94) から $C_1(t)$ を消去して $C_2(t)$ の方程式を得る。

$$\frac{d^2}{dt^2}C_2(t) + i(\varepsilon_1(t) - \varepsilon_2(t))\frac{d}{dt}C_2(t) + \Delta^2 C_2(t) = 0. \quad (96)$$

ただし $d\Delta/dt = 0$ を使った。ここで次の変換を行う。

$$C_2(t) = \exp\left[-\frac{i}{2}\int_{-\infty}^t dt' (\varepsilon_1(t') - \varepsilon_2(t'))\right] U(t). \quad (97)$$

この変換により $C_2(t)$ の1階微分と2階微分は次のようになる。

$$\frac{d}{dt}C_2(t) = e^{-\frac{i}{2}\int_{-\infty}^t dt' (\varepsilon_1(t') - \varepsilon_2(t'))} \left\{ -\frac{i}{2}(\varepsilon_1(t) - \varepsilon_2(t))U(t) + \frac{d}{dt}U(t) \right\}, \quad (98)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2}C_2(t) = & e^{-\frac{i}{2}\int_{-\infty}^t dt' (\varepsilon_1(t') - \varepsilon_2(t'))} \left[\left(-\frac{i}{2}\alpha - \frac{\alpha^2 t^2}{4} \right) U(t) \right. \\ & \left. - i\alpha t \frac{d}{dt}U(t) + \frac{d^2}{dt^2}U(t) \right] \end{aligned} \quad (99)$$

式 (98) と (99) を (96) に代入して整理すると次の $U(t)$ に関する方程式が得られる。

$$\left[\frac{d^2}{dt^2} + \left(\Delta^2 - \frac{i}{2}\alpha + \frac{\alpha^2}{4}t^2 \right) \right] U(t) = 0. \quad (100)$$

ここで変数変換 $z = e^{-i\pi/4}\alpha^{1/2}t$ を行くと結局

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \left(n + \frac{1}{2} - \frac{1}{4}z^2 \right) \right] \tilde{U}(z) = 0 \quad (101)$$

が得られる。ただし $\tilde{U}(z) \equiv U(e^{i\pi/4}\alpha^{-1/2}z)$ 、 $n = i\Delta^2/\alpha$ である。この方程式は Weber の微分方程式である。初期条件 (95) に対応する $\tilde{U}(z)$ の境界条件は $\lim_{R \rightarrow \infty} \tilde{U}(z = Re^{i3\pi/4}) = 0$ となる。Weber の微分方程式の特殊解 $D_{-n-1}(-iz)$ は $z = Re^{i\pi/4}$ と $z = Re^{i3\pi/4}$ の軸上において $R \rightarrow \infty$ でゼロになる。これは考えている境界条件に適合している。したがって規格化定数まで含めた解は

$$\tilde{U}(z) = AD_{-n-1}(-iz) \quad (102)$$

と書ける。

規格化定数は式 (95) の C_1 に関する初期条件から決定される。 z 平面における t 軸は $t < 0$ の時 $e^{i3\pi/4}$ に沿っている。 $D_{-n-1}(-iz)$ を $e^{i3\pi/4}$ の軸に沿って漸近展開すると [66]

$$D_{-n-1}(-iRe^{i3\pi/4}) \approx e^{-i(n+1)\pi/4} e^{-iR^2/4} R^{-n-1} \quad (103)$$

となり、この一階微分は

$$\frac{d}{dR} D_{-n-1}(-iRe^{i3\pi/4}) \approx e^{-i(n+1)\pi/4} \left(-\frac{iR}{2} \right) e^{-iR^2/4} R^{-n-1} \quad (104)$$

となる。ただし、 $1/R^2$ 以上の高次の項は無視した。式 (94) とこれらの式を用いると $C_1(t)$ の $t \rightarrow -\infty$ における漸近形として以下を得る。

$$\begin{aligned} |C_1(t)| &= \frac{1}{\Delta} \left| \frac{d}{dt} C_2(t) \right| = \frac{1}{\Delta} \left| \left(\frac{1}{2} \alpha t U(t) + i \frac{d}{dt} U(t) \right) \right| \\ &= \frac{1}{\Delta} |A| \left| \left(-\frac{1}{2} \alpha^{1/2} R D_{-n-1}(-iRe^{i3\pi/4}) - i \alpha^{1/2} \frac{d}{dR} D_{-n-1}(-iRe^{i3\pi/4}) \right) \right| \\ &\approx \frac{1}{\Delta} |A| \sqrt{\alpha} |e^{-i(n+1)\pi/4} e^{-iR^2/4} R^{-n}| \end{aligned} \quad (105)$$

ただし t を R と $\sqrt{\alpha}t = -\sqrt{\alpha}|t| = -R$ により結びつけた。この式を用いて初期条件の式 (95) を $n = i\Delta^2/\alpha$ に注意して書き換えると

$$1 = |C_1(-\infty)| = \frac{\sqrt{\alpha}}{\Delta} |A| e^{-i\pi(i\Delta^2/\alpha)/4} = \frac{\sqrt{\alpha}}{\Delta} |A| e^{\pi\Delta^2/4\alpha} \quad (106)$$

となる。これより規格化定数として

$$|A| = \sqrt{\gamma} e^{-\pi\gamma/4} \quad (107)$$

が得られる。ただし $\gamma \equiv \Delta^2/\alpha$ である。

$t \rightarrow \infty$ における解を以下のようにして求める。まず、 $t \rightarrow \infty$ は $z = \lim_{R \rightarrow \infty} R e^{-i\pi/4}$ に対応することから

$$\begin{aligned} U(t) &= \tilde{U}(e^{-i\pi/4} \sqrt{\alpha t}) \\ &= \sqrt{\gamma} e^{-\pi\gamma/4} D_{-n-1}(R e^{-i3\pi/4}) \end{aligned} \quad (108)$$

が得られる。ここで $D_{-n-1}(z)$ の $e^{-i3\pi/4}$ の軸に沿って漸近展開すると

$$D_{-n-1}(R e^{-i3\pi/4}) \approx e^{-iR^2/4} e^{\frac{3}{4}\pi(n+1)i} R^{-n-1} + \frac{\sqrt{2\pi}}{\Gamma(n+1)} e^{iR^2/4} e^{\frac{\pi}{4}ni} R^n \quad (109)$$

となる。 n は純虚数なので $R \rightarrow \infty$ で上式右辺の第1項は第2項に比べて無視できる。従って $t \rightarrow \infty$ における $C_2(t)$ として

$$\begin{aligned} |C_2(+\infty)|^2 &= \gamma e^{-\pi\gamma/2} \frac{2\pi}{|\Gamma(i\gamma+1)|^2} e^{-\frac{\pi}{2}\gamma} \\ &= \frac{2\pi\gamma e^{-\pi\gamma}}{\gamma^2 |\Gamma(i\gamma)|^2} = 1 - e^{-2\pi\gamma} \end{aligned} \quad (110)$$

が得られる。ただしガンマ関数の公式 $|\Gamma(ix)|^{-2} = \frac{x}{2\pi} (e^{\pi x} - e^{-\pi x})$ を用いた。

さて、初期条件は $|C_1(-\infty)| = 1$ かつ $C_2(-\infty) = 0$ なので、時刻 $t = -\infty$ から ∞ への状態の断熱時間発展は $|1\rangle$ から $|2\rangle$ ということになる。断熱発展の確率は $|C_2(+\infty)|^2$ で与えられる。一方で、非断熱発展は $|1\rangle$ から $|1\rangle$ である。その確率は

$$P_{\text{non-ad}} = 1 - |C_2(+\infty)|^2 = e^{-2\pi\gamma} \quad (111)$$

$$\gamma = \frac{\Delta^2}{\alpha} = \frac{\Delta^2}{\frac{d}{dt}(\varepsilon_1(t) - \varepsilon_2(t))} \quad (112)$$

で与えられる。式(111)と(112)はLandau-Zener公式と呼ばれるものである。それによるとハミルトニアンの時間変化 α が小さくなればなるほどその逆数の指数関数で非断熱遷移の確率は小さくなる。また、準位間のギャップの最小値 Δ が小さくなればなるほどその2乗の指数関数で小さくなる。

4.3 Kibble-Zurek 機構

ビッグバンから始まった宇宙は急激に膨張し、高温の無秩序状態から急激に冷やされて秩序状態に相転移する。秩序状態は空間的に一様というわけではなく、因果律により遠く離れた場所の秩序パラメータは異なる値を持ちうる。パラメータの値が異なる領域の境には空間的な欠損ができる。Kibbleはこのような宇宙の進化のシナリオを考えた[67]。Zurekはそれを物性物理の世界で検証することを提案した[68]。

ある熱力学的な物理系が温度 T_c で2次相転移とする。無次元化された温度を $\epsilon \equiv (T - T_c)/T_c$ で定義する。転移温度近くかつ転移温度より高温での相関長 ξ と緩和時間 τ_R が臨界指数 ν と動的臨界指数 z を用いて

$$\xi = \xi_0 / |\epsilon|^\nu \quad (113)$$

$$\tau_R = \tau_0(\xi/\xi_0)^z = \tau_0/|\epsilon|^{z\nu} \quad (114)$$

と書けるとする。 ξ_0 と τ_0 はそれぞれ相関長と緩和時間の臨界振幅である。温度が時間 t とともに転移点付近で線形に下がっていると仮定する。

$$\epsilon(t) = -t/\tau \quad (115)$$

すなわち

$$T(t) = T_c \left(1 - \frac{t}{\tau}\right). \quad (116)$$

ここで $1/\tau$ は温度の降下率を調節するパラメータである。温度は高温から低温に下がるように、時刻 t は $t < 0$ から $t > 0$ に進むものとする。各温度で常に平衡状態にあるとすると相関長は転移温度に近づくにつれて式 (113) に従って発散する。しかし温度が転移温度に近づいてくると緩和時間が永くなる。それにより、平衡状態になる前にさらに温度が下がり、転移温度を超えても相関長は有限のままで系は固まってしまう。転移温度よりも低温ではもはや緩和は起こらない。相関長が有限であるということは相関長程度のスケールでは秩序パラメータが等しい値を持つが、それより大きいスケールでは別の値を持つことを意味する。これが相転移のダイナミクスにおける Kibble-Zurek 機構である。

相関の発達が終わってしまう温度を見積もるために、温度 $\epsilon(t)$ における緩和時間と転移温度に達するまでの残り時間 $|t|$ が釣り合う時刻 $\hat{t}$ を次式で定める。

$$\tau_R(\hat{t}) = \tau_0 / \left(|\hat{t}|/\tau\right)^{z\nu} = |\hat{t}|. \quad (117)$$

時刻が $t > -|\hat{t}|$ になると緩和時間が転移温度までの残り時間より永くなるために、もはや系は温度 $\epsilon(\hat{t})$ の平衡状態にはなりえない。そこで $\hat{\epsilon} \equiv \epsilon(\hat{t})$ を相関の発達が止まる温度とみなす。式 (117) を $|\hat{t}|/\tau$ について解くと $\hat{\epsilon}$ の表式が得られる。

$$|\hat{\epsilon}| = |\hat{t}|/\tau = (\tau_0/\tau)^{1/(1+z\nu)}. \quad (118)$$

これを式 (113) に代入すると、温度が転移温度より下がった後の相関長が得られる。

$$\hat{\xi} \approx \xi_0 \left(\frac{\tau}{\tau_0}\right)^{\nu/(1+z\nu)}. \quad (119)$$

平均場理論のもとでは $\nu = 1/2$ 、 $z = 2$ なので $\hat{\xi} = \xi_0(\tau/\tau_0)^{1/4}$ が得られる。つまり相関長は温度降下率の逆数 τ とともに $\tau^{1/4}$ で大きくなる [69]。

以上の話を量子系の量子相転移に適用することが可能である [70]。ハミルトニアンが

$$H = \Gamma H_{\text{kin}} + H_{\text{pot}} \quad (120)$$

で与えられているとする。ここで H_{kin} と H_{pot} は互いに非可換な演算子である。パラメータ Γ が $\Gamma = \Gamma_c$ の時に系は 2 次の量子相転移を起こし、 $\Gamma < \Gamma_c$ では基底状態は秩序状態であるとする。無

次元化したパラメター $\epsilon \equiv (\Gamma - \Gamma_c)/\Gamma_c$ を定義する。 Γ が Γ_c より大きく、かつ Γ_c に近い時、基底状態の相関長が

$$\xi = \xi_0/|\epsilon|^\nu \quad (121)$$

のように書けて、さらに基底状態と第1励起状態の間のエネルギーギャップ Δ が

$$\Delta = \Delta_0 (\xi/\xi_0)^{-z} \quad (122)$$

と書けるとする。エネルギーギャップは「緩和時間」に相当する特徴的時間を定める。

$$\tau_R \equiv 1/\Delta = \tau_0 (\xi/\xi_0)^z = \tau_0/|\epsilon|^{z\nu}. \quad (123)$$

ただし $\tau_0 \equiv 1/\Delta_0$ とした。さて、ここでパラメター $\epsilon(t)$ が次式のように時間に線形に変化すると仮定する。

$$\epsilon(t) = -t/\tau \quad (124)$$

ただし τ は $\epsilon(t)$ の変化率を定めるパラメターである。時刻 t は $t < 0$ から $t > 0$ へと進むものとする。 $t = 0$ が転移点になる。始めに系の状態は基底状態にあったとする。 $\epsilon(t)$ が 0 に近づくとギャップ Δ が小さくなり、状態が励起状態に非断熱遷移しやすくなる。断熱性が失われる時刻とギャップの大きさとの関係を相転移点までの残り時刻 $|t|$ と「緩和時間」との関係に置き換えて、両者が等しいという条件

$$\tau_R(\hat{t}) = \tau_0 / \left(|\hat{t}|/\tau \right)^{z\nu} = |\hat{t}| \quad (125)$$

をおく。この条件から断熱性が失われる時刻 $\hat{t}$ を決める。上式を解いて式 (124) に代入すると $t = \hat{t}$ における ϵ の値が次のように求まる。

$$|\hat{\epsilon}| = |\hat{t}|/\tau = \left(|\hat{t}|/\tau \right)^{z\nu}. \quad (126)$$

熱力学的な相転移の時と同じように、相関が $t = -\hat{t}$ 以降は発達せず系の発展がそこで固まってしまふと考え、 $t > 0$ 以降の状態での相関長は

$$\hat{\xi} \approx \xi_0 (\tau/\tau_0)^{\nu/(1+z\nu)} \quad (127)$$

で与えられる。

たとえば1次元横磁場イジング模型

$$H_{\text{kin}} = - \sum_i \sigma_i^x, \quad H_{\text{pot}} = - \sum_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \quad (128)$$

では $\Gamma_c = 1$ で量子相転移を起こすことがわかっている [17]。またその時の臨界指数は $\nu = 1$ 、 $z = 1$ であり、臨界振幅は $\xi_0 = 1$ 、 $\Delta_0 = 2$ である⁵。従って、 Γ を $\Gamma > 1$ から $\Gamma = 0$ に変化率 $1/\tau$ で時刻 t に線形に変化させながら状態を初期時刻の基底状態から時間発展させると、 $\Gamma = 0$ になった時

⁵ 格子定数を 1 とした。

の終状態の相関長は $\xi \approx (2\tau)^{1/2}$ となる。1次元イジング模型の場合には、相関長の逆数は向きの異なる強磁性ドメインの間にできるキンクの密度に相当する。従って、キンク密度は $\rho \approx 1/\sqrt{2\tau}$ となる。なお、この模型は正確に解くことができ、キンク密度の正しい表式は $\rho = 1/(2\pi\sqrt{2\tau})$ となる [71]。つまり Kibble-Zurek の議論により得られるキンク密度は $1/2\pi$ の因子を除いて正しいことがわかる。

4.4 量子モンテカルロ法による時間発展

この節では Morita-Nishimori [52] によって証明された量子モンテカルロ法のダイナミクスによる量子アニーリングの収束について述べる。

横磁場 $H_{\text{kin}} = -\Gamma \sum_i \sigma_i^x$ を制御することによりランダムイジング模型 $H_{\text{pot}}(\{\sigma_i^z\})$ の量子アニーリングを行うことを考える。3.3.2 節で述べたように、量子モンテカルロ法では横磁場イジング模型は次元が 1 つ大きいイジング模型

$$\tilde{H}(\{\sigma_i^{(j)}\}) = \sum_{j=1}^M H_{\text{pot}}(\{\sigma_i^{(j)}\}) - \frac{M}{\beta} \gamma \sum_{j=1}^M \sum_i \sigma_i^{(j)} \sigma_i^{(j+1)} \quad (129)$$

に変換され、逆温度 β のもとでの分配関数は

$$\begin{aligned} Z &\approx \sum_{\{\sigma_i^{(j)}\}} \exp \left[-\frac{\beta}{M} \tilde{H}(\{\sigma_i^{(j)}\}) \right] \\ &= \sum_{\{\sigma_i^{(j)}\}} \exp \left[-\frac{\beta}{M} \sum_{j=1}^M H_{\text{pot}}(\{\sigma_i^{(j)}\}) + \gamma \sum_{j=1}^M \sum_i \sigma_i^{(j)} \sigma_i^{(j+1)} \right] \end{aligned} \quad (130)$$

とする。この式の両辺は $\beta/M \rightarrow 0$ で厳密に等しくなる。ただし $\gamma = \frac{1}{2} \ln(\coth \frac{\beta}{M} \Gamma)$ である。以下、横磁場 Γ が時刻 t に依存する場合を考えるので、 γ も t に依存する。さて、ここで $T_0 \equiv M/\beta$ 、 $T_1(t) \equiv 1/\gamma(t)$ を定義する。さらに $F_0(\sigma) \equiv \sum_{j=1}^M H_{\text{pot}}(\{\sigma_i^{(j)}\})$ 、 $F_1(\sigma) \equiv -\sum_{j=1}^M \sum_i \sigma_i^{(j)} \sigma_i^{(j+1)}$ とおく。ただし全てのイジング変数を単に σ と書いた。以下この簡略した記法を用いる。これらの記法により上の分配関数は

$$Z(t) = \sum_{\sigma} \exp \left[-\frac{F_0(\sigma)}{T_0} - \frac{F_1(\sigma)}{T_1(t)} \right] \quad (131)$$

と書ける。

モンテカルロ法の本質である Markov 鎖は次式で定義される状態 σ から σ' への遷移確率で特徴づけられる。

$$G(\sigma', \sigma; t) = \begin{cases} P(\sigma', \sigma) A(\sigma', \sigma; t) & (\text{for } \sigma \neq \sigma') \\ 1 - \sum_{\sigma''} P(\sigma'', \sigma) A(\sigma'', \sigma; t) & (\text{for } \sigma = \sigma') \end{cases} \quad (132)$$

ここで $P(\sigma', \sigma)$ は状態が σ から 1 ステップで σ' に移る確率であり、 $A(\sigma', \sigma; t)$ は σ から σ' への遷移が採用されるかどうかを判定する受理関数と呼ばれるものである。 $A(\sigma', \sigma; t)$ がある状態の確率分布関数 $q(\sigma, t)$ の比 $x = q(\sigma', t)/q(\sigma, t)$ の関数であるとして、それを $A(x)$ と書く。 $A(x)$ が x の

単調増加関数で $0 \leq A(x) \leq 1$ かつ $x > 0$ に対して $A(1/x) = A(x)/x$ を満足するようにとれば、 $\sum_{\sigma} G(\sigma', \sigma; t) q(\sigma; t) = q(\sigma'; t)$ となる。すなわち $q(\sigma; t)$ が固定された t のもとでの $G(\sigma', \sigma; t)$ で定義される Markov 鎖の定常分布となることが示せる。 $A(x)$ は Metropolis 法では $A(x) = \min(1, x)$ 、熱浴法では $A(x) = x/(1+x)$ である。

遷移確率 $G(\sigma', \sigma; t)$ が時間に依存する時、初期状態分布 $p(\sigma, t_0)$ が与えられた時の時刻 $t = t_0 + l$ の分布 $p(\sigma; t, t_0)$ は

$$\begin{aligned} p(\sigma'; t, t_0) &= \sum_{\sigma} G(\sigma', \sigma; t, t_0) p(\sigma; t_0) \\ &\equiv \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots} G(\sigma', \sigma_{l-1}; t_0 + l - 1) \cdots G(\sigma_2, \sigma_1; t_0 + 1) G(\sigma_1, \sigma; t_0) p(\sigma; t_0) \end{aligned} \quad (133)$$

または行列表示で

$$p(t, t_0) = G(t, t_0) p(t_0) \equiv G(t_0 + l - 1) \cdots G(t_0 + 1) G(t_0) p(t_0) \quad (134)$$

で与えられる。

状態の集合をここで3つ定義する。まず始めに全ての状態の集合を S と書く。次に、 S_{σ} を状態 σ から1ステップで到達できる状態の集合とする。 S_m を全ての $\sigma' \in S_{\sigma}$ に対して $F_1(\sigma) \geq F_1(\sigma')$ となるような σ の集合とする。

続いていくつかの量を導入する。 $d(\sigma', \sigma)$ を σ から σ' へ状態を移すのに最小限必要なステップ数とする。 S_m に含まれない任意の状態 σ から $d(\sigma', \sigma)$ を最大にするような σ' を選んだ時の $d(\sigma', \sigma)$ を $D(\sigma)$ とし、 $D(\sigma)$ が最小になるように σ を選んだ時の $D(\sigma)$ を R と書く。 R は状態空間の中のある状態と、そこから最も遠く離れた状態との「距離」を最小にするように2つの状態を選んだ時のその「距離」を意味する。ある与えられた状態 σ と、そこから1ステップで移れる σ' のエネルギー差 $|F_0(\sigma') - F_0(\sigma)|$ の $\sigma' \in S_{\sigma}$ に関する最大値を $K_0(\sigma)$ とし、さらにその $\sigma \in S$ に関する最大値を L_0 とする。同様にエネルギー差 $|F_1(\sigma') - F_1(\sigma)|$ の $\sigma' \in S_{\sigma}$ に関する最大値を $K_1(\sigma)$ 、さらにその $\sigma \in S$ に関する最大値を L_1 とする。

Morita-Nishimori は有効温度 $T_1(t)$ のスケジュールが

$$T_1(t) \geq \frac{RL_1}{\ln(t+2)} \quad (135)$$

すなわち横磁場が

$$\Gamma(t) \geq \frac{M}{\beta} \tanh^{-1} \frac{1}{(t+2)^{2/RL_1}} \quad (136)$$

ならば、Boltzmann 因子

$$q(\sigma; t) = \frac{1}{Z(t)} \exp \left(-\frac{F_0(\sigma)}{T_0} - \frac{F_1(\sigma)}{T_1(t)} \right) \quad (137)$$

と $A(1/x) = A(x)/x$ を満たす受理関数 $A(x)$ が作る Markov 鎖は $t = \infty$ で

$$r(\sigma) = \frac{1}{Z_0} \exp \left(-\frac{F_0(\sigma)}{T_0} \right) \quad (138)$$

に収束することを証明した。ただし $Z_0 = \sum_{\sigma} \exp(-F_0(\sigma)/T_0)$ はイジング模型 $H_{\text{pot}}(\{\sigma_i\})$ の分配関数の M 乗である。

証明はシミュレーテッドアニーリングの収束証明 [4] と同様に、まず Markov 鎖の弱エルゴード性を証明し、それに基づいて次に強エルゴード性を証明することによってなされる。

弱エルゴード性とは任意の異なる初期確率分布から出発した Markov 鎖が $t \rightarrow \infty$ で初期条件によらなくなることを指す。また、強エルゴード性は任意の初期確率分布から出発した Markov 鎖が $t \rightarrow \infty$ で唯一の確率分布に収束することを指す。弱エルゴード性と強エルゴード性については次の弱エルゴード定理と強エルゴード定理がある。

弱エルゴード定理：ある正の増加列 $\{t_i\}$ ($i = 0, 1, 2, \dots$) が存在して

$$\sum_{i=1}^{\infty} (1 - \alpha(G(t_{i+1}, t_i))) \rightarrow \infty \quad (139)$$

となる時、 $G(t)$ による時間変化する Markov 鎖は弱エルゴード性を持つ。ただし、エルゴード定数 $\alpha(G(t_{i+1}, t_i))$ は

$$\alpha(G(t_{i+1}, t_i)) \equiv 1 - \min \left\{ \sum_{\sigma'' \in S} \min_{\sigma, \sigma' \in S} \{G(\sigma'', \sigma; t_{i+1}, t_i), G(\sigma'', \sigma'; t_{i+1}, t_i)\} \right\} \quad (140)$$

で定義される。

強エルゴード定理： $G(t)$ による時間変化する Markov 鎖は以下の 3 つの条件を満たすとき強エルゴード性を持つ。

- (1) Markov 鎖が弱エルゴード性を持つ。
- (2) 全ての t に対して $p(\sigma'; t) = \sum_{\sigma} G(\sigma', \sigma; t)p(\sigma, t)$ を満たすような定常分布 $p(\sigma; t)$ が存在する。
- (3) 定常分布 $p(\sigma; t)$ が

$$\sum_{t=0}^{\infty} \|p(t) - p(t+1)\| < \infty \quad (141)$$

を満たす。

これらの証明は文献 [72] に譲ることにして、ここではこれらの定理を使って弱エルゴード性と強エルゴード性の証明を行う。

w を全ての $P(\sigma', \sigma) > 0$ の中の最小値とする。始めに、(i) $\sigma' \neq \sigma$ で $P(\sigma', \sigma) > 0$ の時、全ての $t > 0$ に対して、または (ii) $\sigma' = \sigma$ で $\sigma \in S \setminus S_m$ ⁶ の時、ある t_1 が存在して全ての $t \geq t_1$ に対して、

$$G(\sigma', \sigma, t) > wA(1) \exp \left(-\frac{L_0}{T_0} - \frac{L_1}{T_1(t)} \right) \quad (142)$$

が成り立つことを見る。

⁶ $S \setminus S_m$ は S から S_m を除いた集合

まず (i) $\sigma \neq \sigma'$ で $P(\sigma', \sigma) > 0$ のとき、全ての $t > 0$ に対して $a = (F_0(\sigma') - F_0(\sigma))/T_0 + (F_1(\sigma') - F_1(\sigma))/T_1(t)$ とすると、 $a > 0$ ならば $A(e^a) \geq A(1)$ なので

$$\begin{aligned} G(\sigma', \sigma; t) = P(\sigma', \sigma) A\left(\frac{q(\sigma'; t)}{q(\sigma; t)}\right) &\geq w \frac{q(\sigma'; t)}{q(\sigma; t)} A\left(\frac{q(\sigma; t)}{q(\sigma'; t)}\right) = w e^{-a} A(e^a) \geq w e^{-a} A(1) \\ &\geq w A(1) \exp\left(-\frac{L_0}{T_0} - \frac{L_1}{T_1(t)}\right). \end{aligned} \quad (143)$$

また $a \leq 0$ ならば $A(e^{-a}) \geq A(1)$ なので

$$\begin{aligned} G(\sigma', \sigma; t) &\geq w A\left(\frac{q(\sigma'; t)}{q(\sigma; t)}\right) = w A(e^{-a}) \geq w A(1) \\ &\geq w A(1) \exp\left(-\frac{L_0}{T_0} - \frac{L_1}{T_1(t)}\right). \end{aligned} \quad (144)$$

次に (ii) $\sigma \in S \setminus S_m$ のとき、 $F_1(\sigma') - F_1(\sigma) > 0$ となる $\sigma' \in S_\sigma$ がある。その σ' に対して

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \exp\left(-\frac{F_0(\sigma') - F_0(\sigma)}{T_0} - \frac{F_1(\sigma') - F_1(\sigma)}{T_1(t)}\right) = 0. \quad (145)$$

さらに $x \leq 1$ に対して $A(x) = xA(1/x) \leq x$ ($A(1/x) \leq 1$ を使った) より

$$\lim_{t \rightarrow \infty} A\left(\frac{q(\sigma'; t)}{q(\sigma; t)}\right) \leq \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{q(\sigma'; t)}{q(\sigma; t)} = 0. \quad (146)$$

従って正の微小量 ε に対してある t_1 が存在して

$$A\left(\frac{q(\sigma'; t)}{q(\sigma; t)}\right) < \varepsilon \quad \forall t \geq t_1 \quad (147)$$

とできる。一方 $A(x) \leq 1$ なので $t \geq t_1$ に対して

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma''} P(\sigma'', \sigma) A\left(\frac{q(\sigma''; t)}{q(\sigma; t)}\right) &= P(\sigma', \sigma) A\left(\frac{q(\sigma'; t)}{q(\sigma; t)}\right) + \sum_{\sigma'' \in S \setminus \{\sigma'\}} P(\sigma'', \sigma) A\left(\frac{q(\sigma''; t)}{q(\sigma; t)}\right) \\ &< P(\sigma', \sigma) \varepsilon + \sum_{\sigma'' \in S \setminus \{\sigma'\}} P(\sigma'', \sigma) \\ &= -(1 - \varepsilon) P(\sigma', \sigma) + \sum_{\sigma'' \in S \setminus \{\sigma'\}} P(\sigma'', \sigma) + P(\sigma', \sigma) \\ &= -(1 - \varepsilon) P(\sigma', \sigma) + 1. \end{aligned} \quad (148)$$

従って $t \geq t_1$ に対して

$$\begin{aligned} G(\sigma, \sigma; t) &= 1 - \sum_{\sigma''} P(\sigma'', \sigma) A\left(\frac{q(\sigma''; t)}{q(\sigma; t)}\right) \\ &> 1 - \{-(1 - \varepsilon) P(\sigma', \sigma) + 1\} = (1 - \varepsilon) P(\sigma', \sigma) > 0 \end{aligned} \quad (149)$$

ところで、 $t \rightarrow \infty$ で $w A(1) \exp(-\frac{L_0}{T_0} - \frac{L_1}{T_1(t)}) \rightarrow 0$ なので十分大きい t_1 に対して

$$G(\sigma, \sigma; t) > (1 - \varepsilon) P(\sigma', \sigma > w A(1)) \exp\left(-\frac{L_0}{T_0} - \frac{L_1}{T_1(t)}\right) \quad \forall t \geq t_1 \quad (150)$$

が成り立つ。

次に弱エルゴード性の証明を行う。 σ^* を $\max_{\sigma'} \{d(\sigma', \sigma)\}$ を最小にする $\sigma \in \mathcal{S} \setminus \mathcal{S}_m$ とする。定義から $\max_{\sigma'} \{d(\sigma', \sigma^*)\} = R$ である。つまり任意の σ から σ^* までの遷移は高々 R ステップでできる。今、時刻 $t - R$ で σ から t で σ^* に遷移する Markov 鎖を考える。

$$G(\sigma^*, \sigma; t, t - R) = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{R-1}} G(\sigma^*, \sigma_{R-1}; t - 1) G(\sigma_{R-1}, \sigma_{R-2}; t - 2) \cdots G(\sigma_1, \sigma; t - R) \quad (151)$$

σ^* の定義から $0 \leq l \leq R$ の範囲に、ある l が存在して

$$\sigma \equiv \sigma_0 \neq \sigma_1 \neq \sigma_2 \neq \cdots \neq \sigma_l = \sigma_{l+1} = \cdots = \sigma_R \equiv \sigma^* \quad (152)$$

を満たすような σ から σ^* への可能な遷移の列がある。 t が十分大きければこの列の $i < l$ に対しては式 (142) より

$$\begin{aligned} G(\sigma_{i+1}, \sigma_i; t - R + i) &= P(\sigma_{i+1}, \sigma_i) A(\sigma_{i+1}, \sigma_i; t - R + i) \\ &\geq wA(1) \exp\left(-\frac{L_0}{T_0} - \frac{L_1}{T_1(t - R + i)}\right). \end{aligned} \quad (153)$$

$i \geq l$ に対しては $\sigma^* \in \mathcal{S} \setminus \mathcal{S}_m$ なので式 (142) より

$$\begin{aligned} G(\sigma_{i+1}, \sigma_i; t - R + i) &= G(\sigma^*, \sigma^*; t - R + i) \\ &\geq wA(1) \exp\left(-\frac{L_0}{T_0} - \frac{L_1}{T_1(t - R + i)}\right). \end{aligned} \quad (154)$$

従って十分大きな t に対して

$$\begin{aligned} G(\sigma^*, \sigma; t, t - R) &\geq G(\sigma^*, \sigma_{R-1}; t - 1) G(\sigma_{R-1}, \sigma_{R-2}; t - 2) \cdots G(\sigma_1, \sigma; t - R) \\ &\geq (wA(1))^R \exp\left(-\frac{RL_0}{T_0} - \sum_{i=0}^{R-1} \frac{L_1}{T_1(t - R + i)}\right) \\ &\geq (wA(1))^R \exp\left(-\frac{RL_0}{T_0} - \frac{RL_1}{T_1(t - 1)}\right). \end{aligned} \quad (155)$$

最後の不等式では $T(t)$ の単調性を用いた。ここで時刻 $t - R$ から t へのエルゴード係数 α (式 (140)) を評価する。まず十分大きな t に対して

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma''} \min \{G(\sigma'', \sigma; t, t - R), G(\sigma'', \sigma'; t, t - R)\} &\geq \min \{G(\sigma^*, \sigma; t, t - R), G(\sigma^*, \sigma'; t, t - R)\} \\ &\geq (wA(1))^R \exp\left(-\frac{RL_0}{T_0} - \frac{RL_1}{T_1(t - 1)}\right). \end{aligned} \quad (156)$$

次に

$$\min_{\sigma, \sigma'} \left\{ \sum_{\sigma''} \min \{G(\sigma'', \sigma; t, t - R), G(\sigma'', \sigma'; t, t - R)\} \right\} \geq (wA(1))^R \exp\left(-\frac{RL_0}{T_0} - \frac{RL_1}{T_1(t - 1)}\right), \quad (157)$$

これより

$$\alpha(G(t, t - R)) \leq 1 - (wA(1))^R \exp\left(-\frac{RL_0}{T_0} - \frac{RL_1}{T_1(t - 1)}\right) \quad (158)$$

$$1 - \alpha(G(t, t - R)) \geq (wA(1))^R \exp\left(-\frac{RL_0}{T_0} - \frac{RL_1}{T_1(t-1)}\right) \quad (159)$$

が得られる。従ってある正の整数 k_0 が存在して $k > k_0$ に対して

$$1 - \alpha(G(kR, kR - R)) \geq (wA(1))^R \exp\left(-\frac{RL_0}{T_0} - \frac{RL_1}{T_1(kR-1)}\right) \quad (160)$$

を成り立たせることができる。ここで $T(t) = RL_1/\ln(t+2)$ を代入すると

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{\infty} (1 - \alpha(G(kR, kR - R))) &\geq \sum_{k \geq k_0}^{\infty} (1 - \alpha(G(kR, kR - R))) \\ &\geq (wA(1))^R \exp\left(-\frac{RL_0}{T_0}\right) \sum_{k \geq k_0}^{\infty} \frac{1}{kR+1} \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (161)$$

が示せる。従って弱エルゴード定理よりこの Markov 鎖は弱エルゴード性を持つ。

強エルゴード性は、Markov 鎖が強エルゴード定理の 3 つの条件を満たすことを示すことで証明する。条件 (1) はすでに上で弱エルゴード性を持つことを示したので満たされている。条件 (2) は式 (132) の下で述べられているように Boltzmann 分布 (式 (137)) が Markov 鎖 $G(t)$ の定常分布であるので満たされる。以下に条件 (3) が満たされることを示す。 $F_1(\sigma)$ の最小値を $F_{1,\min}$ 、それを与える状態の集合を $\mathcal{S}_{1,\min}$ と書く。また $F_1(\sigma) - F_{1,\min} = D_1(\sigma)$ と書く。 $\sigma \in \mathcal{S}_{1,\min}$ に対して

$$\begin{aligned} q(\sigma; t) &= \frac{\exp\left(-\frac{F_0(\sigma)}{T_0} - \frac{F_{1,\min}}{T_1(t)}\right)}{\sum_{\sigma'} \exp\left(-\frac{F_0(\sigma')}{T_0} - \frac{F_1(\sigma')}{T_1(t)}\right)} \\ &= \frac{\exp\left(-\frac{F_0(\sigma)}{T_0}\right)}{\sum_{\sigma' \in \mathcal{S}_{1,\min}} \exp\left(-\frac{F_0(\sigma')}{T_0}\right) + \sum_{\sigma' \in \mathcal{S} \setminus \mathcal{S}_{1,\min}} \exp\left(-\frac{F_0(\sigma') - F_0(\sigma)}{T_0} - \frac{D_1(\sigma')}{T_1(t)}\right)}. \end{aligned} \quad (162)$$

$T_1(t+1) < T_1(t)$ かつ $\sigma' \in \mathcal{S} \setminus \mathcal{S}_{1,\min}$ に対して $F_1(\sigma') - F_{1,\min} > 0$ なので

$$\exp\left(-\frac{D_1(\sigma')}{T_1(t+1)}\right) < \exp\left(-\frac{D_1(\sigma')}{T_1(t)}\right) \quad (163)$$

従って $q(\sigma; t+1) > q(\sigma; t)$ が言える。 $\sigma \in \mathcal{S} \setminus \mathcal{S}_{1,\min}$ に対しては

$$q(\sigma; t) = \frac{\exp\left(-\frac{F_0(\sigma)}{T_0} - \frac{D_1(\sigma)}{T_1(t)}\right)}{\sum_{\sigma' \in \mathcal{S}_{1,\min}} \exp\left(-\frac{F_0(\sigma')}{T_0}\right) + \sum_{\sigma' \in \mathcal{S} \setminus \mathcal{S}_{1,\min}} \exp\left(-\frac{F_0(\sigma')}{T_0} - \frac{D_1(\sigma')}{T_1(t)}\right)} \quad (164)$$

この式を t で微分する。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} q(\sigma; t) &= \frac{dT_1(t)}{dt} \frac{d}{dT_1} q(\sigma; t) \\ &= \frac{dT_1(t)}{dt} \left\{ D_1(\sigma) - \sum_{\sigma' \in \mathcal{S} \setminus \mathcal{S}_{1,\min}} D_1(\sigma') q(\sigma'; t) \right\} \frac{q(\sigma; t)}{T_1(t)^2} \end{aligned} \quad (165)$$

上の式で $T_1(t)$ は単調減少なので $\frac{dT_1(t)}{dt} < 0$ 、また $\{\}$ の中は t が十分大きければ $T_1(t)$ が小さくなって $\sigma' \in \mathcal{S} \setminus \mathcal{S}_{1,\min}$ の $q(\sigma'; t)$ が小さくなるので正になる。つまり、ある t_1 があって、それよ

り大きい t に対して $\frac{d}{dt}q(\sigma; t) < 0$ すなわち $q(\sigma; t+1) \leq q(\sigma; t)$ がいえる。これらの $q(\sigma; t+1)$ と $q(\sigma; t)$ の関係から $\sum_{\sigma} q(\sigma; t) = 1$ に注意すると

$$\begin{aligned} \|q(t+1) - q(t)\| &= \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_{1,\min}} (q(\sigma; t+1) - q(\sigma; t)) - \sum_{\sigma \in \mathcal{S} \setminus \mathcal{S}_{1,\min}} (q(\sigma; t+1) - q(\sigma; t)) \\ &= 2 \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_{1,\min}} (q(\sigma; t+1) - q(\sigma; t)) \end{aligned} \quad (166)$$

$$\sum_{t=t_1}^{\infty} \|q(t+1) - q(t)\| = 2 \sum_{\sigma \in \mathcal{S}_{1,\min}} (q(\sigma; \infty) - q(\sigma; t_1)) \leq 2. \quad (167)$$

従って

$$\begin{aligned} \sum_{t=0}^{\infty} \|q(t+1) - q(t)\| &= \sum_{t=0}^{t_1-1} \|q(t+1) - q(t)\| + \sum_{t=t_1}^{\infty} \|q(t+1) - q(t)\| \\ &\leq 2t_1 + 2 < \infty \end{aligned} \quad (168)$$

が示される。以上から 3 つの条件が全て満たされるので、強エルゴード定理からこの Markov 鎖によって任意の初期状態分布から得られる状態分布は $t \rightarrow \infty$ で分布

$$r(\sigma) = \frac{\exp\left(-\frac{F_0(\sigma)}{T_0}\right)}{\sum_{\sigma'} \exp\left(-\frac{F_0(\sigma')}{T_0}\right)} \quad (169)$$

に収束する。

5 有限系の残留誤差

前節では量子状態の断熱発展の理論を述べた。この節では有限系における量子アニーリング後の残留誤差を議論する。有限系では特別な対称性により生じる縮退がない限り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る。従って、ハミルトニアン の時間変化がゆっくりならば断熱定理の理論が適用可能となる。この節ではまず数値計算を紹介し、それから断熱定理を用いた残留エネルギーの解析を行う。

5.1 数値計算

ここでは少数サイズの強束縛模型と 2 次元 Edwards-Anderson 模型という二つの模型に対して量子アニーリングを実際に数値計算で行う。

まず始めに、ポテンシャルハミルトニアン

$$H_{\text{pot}} = \sum_{i=1}^M V_i |i\rangle \langle i| \quad (170)$$

を考える。ここで $|i\rangle$ は 1 つの粒子が i サイトにいるということを表す状態である。 V_i は i サイトにいる粒子が感じるポテンシャルで、今の問題ではランダムな値が与えられているとする。問題

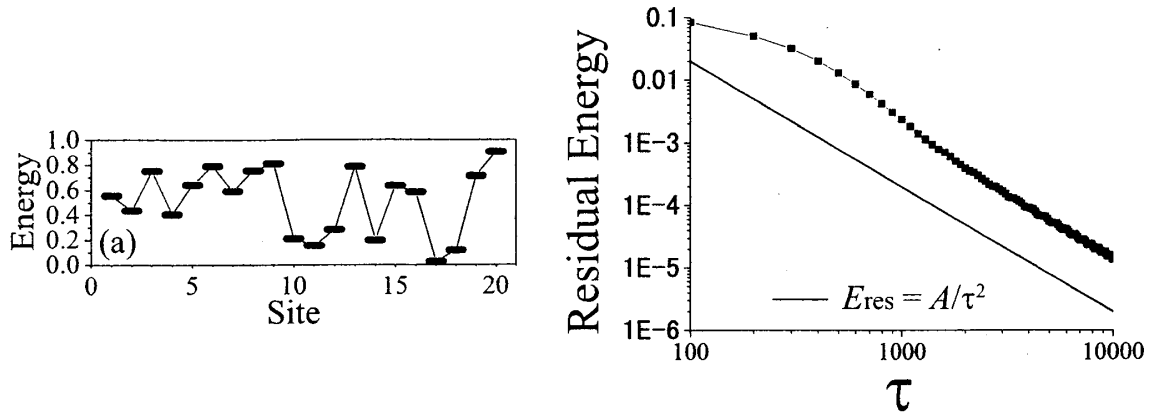


図 7: 左: 20 サイト強束縛模型の各サイト上のランダムなポテンシャルエネルギー。この場合 17 番目のサイトが最低エネルギーである。右: 強束縛模型に対する量子アニーリング後の残留エネルギー。アニーリング時間 τ とともに残留エネルギーは減少する。 τ が大きい極限では τ に対して $1/\tau^2$ のようにふるまう。

は式 (170) の基底状態すなわちポテンシャルエネルギーが最も低いサイトを探すことである。強束縛模型では「運動エネルギー」として次のトンネルハミルトニアンを考える。

$$H_{\text{kin}} = - \sum_{i=1}^{M-1} (|i\rangle\langle i+1| + |i+1\rangle\langle i|). \quad (171)$$

これら 2 つのハミルトニアンを使って次の時間に依存したハミルトニアンを作る。

$$H(t) = \left(1 - \frac{t}{\tau}\right) H_{\text{kin}} + \frac{t}{\tau} H_{\text{pot}}. \quad (172)$$

量子アニーリングの手続きとして初期状態は $H(t=0)$ すなわち H_{kin} の基底状態にとる。今の場合それは

$$|\Psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{i=1}^M |i\rangle \quad (173)$$

である。この初期条件のもとで Schrödinger 方程式 (22) を解き終時刻 $t = \tau$ における状態 $|\Psi(\tau)\rangle$ を求める。

図 7 は 20 サイトの強束縛模型に対して Runge-Kutta 法で Schrödinger 方程式を数値的に解いた結果を表している。残留エネルギーは

$$E_{\text{res}} = \langle \Psi(\tau) | H_{\text{pot}} | \Psi(\tau) \rangle - E_g \quad (174)$$

で定義される。ただし E_g は H_{pot} の基底エネルギーである。図 7 左のようなポテンシャルエネルギーの場合、 $E_g = V_{17}$ である。

残留エネルギーは τ とともに減少する。これは τ が大きくなればなるほど時間に依存したハミルトニアン (172) の時間変化は緩やかになるので断熱性が良くなることを反映している。 τ が大きい極限で残留エネルギーが $1/\tau^2$ に比例して減少することは注目すべきことである。

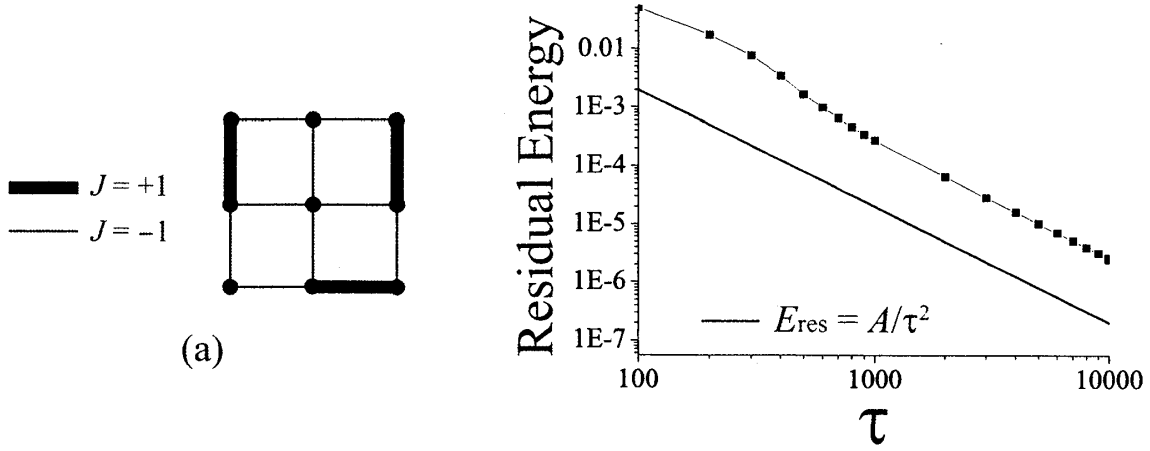


図 8: 左: Edwards-Anderson 模型の結合定数。3 × 3 の 2 次元正方格子を考えている。右: 残留エネルギーの τ 依存性。 τ が大きい極限で τ とともに $1/\tau^2$ で減少する。

次に、ポテンシャルハミルトニアンとして Edwards-Anderson ハミルトニアンを考える。

$$H_{\text{pot}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i^z S_j^z - h \sum_i S_i^z. \quad (175)$$

S_i^z は Pauli のスピン演算子の z 成分である。スピン間の相互作用は最近接のみに働いて、結合定数 J_{ij} は +1 か -1 の値をとるものとする。縦方向の磁場 $h = 0.1$ は基底状態の自明な縮退を取り除くために入れられる。この系の「運動エネルギー」として横磁場

$$H_{\text{kin}} = - \sum_i S_i^x \quad (176)$$

を考える。 S_i^x は Pauli スピン演算子の x 成分である。時間に依存したハミルトニアンは式 (172) と同じ

$$H(t) = \left(1 - \frac{t}{\tau}\right) H_{\text{kin}} + \frac{t}{\tau} H_{\text{pot}} \quad (177)$$

とする。初期状態は H_{kin} の基底状態にとるが、それは

$$|\Psi(t)\rangle = \bigotimes_i \left[\frac{|\uparrow\rangle_i + |\downarrow\rangle_i}{\sqrt{2}} \right] \quad (178)$$

である。ただし $|\uparrow\rangle_i$ と $|\downarrow\rangle_i$ はそれぞれ S_i^z の固有値 $\frac{1}{2}$ と $-\frac{1}{2}$ に属する固有状態とする。

図 8 は 3 × 3 の 2 次元正方格子上的 Edwards-Anderson 模型に対する量子アニーリングの数値計算結果である。時間に依存したハミルトニアン (177) に対する Schrödinger 方程式を Runge-Kutta 法により数値的に解いている。Edwards-Anderson 模型の J_{ij} の値は図左に示されている。この場合の H_{pot} の基底状態は自明ではないが、計算機で求めるのは容易なので得られた基底エネルギー E_g を元に式 (174) で残留エネルギーを計算する。結果は強束縛模型の場合とよく似ている。残留エネルギーは τ とともに減少し、特に τ が大きいところでは $1/\tau^2$ の振る舞いを示す。

この小節では異なる模型に対して残留エネルギーが τ が大きい極限で $1/\tau^2$ で減少することを数値計算により示した。次の小節では断熱定理による解析から $1/\tau^2$ の振る舞いが一般的な性質であることを示す。

5.2 断熱定理による解析

時間に依存するハミルトニアンが式 (172) の形をしているとする。このハミルトニアンは $t/\tau \equiv s$ に依存するのでハミルトニアンの各時刻における固有状態と固有エネルギーを $|n(s)\rangle$ 、 $\varepsilon_n(s)$ と書くことにする。 $n=0$ は基底状態に、 $n=1$ は第 1 励起状態に対応する。残留エネルギーは

$$\begin{aligned} E_{\text{res}} &= \langle \Psi(\tau) | H_{\text{pot}} | \Psi(\tau) \rangle - \varepsilon_0(1) \\ &= \sum_{n \geq 0} \varepsilon_n(1) |\langle n(1) | \Psi(\tau) \rangle|^2 - \varepsilon_0(1) \sum_{n \geq 0} |\langle n(1) | \Psi(\tau) \rangle|^2 \\ &= \sum_{n \geq 1} (\varepsilon_n(1) - \varepsilon_0(1)) |\langle n(1) | \Psi(\tau) \rangle|^2 \end{aligned} \quad (179)$$

と書ける。ここで 4.1 節の記法を用いると

$$\begin{aligned} |\langle n(1) | \Psi(\tau) \rangle|^2 &= \langle 0(0) | W^\dagger(1) | n(0) \rangle \langle n(0) | W(1) | 0(0) \rangle \\ &\approx \langle 0(0) | F_{\tau,0n}^*(1) | n(0) \rangle \langle n(0) | F_{\tau,n0}(1) | 0(0) \rangle \end{aligned} \quad (180)$$

である。ただし、 W に対して F の 1 次まで残す近似を用いた (式 (67))。従って、残留エネルギーは

$$E_{\text{res}} \approx \sum_{n \geq 1} (\varepsilon_n(1) - \varepsilon_0(1)) |\langle n(0) | F_{\tau,n0}(1) | 0(0) \rangle|^2 \quad (181)$$

と表せる。ここで $F_{\tau,n0}(1)$ が $\tau \rightarrow \infty$ でオーダー $1/\tau$ の量であることを思い出そう。すると E_{res} は

$$E_{\text{res}} \approx \sum_{n \geq 1} (\varepsilon_n(1) - \varepsilon_0(1)) \times O\left(\frac{1}{\tau^2}\right) = O\left(\frac{1}{\tau^2}\right) \quad (182)$$

であることがわかる。このことから τ 以外の全てのパラメータを固定して τ を動かすと、 $\tau \rightarrow \infty$ で残留エネルギーは $1/\tau^2$ の振る舞いを持つことが明らかとなる。しかもそれは H_{pot} や H_{kin} の形によらない性質である。

次にどのくらい τ が大きくなると残留エネルギーの $1/\tau^2$ の振る舞いが見えるようになるかを明確にしよう。4.1 節で述べたように、 W が F の 1 次までの項で近似できるのは τ が

$$\tau \gg \tau_C, \quad \tau_C \equiv \frac{\max_s [|\langle 1(s) | \frac{d\bar{H}(s)}{ds} | 0(s) \rangle|]}{\min_s [\varepsilon_1(s) - \varepsilon_0(s)]^2} \quad (183)$$

を満たすときである。ここで規格化された時刻 $s \equiv t/\tau$ の関数としてのハミルトニアンを $\bar{H}(s)$ と書いた。この条件がまさに残留エネルギーの $1/\tau^2$ 則が見える条件となる。 τ_C は状態の断熱発展の困難さを定める特徴的時間で、 τ_C が永いと断熱発展はしにくくなると同時に量子アニーリングの誤差も大きくなる。

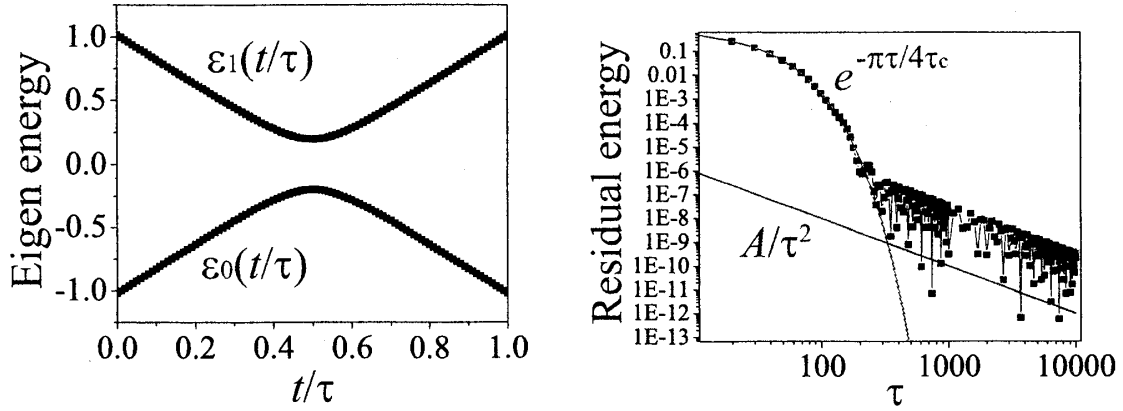


図 9: 左: ハミルトニアン (184) のエネルギー準位。右: 残留エネルギー。ハミルトニアンのパラメータは $h = 2$ 、 $\alpha = 0.2$ にとった。

$\tau \sim \tau_C$ の領域では断熱近似を適用することはできない。この領域では Landau-Zener 理論が有効となる。そのことを見るために次の時間に依存したハミルトニアンを考える。

$$H_{LZ}(t) = -\left(\frac{1}{2} - \frac{t}{\tau}\right) h\sigma^z - \alpha\sigma^x \quad (184)$$

時刻は $0 \leq t \leq \tau$ の間で定義されているとする。図 9 左はハミルトニアン (184) の各時刻における固有エネルギーを表している。このハミルトニアンは 1 スピンの 2 準位系である。各時刻のエネルギー固有値を $\epsilon_0(t/\tau)$ 、 $\epsilon_1(t/\tau)$ と書く。

初期状態を初期時刻のハミルトニアン $H_{LZ}(0)$ の基底状態にとる。Landau-Zener 公式 (111)、(112) により基底状態から励起状態に非断熱遷移する確率 P_1 は

$$P_1 = \exp\left[-\frac{\pi\alpha^2\tau}{h}\right] \quad (185)$$

となる。これより終状態の残留エネルギーは

$$\begin{aligned} E_{\text{res}} &= (\epsilon_1(1)P_1 + \epsilon_0(1)P_0) - \epsilon_0(1) \\ &= (\epsilon_1(1) - \epsilon_0(1)) \exp\left[-\frac{\pi}{4} \frac{\tau}{\tau_C}\right] \end{aligned} \quad (186)$$

$$\tau_C = \frac{h}{4\alpha^2} \quad (187)$$

と書ける。ここで P_0 は終状態に $H(\tau)$ の基底状態が見出される確率で、 $P_0 + P_1 = 1$ を満たす。 τ_C は式 (183) により定義された特徴的時間で今の模型の場合、上のような表式となる。式 (186) の Landau-Zener 公式による τ に関する指数関数は断熱近似から導かれる $1/\tau^2$ 則とは対照的である。

Landau-Zener の指数関数的振る舞いから断熱近似のべき的振る舞いへの変化をみるために、Runge-Kutta 法により式 (184) のハミルトニアンに対する Schrödinger 方程式を数値的に解いて残留エネルギーを計算した。図 9 右がその結果である。四角の点が時間発展後の残留エネルギーを表している。比較のために Landau-Zener 公式による曲線と断熱近似による $1/\tau^2$ の線を書い

た。Landau-Zener 理論による指数関数的な振る舞いから断熱近似の $1/\tau^2$ の振る舞いへの変化は明確である。式 (184) は Landau-Zener 理論によりよく説明できる模型なので残留エネルギーの Landau-Zener 公式によるフィットは $\tau \sim \tau_C$ あたりでとてもよい。数値計算のパラメーター値から導かれる特徴的時間は $\tau_C = 12.5$ である。図 9 右では $\tau \gtrsim 200$ で $1/\tau^2$ の振る舞いが現れる。このことは断熱近似が $\tau \gg \tau_C$ で成り立つこととほぼ合致する。

最後に残留エネルギーとアニーリングのスケジュールについて触れる。残留エネルギーの断熱近似の表式 (181) をさらに詳細に見てみる。4.1 節の式 (81) によると

$$\begin{aligned} \langle n(0)|F_{\tau,n0}(1)|0(0)\rangle &= \int_0^1 ds e^{i\tau(\phi_n(s)-\phi_0(s))} \frac{-1}{\omega_{n0}(s)} \langle \bar{n}(s)| \frac{d\bar{H}(s)}{ds} |\bar{0}(s)\rangle \\ &= \frac{-1}{i\tau} e^{i\tau(\phi_n(s)-\phi_0(s))} \left. \frac{\langle \bar{n}(s)| \frac{d\bar{H}(s)}{ds} |\bar{0}(s)\rangle}{\omega_{n0}(s)^2} \right|_0^1 + O\left(\frac{1}{\tau^2}\right) \\ &= \frac{i}{\tau} \left(e^{i\tau(\phi_n(1)-\phi_0(1))} \frac{\langle \bar{n}(1)| \frac{d\bar{H}(1)}{ds} |\bar{0}(1)\rangle}{\omega_{n0}(1)^2} \right. \\ &\quad \left. - e^{i\tau(\phi_n(0)-\phi_0(0))} \frac{\langle \bar{n}(0)| \frac{d\bar{H}(0)}{ds} |\bar{0}(0)\rangle}{\omega_{n0}(0)^2} \right) + O\left(\frac{1}{\tau^2}\right) \end{aligned} \quad (188)$$

と書ける。ただし、 $\bar{H}(s)$ は $s \equiv t/\tau$ の関数としてのハミルトニアンで、 $|\bar{n}(s)\rangle$ は $|\bar{n}(0)\rangle$ に対する相対的な位相を消去した $\bar{H}(s)$ の固有状態である。また、 $\omega_{n0}(s) = \varepsilon_n(s) - \varepsilon_0(s)$ であり、 $\phi_l(s) = \int_0^s ds' \varepsilon_l(s')$ である。これより

$$|\langle n(0)|F_{\tau,n0}(1)|0(0)\rangle| \leq \frac{1}{\tau} \left(\frac{|\langle \bar{n}(1)| \frac{d\bar{H}(1)}{ds} |\bar{0}(1)\rangle|}{\omega_{n0}(1)^2} + \frac{|\langle \bar{n}(0)| \frac{d\bar{H}(0)}{ds} |\bar{0}(0)\rangle|}{\omega_{n0}(0)^2} \right) + O\left(\frac{1}{\tau^2}\right) \quad (189)$$

が成り立つので、残留エネルギーは $1/\tau^2$ の主要項だけ取ると

$$E_{\text{res}} \lesssim \frac{1}{\tau^2} \sum_{n \geq 1} (\varepsilon_n(1) - \varepsilon_0(1)) \left(\frac{|\langle \bar{n}(1)| \frac{d\bar{H}(1)}{ds} |\bar{0}(1)\rangle|}{\omega_{n0}(1)^2} + \frac{|\langle \bar{n}(0)| \frac{d\bar{H}(0)}{ds} |\bar{0}(0)\rangle|}{\omega_{n0}(0)^2} \right)^2 \quad (190)$$

となる。Morita はこの表式から $d\bar{H}(1)/ds = d\bar{H}(0)/ds = 0$ なら残留エネルギーの $1/\tau^2$ の項が消えることに気づいた [73]。実際に、もし $d\bar{H}(1)/ds = d\bar{H}(0)/ds = 0$ だとすると式 (189) の右辺は $1/\tau^2$ の項が主要項となり

$$|\langle n(0)|F_{\tau,n0}(1)|0(0)\rangle| \leq \frac{1}{\tau^2} \left(\frac{|\langle \bar{n}(1)| \frac{d^2\bar{H}(1)}{ds^2} |\bar{0}(1)\rangle|}{\omega_{n0}(1)^3} + \frac{|\langle \bar{n}(0)| \frac{d^2\bar{H}(0)}{ds^2} |\bar{0}(0)\rangle|}{\omega_{n0}(0)^3} \right) + O\left(\frac{1}{\tau^3}\right) \quad (191)$$

が成り立ち、その結果

$$E_{\text{res}} \lesssim \frac{1}{\tau^4} \sum_{n \geq 1} (\varepsilon_n(1) - \varepsilon_0(1)) \left(\frac{|\langle \bar{n}(1)| \frac{d^2\bar{H}(1)}{ds^2} |\bar{0}(1)\rangle|}{\omega_{n0}(1)^3} + \frac{|\langle \bar{n}(0)| \frac{d^2\bar{H}(0)}{ds^2} |\bar{0}(0)\rangle|}{\omega_{n0}(0)^3} \right)^2 \quad (192)$$

となる。さらに同様にして $d^l\bar{H}(1)/ds^l = d^l\bar{H}(0)/ds^l = 0$ 、($l = 1, 2, \dots, m-1$) だとすると

$$E_{\text{res}} \lesssim \frac{1}{\tau^{2m}} \sum_{n \geq 1} (\varepsilon_n(1) - \varepsilon_0(1)) \left(\frac{|\langle \bar{n}(1)| \frac{d^m\bar{H}(1)}{ds^m} |\bar{0}(1)\rangle|}{\omega_{n0}(1)^{m+1}} + \frac{|\langle \bar{n}(0)| \frac{d^m\bar{H}(0)}{ds^m} |\bar{0}(0)\rangle|}{\omega_{n0}(0)^{m+1}} \right)^2 \quad (193)$$

となる。このようにしてハミルトニアン $s = 0$ と $s = 1$ における微係数をゼロになるように時間依存性を作れば、断熱近似領域での残留エネルギーの減少率を高めることができる。さらに無限回微分してもゼロになるような関数、たとえば $f(s) = \tanh[\tan\{\pi(s - 1/2)\}]$ を用いて

$$\bar{H}(s) = (1 - f(s)) H_{\text{kin}} + f(s) H_{\text{pot}} \quad (194)$$

のようにとると、少数系では残留エネルギーは τ のべきで減少することではなく Landau-Zener 的な振る舞いを反映して τ の指数関数で減少する。

6 熱力学極限における残留誤差

前節では有限系における量子アニーリングの残留誤差を論じた。有限系では特別な対称性がなければ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開く。しかし、熱力学極限では有限系で有限だったエネルギーギャップがゼロになることがある。それは巨視的な対称性が変化する相転移に伴う現象である。有限系では有限のエネルギーギャップの存在により断熱定理が成り立つが、熱力学極限ではギャップが閉じるために断熱定理は成り立たない。この節では相転移をまたぐ状態の時間発展を議論する。量子系では相転移をまたぐ時間発展の一般論は今のところ存在しない。そこで1次元のランダムイジング模型を用いて現在まで明らかになっていることを述べていく。1次元のランダムイジング模型については量子アニーリング後の残留誤差とシミュレーティッドアニーリング後の残留誤差の直接的な比較が可能であり、両者に差があることが明らかになった。そこでまず1次元ランダムイジング模型に対する量子アニーリングの理論を紹介し、それからシミュレーティッドアニーリングの理論を述べて両者を比較する。

6.1 1次元ランダムイジング模型の量子アニーリング

次の横磁場中の1次元ランダムイジング模型を考える。

$$H = -\Gamma \sum_i h_i \sigma_i^x - \sum_i J_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z, \quad (195)$$

$$P(h_i) = \begin{cases} 1 & h_i \in [0, 1] \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases} \quad (196)$$

$$P(J_i) = \begin{cases} 1 & J_i \in [0, 1] \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases}, \quad (197)$$

ここで σ_i^x と σ_i^z はそれぞれ Pauli のスピン演算子の x 成分と z 成分である。このハミルトニアンのうちランダムイジング模型の部分は強磁性的な相互作用からなっている。1次元の場合、反強磁性の相互作用が入っていてもゲージ変換によって全てが強磁性相互作用の模型に変換できる。したがって式(195)のハミルトニアンは符号までランダムな模型も含んでいる。

ハミルトニアン(195)で量子アニーリングが目的とするのは Γ の大きさを時間とともに変えて $\Gamma = 0$ のランダムイジング模型の基底状態を求めることである。今の模型ではその基底状態は全て

のスピンの上向きまたは下向きでそろった強磁性状態である。従って基底状態を探すという最適化問題の観点からはこのランダムイジング模型は自明な解を持つ。しかし、第1励起状態がどんな状態であるかは自明ではない。言い換えると局所的なエネルギー極小が多数存在して、シミュレーションでアニーリングや量子アニーリングにより解を探す過程のダイナミクスは非自明である。

この模型は $\Gamma = \Gamma_c = 1$ で量子相転移を示すことが知られている。その臨界的な性質は Fisher らによって詳しく調べられた [74, 75]。基底状態と第1励起状態の間のエネルギーギャップは臨界点 $\Gamma = 1$ でゼロになる。今、系の長さ（スピン数） N が有限の系をまず考える。有限系ではエネルギーギャップは有限の値を持ち、模型のランダムネスを反映してある分布関数に従って分布している。Fisher らによると、 $\Gamma = 1$ においてエネルギーギャップ Δ の分布は、パラメータ $g \equiv -\ln \Delta / \sqrt{N}$ によってスケールされる。つまり、分布関数を $P(\Delta, N)$ と書くと $P(\Delta, N)|d\Delta| = P(e^{-g\sqrt{N}}, N)\sqrt{N}e^{-g\sqrt{N}}|dg| \equiv P^*(g)|dg|$ と書ける。このことは系のサイズ N を大きくすると、同じ g を与えるためには Δ を指数関数的に小さくしなければならないので Δ の分布は小さい方にどんどん幅広くなっていくことを意味する。

Caneva らはこの模型で Γ を $t = -\infty$ で $\Gamma = +\infty$ とし、時間とともに線形に終時刻 $t = 0$ に向かって減少させる、すなわち $\Gamma(t) = -t/\tau$ というスケジュールの量子アニーリングのダイナミクスを議論した [18]。 $t = -\infty$ の初期状態はもちろん $\Gamma(-\infty) = +\infty$ により横磁場の方向に揃った状態にとる。この状態から Schrödinger 方程式に従って時間発展させると

$$|\rightarrow\rightarrow\rightarrow\cdots\rightarrow\rangle \text{ to } |\cdots\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\cdots\rangle$$

のように終時刻では強磁性のドメインがキंकで区切られた状態の重ね合わせとなる。ドメインの長さ、言いかえるとキंकの密度は τ の大きさにより変化する。このような空間的な欠損の発生は時間発展の過程で励起状態に非断熱遷移が起きることに起因する。ただし、今の模型では σ^x 方向に揃った状態からイジング相互作用によって励起されるので必ずキंक-アンチキंक対が生成されないといけない。したがって初期状態から第1励起状態には励起できず、第2励起状態が最も遷移が起こりやすい励起状態である。Caneva らは第2励起状態へのエネルギーギャップも Fisher らが示したパラメータによるスケールリングが成り立つという仮説のもと次のように遷移確率を評価した。まず、第2励起準位は臨界点で基底準位に最も近接すると考えて、遷移確率を臨界点において励起する確率で下からおさえる。臨界点において第2励起状態に励起する確率は Landau-Zener 公式で評価する。すなわち

$$P_{\text{excite}}(\tau, N) \geq P_{\text{excite}}^{\text{cr}}(\tau, N) = \int_0^\infty d\Delta_2 P(\Delta_2, N) e^{-\kappa\tau\Delta_2^2} \quad (198)$$

ここで Δ_2 は臨界点における第2励起状態へのエネルギーギャップを意味し、 $\kappa = \pi/2\alpha$ である。ただし α を非交差する基底準位と第2励起準位のスロープの差とする。 α スロープの分布は遷移確率に本質的ではないと仮定する。上式の右辺をスケールリングパラメータ $g = -\ln \Delta_2 / \sqrt{N}$ を使って書き換える。

$$\text{右辺} = \int_{-\infty}^{\infty} dg P^*(g) e^{-\kappa\tau e^{-2g\sqrt{N}}}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dg P^*(g) e^{-e^{-2\sqrt{N}(g-g_c)}}$$

ここでは $g_c \equiv (\ln \kappa \tau)/2\sqrt{N}$ を定義した。この式に現れる 2 重指数関数 $\exp[-e^{-2\sqrt{N}(g-g_c)}]$ は N が大きい極限では $g > g_c$ で 1 になり、 $g < g_c$ で 0 になる。従ってステップ関数 $\theta(g - g_c)$ で近似すると

$$\begin{aligned} \text{右辺} &\approx \int_{-\infty}^{\infty} dg P^*(g) \theta(g - g_c) \\ &= \int_{g_c}^{\infty} dg P^*(g) \equiv \Pi(g_c) \end{aligned}$$

と書ける。結局遷移確率は

$$P_{\text{excite}}(\tau, N) \gtrsim \Pi(g_c) \quad (199)$$

を満たす。

ここで正の微小量 ϵ に対して $P_{\text{excite}}(\tau, N_\epsilon) = \epsilon$ が成り立つような系のサイズ N_ϵ を考える。 N_ϵ はその定義と式 (199) から

$$N_\epsilon = P_{\text{excite}}^{-1}(\tau, \epsilon) \lesssim \left(\frac{\ln \kappa \tau}{2g_{c,\epsilon}} \right)^2 = \left(\frac{\ln \kappa \tau}{2\Pi^{-1}(\epsilon)} \right)^2 \quad (200)$$

を満たす。ただし $g_{c,\epsilon} = (\ln \kappa \tau)/2\sqrt{N_\epsilon}$ である。この N_ϵ は与えられた τ のもとで励起確率が小さいような系の長さを意味する。逆に言うと N_ϵ 程度の長さは与えられた τ のもとで励起せずに強磁性の基底状態で居続ける。つまり、 N_ϵ 程度の強磁性状態は時間発展後に残るということなので N_ϵ は相関長に相当する。相関長の逆数は強磁性と強磁性の間にあるキंकの密度にほぼ等しい。従ってキंक密度 ρ が満たす不等式として

$$\rho \sim \frac{1}{N_\epsilon} \gtrsim \frac{(2\Pi^{-1}(\epsilon))^2}{(\ln \kappa \tau)^2} \quad (201)$$

が得られる。キंक密度は系にできたトポロジカルな欠損の密度であり、それは量子アニーリング後の残留誤差を表わす一つの量である。上式は下から押える形ではあるが、そのキंक密度が τ が大きい極限で $1/(\ln \tau)^2$ で減少することを意味している。

Dziarmaga は 4.3 節で説明した Kibble-Zurek の議論を用いてキंक密度の $1/(\ln \tau)^2$ 則を導いている [19]。1 次元の横磁場ランダムイジング模型 (195) は $\Gamma = \Gamma_c = 1$ で量子相転移を起こすことを上で述べた。横磁場の臨界磁場からの距離を

$$\epsilon \equiv \frac{\Gamma - \Gamma_c}{\Gamma_c} = \Gamma - 1 \quad (202)$$

とする。Fisher の繰り込み群解析 [74] によると転移点付近で相関長は ϵ の関数で

$$\xi \approx \xi_0/|\epsilon|^2 \quad (203)$$

のように発達する。また、エネルギーギャップの平均は

$$\Delta \approx \Delta_0 |\epsilon|^{1/|\epsilon|} \quad (204)$$

で転移点に向かって減少する。エネルギーギャップの逆数を「緩和時間」とみなすと、「緩和時間」は

$$\tau_R \approx \tau_0 / |\epsilon|^{1/|\epsilon|} \quad (205)$$

と書ける。ただし、 ξ_0, Δ_0, τ_0 はそれぞれの臨界振幅である。これらの臨界的性質を臨界指数で表わすと、相関長の臨界指数は $\nu = 2$ 、動的臨界指数は $z = 1/2|\epsilon|$ ということになる。動的臨界指数は転移点に向かって発散するという異常な性質を持つが、これは系の乱雑性から来ている。

さて、ここで Kibble-Zurek の議論に従って、「緩和時間」が転移点までの残り時間に等しいという等式を作る。

$$\hat{\tau}_R = \tau \hat{\epsilon} \quad (206)$$

今の場合、横磁場は $\Gamma(t) = -t/\tau$ で t は $-\infty$ から $t = 0$ まで動くので、 $t = -\tau$ が転移点となる。従って転移点までの残り時間は $-\tau - t = \tau\epsilon$ である。上式ではこの方程式を満たす緩和時間および ϵ という意味で $\hat{\epsilon}$ をつけた。この式に式 (205) を代入すると

$$\tau_0 / |\hat{\epsilon}|^{1/|\epsilon|} \approx \tau \hat{\epsilon} \quad (207)$$

が得られる。 $\tau/\tau_0 \gg 1$ とすると $\hat{\epsilon} \ll 1$ なので

$$\frac{1}{|\hat{\epsilon}|} \ln \frac{1}{|\hat{\epsilon}|} \approx \ln \frac{\tau}{\tau_0} \quad (208)$$

となり、近似的に

$$\frac{1}{|\hat{\epsilon}|} \approx \frac{\ln(\tau/\tau_0)}{\ln \ln(\tau/\tau_0)} \quad (209)$$

が得られる。

ところで「緩和時間」は基底状態が持つタイムスケールに他ならない。今、状態は $\Gamma = \infty$ の基底状態から断熱的に時間発展してきているわけだが、 ϵ が $\hat{\epsilon}$ より小さくなると状態のタイムスケールが転移点までの残り時間よりも永くなる。その結果、状態の断熱発展はそこで破たんしてしまう。その時点で状態の発展が止まってしまうと考え、式 (209) を式 (203) に代入したものが $t = 0$ の終状態の相関長となる。

$$\hat{\xi} \approx \frac{[\ln(\tau/\tau_0)]^2}{[\ln \ln(\tau/\tau_0)]^2} \quad (210)$$

相関長の逆数はキンク密度と定性的に等しいので、キンク密度の式として次のものが得られる。

$$\rho \approx \frac{1}{\hat{\xi}} \approx \frac{[\ln \ln(\tau/\tau_0)]^2}{[\ln(\tau/\tau_0)]^2} > \frac{1}{[\ln(\tau/\tau_0)]^2} \quad (211)$$

従って、式 (201) と同様の結果が導かれる。

Caneva らは式 (195) を Jordan-Wigner 変換により自由なフェルミオン系に変換し、Schrödinger 方程式に等価なフェルミオンの Bogoliubov-de Gennes 方程式を数値計算することでキンク密度の $1/(\ln \tau)^2$ の振る舞いを確かめた。さらに、残留エネルギーの減少率についても数値的に評価し、

$$E_{\text{res}} \sim 1/(\ln \tau)^\zeta, \quad \zeta \sim 3.4 \quad (212)$$

を導いている [18]。しかし、この残留エネルギーの評価は $N = 512$ サイトまでの数値計算に基づくもので必ずしもよく裏付けられているとは言えない。今後の解析的な裏付けが必要である。

6.2 シミュレーティッド・アニーリングとの比較

前の小節では1次元ランダムイジング模型に対する量子アニーリング後のキंक密度を導出した。この小節ではシミュレーティッドアニーリングによる同じ量を導出する。

式(195)に対応して横磁場のない1次元ランダムイジング模型を考える。

$$H = - \sum_i J_i \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (213)$$

σ_i はイジングスピン変数である。結合定数は式(197)と同様に

$$P(J_i) = \begin{cases} 1 & J_i \in [0, 1] \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases}, \quad (214)$$

で与える。イジング模型の有限温度のダイナミクスとして Glauber ダイナミクス [90] を用いる。結合定数がランダムな時の Glauber ダイナミクスは i サイトのスピンの熱平均値を $S_i(t)$ とすると

$$\alpha \frac{d}{dt} S_i(t) = -S_i(t) + \frac{1}{2} \left(\gamma_i^- S_{i-1}(t) + \gamma_i^+ S_{i+1}(t) \right) \quad (215)$$

と書ける (Appendix A)。 α は時間の単位を定めるが、以下では $\alpha = 1$ とする。 $\gamma_i^\pm$ は

$$\gamma_i^\pm = \tanh \beta (J_i + J_{i-1}) \pm \tanh \beta (J_i - J_{i-1}) \quad (216)$$

で定義される。 β は逆温度である。

まず温度一定のもとでのいくつかの物理量の表式を求める。 $\{J_i\}$ が固定されている時の i サイトと $i+k$ サイトの間の相関関数は

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+k} \rangle = \prod_{j=i}^{i+k-1} \tanh \beta J_j \quad (217)$$

となる。このランダム平均をとると熱力学極限での相関関数が得られる。

$$\begin{aligned} [\langle \sigma_i \sigma_{i+k} \rangle]_{\text{av}} &= \int \left[\prod_j dJ_j P(J_j) \right] \langle \sigma_i \sigma_{i+k} \rangle = \left[\int dJ P(J) \tanh \beta J \right]^k \\ &= \left(\frac{1}{\beta} \ln \cosh \beta \right)^k \end{aligned} \quad (218)$$

相関長 ξ は $[\langle \sigma_i \sigma_{i+k} \rangle]_{\text{av}} = e^{-k/\xi}$ で定義される。上式を代入すると

$$\xi = \left[\ln \left(\frac{\beta}{\ln \cosh \beta} \right) \right]^{-1} \quad (219)$$

となる。低温極限 ($\beta \gg 1$) では

$$\xi \approx \frac{\beta}{\ln 2} \quad (220)$$

である。 $\{J_i\}$ が固定されている時のエネルギー期待値は

$$\langle H \rangle = - \sum_i J_i \langle \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle = - \sum_i J_i \tanh \beta J_i \quad (221)$$

と書ける。ただし、式 (217) で $k = 1$ としたものをを用いた。ランダム平均をとり、サイズ N で割り $N \rightarrow \infty$ とすると、熱力学極限での 1 スピンあたりのエネルギーの表式が得られる。

$$\begin{aligned}\varepsilon &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{[\langle H \rangle]_{av}}{N} = - \int dJ P(J) J \tanh \beta J \\ &= -\frac{1}{2} + \frac{1}{\beta^2} \frac{\pi^2}{24} - \frac{1}{\beta} \ln(1 + e^{-2\beta}) + \frac{1}{2\beta^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^2} e^{-2n\beta}.\end{aligned}\quad (222)$$

低温極限では

$$\varepsilon \approx -\frac{1}{2} + \frac{1}{\beta^2} \frac{\pi^2}{24} \quad (223)$$

となる。緩和時間 τ_R は Dhar-Barma によって導出されている [91]。導出は Appendix B にまわして結果だけ書くと、

$$\tau_R = \frac{1}{1 - \tanh 2\beta} \quad (224)$$

となり一様なイジング模型の場合と同じになる。低温極限では

$$\tau_R = \frac{1}{2} e^{4\beta} \quad (225)$$

と書いて絶対零度で緩和時間は発散する。

次に温度を高温から絶対零度に下げること考える。温度降下のスケジュールとして

$$T(t) = -\frac{t}{\tau} \quad (226)$$

を仮定する。時刻は $t = -\infty$ から 0 まで進むとする。初期時刻に系は熱平衡状態にあるとする。温度を下げることに伴う系の時間発展を以下に Kibble-Zurek の議論によって考察する。温度が高い時、緩和時間が短いために系は熱平衡状態を保ち続ける。温度が下がってくると緩和時間が長くなり、系が熱平衡状態になる前に温度がさらに下がるようになる。こうして系の時間発展は温度降下についてゆけずに、基底状態にはなれずに励起状態で固まってしまう。系が固まってしまう温度を見積もるために次の等式を作る。

$$\tau_R(T(\hat{t})) = |\hat{t}|. \quad (227)$$

この等式は緩和時間が残り時間と等しくなる時刻 $\hat{t}$ を定義する。時刻が $\hat{t}$ を過ぎると、緩和時間が残り時間より永くなり、もはや終時刻になるまで系は熱平衡状態には到達できない。従って温度 $T(\hat{t})$ において系の低温への発展はほぼ止まる。そうすると、終状態の性質は温度 $T(\hat{t})$ での性質でほぼ決まることになる。したがって終状態の相関長は温度 $T(\hat{t})$ での値 $\xi(T(\hat{t})) \equiv \hat{\xi}$ で近似できる。 τ が大きいと $T(\hat{t})$ は低くなるので τ が大きい極限では $\xi(T(\hat{t}))$ と $\tau_R(T(\hat{t}))$ として低温での表式 (220)、(225) を用いてよい。すると $\tau_R(T(\hat{t}))$ は $\hat{\xi}$ により

$$\tau_R(T(\hat{t})) = \frac{1}{2} \exp(4\hat{\xi} \ln 2) \quad (228)$$

と書ける。また、式 (220) と (226) より $|\hat{t}|$ は $\xi(T(\hat{t}))$ を用いて

$$|\hat{t}| = \frac{\tau}{\hat{\xi} \ln 2} \quad (229)$$

と書ける。式 (227) よりこれらの 2 式を等しいとおくと

$$\hat{\xi} = \frac{1}{4 \ln 2} \left(\ln \tau - \ln \frac{\hat{\xi} \ln 2}{2} \right) \quad (230)$$

が得られる。この方程式は解析的には解くことができない。しかし、もし $\hat{\xi}$ が大きいなら $\ln \hat{\xi}$ は $\hat{\xi}$ に比べて無視できる。従って $\hat{\xi}$ は τ が大きい極限で $\ln \tau$ に比例する。

相関長の逆数はスピン鎖に生じているキंक密度にほぼ等しい。式 (230) よりキंक密度は

$$\rho \approx \frac{4 \ln 2}{\ln \tau - \ln \frac{\hat{\xi} \ln 2}{2}} \quad (231)$$

となる。式 (230) の下で述べた理由により τ が大きい極限で上式右辺の分母の第 2 項は無視できる。従ってキंक密度は $1/\ln \tau$ で減少する。

相関長と同様に残留エネルギーも温度 $T = T(\hat{t})$ の値から評価する。低温での表式 (225)、(226)、(227) から

$$\frac{1}{2} e^{4\hat{\beta}} = \frac{\tau}{\hat{\beta}} \quad (232)$$

が得られる。ここで $\hat{\beta} = 1/T(\hat{t})$ である。この方程式を両辺で対数をとって変形すると

$$\hat{\beta} = \frac{1}{4} \ln 2\tau - \frac{1}{4} \ln \hat{\beta} \quad (233)$$

が出る。この式を式 (223) の β に代入すると

$$\hat{\varepsilon} = -\frac{1}{2} + \frac{2\pi^2}{3} \frac{1}{(\ln 2\tau - \ln \hat{\beta})^2} \quad (234)$$

を得る。1 スピンあたりの真の基底状態のエネルギーは $-\frac{1}{2}$ なので、1 スピンあたりの残留エネルギーは

$$\varepsilon_{\text{res}} = \frac{2\pi^2}{3} \frac{1}{(\ln 2\tau - \ln \hat{\beta})^2} \quad (235)$$

となる。 τ が大きい極限では分母の $\ln \hat{\beta}$ の項は $\ln \tau$ の項に比べて無視できる。したがって残留エネルギーは $1/(\ln \tau)^2$ で減少することがわかる。

次に時間に線形な温度降下ではなく対数的な温度降下

$$T(t) = \frac{\chi}{1 + b \ln \left(-\frac{\chi \tau}{t} \right)} \quad (236)$$

を考えてみる。ただし、 χ と b はある正の数で、時刻 t は $-\chi\tau$ から 0 まで進むと仮定する。このスケジュールでは温度は χ から 0 まで下がる。

$\beta = 1/T(t)$ とおいて式 (236) を変形すると

$$-t = \chi \tau e^{1-\chi\beta} \quad (237)$$

が得られる。ここで緩和時間と残り時間が釣り合う条件式 (227) を課す。条件式を満たす逆温度を $\hat{\beta}$ と書くことにする。条件式と式 (237)、さらに緩和時間の低温での表式 (225) から $\hat{\beta}$ に関する次の方程式が導かれる。

$$\frac{1}{2}e^{4\hat{\beta}} = \chi\tau e^{1/b - (\chi/b)\hat{\beta}} \quad (238)$$

この方程式は解析的に解くことができ、

$$\hat{\beta} = \frac{\ln(2e^{1/b}\chi\tau)}{4 + \chi/b} \quad (239)$$

が得られる。相関長の低温での表式 (220) から終状態におけるキंक密度

$$\rho \approx \frac{1}{\hat{\xi}} \approx \frac{(\ln 2)(4 + \frac{\chi}{b})}{\ln \tau + \ln(2\chi) + \frac{1}{b}} \quad (240)$$

が求まる。これより τ が大きい極限でキंक密度が $1/\ln \tau$ で減少することがわかる。1 スピンあたりの残留エネルギーは式 (223) と (239) から

$$\varepsilon_{\text{res}} \approx \frac{\pi^2}{24} \frac{(4 + \frac{\chi}{b})^2}{(\ln \tau + \frac{1}{b} \ln(2\chi))^2} \quad (241)$$

と求まる。これより 1 スピンあたりの残留エネルギーは τ が大きい極限で $1/(\ln \tau)^2$ で減少することがわかる。

ここまで線形と対数的な温度降下を調べた。線形な温度降下と対数的な温度降下では、前者には対数補正が入るとい違いがあるものの主要項を見る限りキंक密度が $1/\ln \tau$ で、残留エネルギーが $1/(\ln \tau)^2$ で減少することに違いはない。

以上の結果をモンテカルロシミュレーションで検証する。モンテカルロ法によるランダムイジング模型のダイナミクスは Glauber ダイナミクスと等価である。実際のシミュレーションでは 500 サイトの 1 次元スピン系に対して初期時刻 $t = -5\tau$ 、初期温度 $T = -5$ から式 (226) あるいは式 (236) に従って温度を下げた。式 (236) に含まれるパラメータについては $\chi = 5$ 、 $b = 10$ とした。系のランダムな結合定数 $\{J_i\}$ は 100 セットの異なる値を与えて計算の最後に平均をとる。各 $\{J_i\}$ の配置に対してシミュレーティッドアニリングは乱数を変えて 500 回行って結果の平均をとる。

図 10 にモンテカルロシミュレーションの結果を示す。左がキंक密度 (ρ) で右が 1 スピンあたりの残留エネルギー (ε_{res}) である。上の Kibble-Zurek の議論に基づく結論が正しければ、キंक密度は線形に温度降下させた場合は式 (231) で、対数的に降下させた場合は式 (240) で、残留エネルギーは線形降下の場合は式 (235) で、対数降下の場合は式 (241) でフィットできるはずである。ただし、ここでモンテカルロシミュレーションにおけるモンテカルロステップと Glauber の運動方程式 (215) に含まれる時間は一般に単位が異なることに注意しないといけない。そこで温度降下率の逆数 τ とモンテカルロシミュレーションのそれ τ^{mc} との比 $c \equiv \tau/\tau^{\text{mc}}$ をフィッティングパラメータとする。さらにキंक密度 ρ は厳密には相関長 $\hat{\xi}$ の逆数ではないと考えられるので、 a をパラメータとして、線形温度降下の場合には

$$\rho = \frac{a}{\hat{\xi}} \quad (242)$$

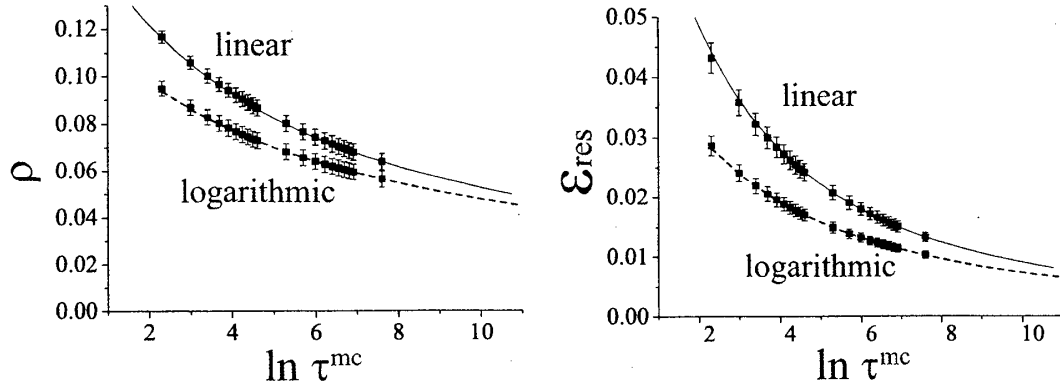


図 10: モンテカルロシミュレーションの結果とフィッティング曲線。1 次元 500 サイトのランダムイジング模型に対して線形な温度降下 (式 (226)) または対数的な温度降下 (式 (236)) によりシミュレーティッドアニーリングを行った。対数温度降下のパラメータは $\chi = 5$ 、 $b = 10$ にとっている。初期時刻はどちらのスケジュールとも $t = -5\tau^{\text{mc}}$ とし、従って初期温度は $T = 5$ とした。四角印がモンテカルロシミュレーションの結果。左：キンク密度。右：1 スピンあたりの残留エネルギー。フィッティング曲線は式 (231)、(235)、(240)、(241) を元にモンテカルロステップと Glauber ダイナミクスの時間の単位の違い ($\tau^{\text{mc}} = c\tau$) の補正、キンク密度を相関長から求める式の補正 ($\rho = a/\hat{\xi}$)、残留エネルギーを逆温度から求める式の補正 ($\varepsilon_{\text{res}} = \pi^2/24(\alpha\hat{\beta})^2$) を調節して得られた。シミュレーション結果とフィッティング曲線は全ての場合によく合っている。この結果により Kibble-Zurek の議論に基づいた理論の正しさが裏付けられた。

でフィットする。ただし $\hat{\xi}$ は式 (230) で τ を $c\tau^{\text{mc}}$ で置き換えたもの

$$\hat{\xi} = \frac{1}{4\ln 2} \left(\ln \tau^{\text{mc}} + \ln c - \ln \frac{\hat{\xi} \ln 2}{2} \right) \quad (243)$$

の解である。対数温度降下の場合には

$$\rho = \frac{a(4 + \frac{\chi}{b}) \ln 2}{\ln \tau + \ln c + \ln(2\chi) + \frac{1}{b}} \quad (244)$$

でフィットする。残留エネルギーについては α をパラメータとして、線形温度降下の場合には

$$\varepsilon_{\text{res}} = \frac{\pi^2}{24} \frac{1}{(\alpha\hat{\beta})^2} = \frac{\pi^2 (\ln 2)^2}{24 (\alpha\hat{\xi})^2} \quad (245)$$

でフィットする。ただし、 $\hat{\xi}$ は式 (243) の解である。対数温度降下の場合には

$$\varepsilon_{\text{res}} = \frac{\pi^2}{24} \frac{(4 + \frac{\chi}{b})^2}{\alpha^2 (\ln \tau + \ln c + \frac{1}{b} \ln(2\chi))^2} \quad (246)$$

でフィットする。

線形温度降下に対して $a \approx 0.24$ 、 $c \approx 21.46$ 、 $\alpha \approx 2.137$ として得られたものが図 10 の実線である。キンク密度も残留エネルギーもシミュレーション結果とよく一致している。また、 $a \approx 0.24$ 、 $c \approx 27.09$ 、 $\alpha \approx 2.145$ として対数温度降下に対して得られた曲線が図の点線である。対数温度降

下の場合もシミュレーション結果と理論曲線はよく合っている。時間の単位に相当するパラメータ c の値が線形温度降下と対数温度降下で若干異なるが、 $\ln c$ で見ると差は 10% 以下で、誤差の範囲内と考える。実際に線形温度降下の場合で得られた c の値を用いて対数温度降下の場合の曲線を描いても、それはモンテカルロシミュレーションのエラーバーの範囲に収まる。

モンテカルロシミュレーションの結果は上に述べた理論の正しさを支持している。従って 1 次元ランダムイジング模型のシミュレーティッドアニーリング後のキンク密度と残留エネルギーは、それぞれ温度減少率の逆数 τ が大きい極限で $1/\ln \tau$ と $1/(\ln \tau)^2$ で減少することが結論づけられる。

ここで 2.1 節で述べた Huse-Fisher 則を思い出してみたい。Huse-Fisher 則はシミュレーティッドアニーリング後の残留エネルギーが $1/(\ln \tau)^\zeta$ 、 $\zeta \leq 2$ で減少するというものである。この小節で導いた残留エネルギーに関する結果は 1 次元ランダムイジング模型について Huse-Fisher 則を再現している。ただし用いた論法は異なっていることを強調しておく。さらにここではキンク密度の減少率が $1/\ln \tau$ となることが新たな発見である。

前小節で 1 次元ランダムイジング模型に量子アニーリングを行うとキンク密度の減少率が

$$\rho^{\text{QA}} \sim \frac{1}{(\ln \tau)^2} \quad (247)$$

となることを述べた。この小節で導いたことは同じ模型にシミュレーティッドアニーリングを行うと

$$\rho^{\text{SA}} \sim \frac{1}{\ln \tau} \quad (248)$$

となることである。このことから、少なくとも 1 次元ランダムイジング模型については量子アニーリングの方がキンク密度の減少率が早いことが示された。残留エネルギーについては、量子アニーリング、場合、現在までの理解ではあいまいさが残るものの

$$\varepsilon_{\text{res}}^{\text{QA}} \sim \frac{1}{(\ln \tau)^{3.4}} \quad (249)$$

であり、シミュレーティッドアニーリングの場合は

$$\varepsilon_{\text{res}}^{\text{SA}} \sim \frac{1}{(\ln \tau)^2} \quad (250)$$

である。従って残留エネルギーの減少率の比較でも量子アニーリングの方が早いことが示唆される。

6.3 考察

前小節までで、1 次元ランダムイジング模型に関しては量子アニーリングとシミュレーティッドアニーリングには定量的な違いがあつて、前者の方が誤差（キンク密度）の減少が早いことがわかった。このことを温度と横磁場を軸とした相図を使って考察してみたい。

1 次元ランダム強磁性イジング模型の相図は図 11 左のようになっている。まず、絶対零度 ($T = 0$)、横磁場ゼロ ($\Gamma = 0$) の基底状態は全てのスピンの上向きか下向きに揃った完全強磁性の秩序状態である。この秩序状態は横磁場を有限にしても $\Gamma_c = 1$ の量子臨界点までは保たれる。絶対零度、

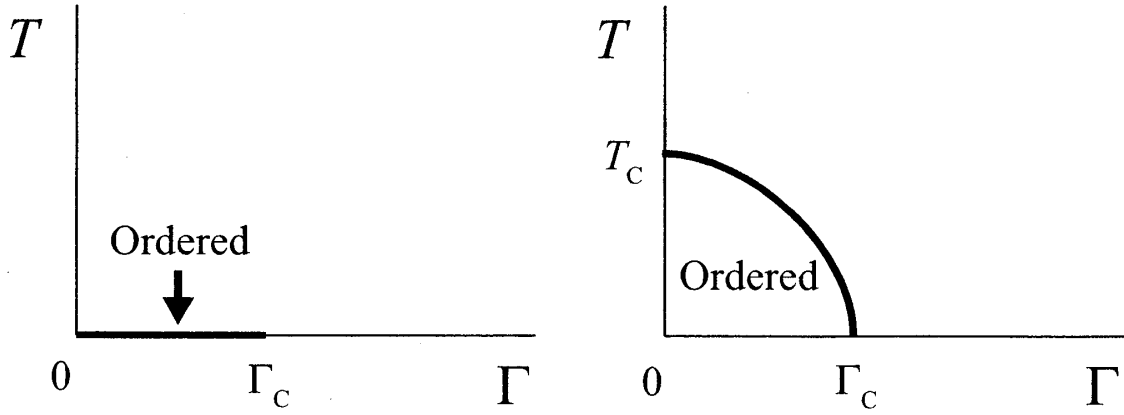


図 11: 左: 1次元横磁場ランダム強磁性イジング模型の相図。横軸が横磁場の強さ (Γ) で縦軸が温度。絶対零度、 $\Gamma = \Gamma_c = 1$ で量子相転移が起き、 $\Gamma < \Gamma_c$ で基底状態は自発磁化を持つ強磁性秩序状態となる。有限温度の平衡状態は横磁場の強さによらず無秩序状態である。右: 高次元の横磁場イジング模型の模式的な相図。有限温度で相転移があり、低温低磁場に秩序相が存在する。

$\Gamma > 1$ の基底状態は無秩序状態である。有限温度では、横磁場の強さに関わらず秩序は壊されて無秩序状態が安定である。

この相図上で量子アニーリングは $T = 0$ の線上で Γ を大きな値から下げていくことに相当する。その過程には量子臨界点が存在し、Kibble-Zurek 機構によりアニーリング後に欠損（キンク）が残ってしまう。一方、シミュレーティッドアニーリングは $\Gamma = 0$ の線上で T を大きな値から下げていく。有限温度で相転移はないが絶対零度を臨界点とみなすことができ、実際に絶対零度に向かって相関長や緩和時間は発散する。その結果、やはり Kibble-Zurek 機構によりアニーリング後にキンクができてしまう。

相転移の観点で見ると、今考えている 1次元イジング模型においては量子アニーリングとシミュレーティッドアニーリングの過程は Γ と T に関して対称になっていない。量子アニーリングの過程には相転移があり、シミュレーティッドアニーリングの過程には終時刻になるまで相転移がない。素朴に考えると量子アニーリングの方が転移点が原点から離れているので原点の状態を得るには不利な気がする。にもかかわらず量子アニーリングの方が残留誤差を早く減らすというのは不思議な結果である。実はこの結果は臨界点近傍の臨界指数の違いからきている。式 (203) と (205)、および式 (220) と (225) から $T = 0, \Gamma = \Gamma_c + 0$ における量子臨界指数は $\nu = 2, z = c/|c|$ であり、 $T = +0, \Gamma = 0$ における臨界指数は $\nu = 1, z = c'/T$ である。ただし、 c と c' は議論に無関係な定数である。今の場合、相関長の臨界指数 ν の違いがキンク密度の減少率における $1/(\ln \tau)^2$ と $1/\ln \tau$ の違いを生んでいるのである。

1次元ランダム強磁性イジング模型の結果は高次元のより複雑な模型にどの程度一般化できるだろうか。まず、ランダム強磁性の模型を考えてみると、高次元系の相図は図 11 右のようになると考えられる [76]。1次元系の議論を当てはめて考えると、 $T = 0, \Gamma = \Gamma_c$ と $T = T_c, \Gamma = 0$ のユニバーサリティークラスが違って臨界指数が異なれば量子アニーリングとシミュレーティッド

アニーリングに違いが生じるはずである。さらに、ユニバーサリティークラスが同じ臨界点を通過する過程であれば誤差の減少率は同じになることも予想できる。つまり相図上で T と Γ を同時に変える過程であっても、横切る臨界点のユニバーサリティークラスによって誤差の減少率は決まってしまうはずである。しかし、残念ながら高次元系の臨界指数は一般的にはわかっていないので、図 11 右のような系の量子アニーリングとシミュレーティッドアニーリングの比較はできていない。ただし、シミュレーティッドアニーリングには Huse-Fisher 則があるので残留エネルギーの減少率は次元によらず $1/(\ln \tau)^2$ となるはずである。量子アニーリングによる残留エネルギーの減少率は、高次元系に対しては明らかになっていないが、1 次元系の数値計算では $1/(\ln \tau)^{\zeta^{QA}}$ で $\zeta^{QA} \sim 3.4$ が見積もられている。高次元で残留エネルギーの振る舞いが変わらないとすれば、図 11 右のような相図になっていたとしても、量子アニーリングのダイナミクスの方が残留誤差の減少率を大きくすることが期待できる。

最後にスピングラスや K-SAT のような基底状態がでたらめなランダムイジング模型を考えてみる。一般的な横磁場ランダムイジング模型の相図についてはまだわかっていないことが多いが、大雑把に言って図 11 右のようになるはずである [77, 78, 79]。ここでの秩序はスピングラス秩序と呼ばれるものである。横磁場がゼロの時、Huse-Fisher 則からシミュレーティッドアニーリングによる残留エネルギーの減少率は $1/(\ln \tau)^{\zeta^{SA}}$ となるはずである。ただし、次元やランダムさの程度により $\zeta^{SA} < 2$ になる場合がありうる。そのような場合に量子アニーリングにより得られる ζ^{QA} がどうなるかは未知である。ランダム強磁性模型の場合の推論を進めると ζ^{QA} が ζ^{SA} より大きいと考えたくなるが、現段階では確かなことは何もない。

7 展望

量子アニーリングは今後もさらに発展する可能性を秘めている。以下では筆者の独断により三つの方向に分けて量子アニーリングの今後の発展を展望したい。

基礎理論

量子アニーリングの研究は量子状態の断熱発展の理解を促進させている。本論文の第 6 節では 1 次元ランダムイジング模型の最適化を例題に、量子アニーリングがシミュレーティッドアニーリングより速くキंक密度を減らすことを述べた。1 次元ランダムイジング模型はダイナミクスの観点からは非自明であるが、最適化問題としては自明な解を持つ。第 6 節の結果が自明でない解を持つ模型に一般化できるかどうかは今のところ不明である。Sherrington-Kirkpatrick 模型や 3-SAT 問題などでは基底状態はスピングラスの秩序を持つ。もしその秩序が絶対零度で有限の横磁場まで保たれるとすると、ある臨界磁場でスピングラス秩序-無秩序の量子相転移が起きる。臨界点で基底状態の上のエネルギーギャップは熱力学極限で閉じるが、スピングラス相でもギャップが閉じ続けることが想像できる。このことは第 6 節で考えた強磁性模型とは異なる。スピングラス相でギャップが閉じ続けるということは、無秩序相の基底状態から横磁場を下げながら時間発展させると臨界点近傍だけでなくスピングラス相内で常に励起状態へ非断熱遷移する可能性があることを意味する。スピングラスのような乱れた系の断熱発展の理論は第 6 節の 1 次元系で作られただけ

で、スピングラス秩序があるような系では作られていない。しかし、近年、エンタングルメントの臨界的性質の発見 [80] に触発されて量子相転移への関心は高まっている [81]。さらに、量子相転移をまたぐ状態の断熱発展、すなわち Kibble-Zurek 機構の研究もいくつかの模型で発展している [82, 83, 84, 85]。量子ランダムスピン系の相転移のダイナミクスの研究はベビーシッターが周りに何人もいる赤ん坊のような状況であり、今後の急速な成長が予想されるのである。

量子計算

本論文では量子アニーリングの量子計算の側面についてはあまり触れられていない。しかし量子計算の分野で量子断熱計算と呼ばれる量子アニーリングは理論的にも実験的にも研究がなされている。まず理論的には、量子断熱計算は通常の量子計算と等価であることが証明されている [86]。通常の量子計算とは量子ゲートにより構成された回路で行われる量子計算のことである [6]。今のところ具体的な量子断熱計算を量子ゲートの組み合わせで行う方法、またはその逆についてはわかっていない。興味深いことはシミュレーティッドアニーリングを量子ゲートの回路で実行する方法が考え出されていることである [87]。それによるとシミュレーティッドアニーリングが必要とする計算量は古典計算よりも量子計算で減らすことができる。現在のところ量子断熱計算で組み合わせ最適化問題の計算量が古典計算より減るかどうかは明らかではない [88]。しかし、シミュレーティッドアニーリングによる組み合わせ最適化問題や因数分解のように、通常の量子計算で計算量が減らせることがわかっている問題は存在するので、将来量子断熱計算が計算量を減らすことが証明されるかもしれない。実験的にも量子断熱計算のアルゴリズムは注目されていて、第 3.2 節で述べたようにすでに基礎実験は行われている。将来それが大規模系にどのように拡張されるかが課題であるが、商用の量子計算機を開発している企業もある [40]。その試みが成功するかどうかはわからないが、量子断熱計算が注目されていることは確かである。

計算物理

現実的に量子アニーリングで組み合わせ最適化問題を解こうとすると現時点では古典計算機に頼らざるを得ない。古典計算機で量子アニーリングを実行するには量子モンテカルロ法を用いるのが最も有効であると考えられる。今までの数値実験はほとんど 3.3.2 節で説明した最も原始的な量子モンテカルロ法が用いられている。しかし、量子モンテカルロ法は計算物理の分野で大幅な改良がなされており [89]、それをうまく使えば量子アニーリングの収束時間を大幅に短縮できる可能性がある。量子アニーリングに関わる模型は負符号問題を生じない横磁場イジング模型なので、量子モンテカルロ法を用いた量子アニーリングの今後の発展には大きな期待が持てる。洗練された量子モンテカルロ量子アニーリング法は組み合わせ最適化問題だけでなく量子スピングラスの平衡・非平衡状態の研究などにも著しい寄与をもたらすはずである。

8 まとめ

本論文では組み合わせ最適化問題に対する量子アニーリングの方法について述べてきた。

第 1 節の序論に続いて第 2 節では組み合わせ最適化問題のイジングスピンによる定式化をいくつかの具体的な問題について行った。そもそも物理とは直接関係のない組み合わせ最適化問題に

物理を応用するようになったのはイジング模型でそれらを表現できるからと言っても過言ではないだろう。組み合わせ最適化問題に限らず、情報処理や神経科学などの分野で様々な問題がイジング模型で表現できることが知られており、現在では多くの物理の専門家が物理を他の分野で積極的に応用している。第2節では組み合わせ最適化問題に対するシミュレーティッドアニーリングの方法についても述べた。シミュレーティッドアニーリングは組み合わせ最適化問題に古典統計力学を応用した手法である。絶対零度の最適化問題に有限温度の Maxwell-Boltzmann 分布を導入し、系の温度を高温から徐々に冷やすことで最適化を行う。シミュレーティッドアニーリングは最適化問題に有効な手法の一つとして定着している。また、この手法は後の最適化問題に対する統計力学的方法の発展に大きく寄与している。本論文では、シミュレーティッドアニーリングの性質の一端を示すために温度冷却後の残留エネルギーに関する Huse-Fisher の理論を第2節の最後に紹介した。

第3節では量子アニーリングの方法を述べた。量子アニーリングの方法は組み合わせ最適化問題に量子力学を応用したものである。温度は絶対零度のままで、イジングスピンを Pauli スピンの z 成分として、それと非可換な Pauli スピンの x 成分により書かれる「運動エネルギー」を導入する。典型的には Pauli スピンの x 方向の横磁場により導入する。始めに「運動エネルギー」がハミルトニアンを支配するようにし、状態は「運動エネルギー」の基底状態にとる。そこから徐々にハミルトニアンの中の「運動エネルギー」の割合を小さくして、最適化したいイジング模型に相当する「ポテンシャルエネルギー」の割合を大きくする。その過程で状態を断熱的に時間発展させ、最終的に「ポテンシャルエネルギー」の基底状態をよく近似する状態を得る。この量子アニーリングは確率論、化学、統計力学、量子計算の分野で独立に考え出されている。第3節ではまず量子アニーリングのアルゴリズムを説明し、それから実行方法を述べた。量子アニーリングの実行には二つのやり方がある。一つは量子計算機を用いてやる方法である。量子アニーリングは組み合わせ最適化問題に対する量子計算のアルゴリズムになっている。従って量子計算機を用いて実行するのが最も効率が良い。現在はまだ量子計算機を用いて実際の大規模な問題を解く段階ではないが、将来実現すると仮定してどの程度の効率が得られるのかが議論されている。実験では3スピン（3量子ビット）NMR 量子計算機を用いた量子アニーリングが実行されている。本論文では計算時間のサイズ依存性に関する議論と NMR の実験を第3.2節で紹介した。もう一つのやり方は古典計算機を用いて実行する方法である。量子アニーリングを古典計算機で実行するためには量子状態の時間発展を計算しないとイケない。そのためには計算の工夫が必要となる。本論文では密度行列繰り込み群の方法と量子モンテカルロ法による時間発展の計算法を紹介した。前者は Schrödinger 方程式を計算できるので量子計算を古典計算機で行っていることになる。量子計算の大規模なシミュレーションに向いている。ただし今のところ1次元系しか精度よく計算ができないので現実の問題への応用は難しい。後者は高次元系に対して確率的な時間発展を計算する。現実の問題を解くのが目的ならば Schrödinger 方程式の時間発展にこだわる必要はない。現実の問題に量子アニーリングを適応するための方法である。第3節の終わりではモンテカルロ法による数値実験、および物質 $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ を用いた実験によって量子アニーリングとシミュレーティッド

アニーリングを比較した研究を紹介した。それらの多くは量子アニーリングがシミュレーティッドアニーリングより早く最適化を行うことを示唆するものである。

量子アニーリングは本質的に量子力学的な状態の断熱時間発展により最適化を行う。従って量子状態の断熱時間発展を理解することが量子アニーリングの性質を理解することにつながる。そこで第4章では量子状態の断熱時間発展の理論を説明した。4.1節で述べた断熱定理はハミルトニアンが時間とともにゆっくり変化する時の状態の断熱時間発展に関するものである。時刻を t 、ハミルトニアンの変化率を $1/\tau$ として、ハミルトニアンが t/τ の関数 $\bar{H}(s)$ であるとする。 $t=0$ の初期状態が初期ハミルトニアン $\bar{H}(0)$ の基底状態だったとすると、各時刻のハミルトニアンの基底状態と第1励起状態の間のエネルギーギャップ $\omega_{10}(s)$ が有限で

$$\tau \gg \frac{\max \left[\left| \langle 1(s) | \frac{d\bar{H}(s)}{ds} | 0(s) \rangle \right| \right]}{\min [\omega_{10}(s)]^2} \quad (251)$$

を満たすとき、状態はほぼ断熱的に発展し、非断熱励起する確率は大きくてもオーダー $1/\tau$ となる。4.2節では2準位系の Landau-Zener 公式を導いた。2つの状態のエネルギー準位が入れ替わる時に状態間の飛び移りにより有限のエネルギーギャップが開く、いわゆる準位非交差が起きる系で、状態の断熱発展は Landau-Zener 公式により記述される。二つの状態のエネルギー差のスロープを α 、飛び移りを Δ と書くと、始めに基底状態にあった状態が断熱発展して、準位が入れ替わった後に基底状態にいる確率は $P_{\text{ad}} = 1 - e^{-2\pi\Delta^2/\alpha}$ となる。4.3節では量子相転移における Kibble-Zurek の議論を紹介した。Kibble-Zurek の議論は熱力学極限での相転移の時間発展に関する一般論である。無秩序状態から秩序状態への相転移をまたいで状態を時間発展させると終状態では完全な秩序状態はできずに系に欠損が生じてしまう。量子相転移の臨界点上ではエネルギーギャップは閉じて断熱定理は適用できない。しかし、Kibble-Zurek の議論によると欠損の数は系をゆっくり変化させればさせるほど減っていき、その減少率には普遍的な臨界指数が現れる。

第4節では有限系の量子アニーリング後の残留誤差について述べた。時刻を t 、ハミルトニアンの時間変化率を τ としてハミルトニアンが t/τ に線形に比例すると仮定する。まず、数値計算により、 τ が大きい極限で量子アニーリング後の終状態のエネルギーと真の基底状態エネルギーとの差 (= 残留エネルギー) が $1/\tau^2$ に比例して τ により減少することを示した。有限系では特別な対称性がない限り有限のエネルギーギャップが基底状態の上に開く。従って τ が大きい時には断熱定理が適用できる。第4節の後半では断熱定理に基づいて残留エネルギーが τ が大きい極限で $1/\tau^2$ の振る舞いを示すことを解析的に明らかにした。

第5節では熱力学極限の量子アニーリングの残留誤差とシミュレーティッドアニーリングのそれを比較した。熱力学極限では残留誤差に関する一般的な理論は今のところ存在しない。ここでは1次元ランダム強磁性イジング模型を取り上げて、解析的な結論を導いた。1次元ランダム強磁性イジング模型の基底状態は自明であるが、それを得るための量子アニーリングやシミュレーティッドアニーリングのダイナミクスは非自明である。得られた結論は、終状態が持つ誤差に相当するキंक密度の減量率が量子アニーリングでは

$$\rho^{\text{QA}} \sim \frac{1}{(\ln \tau)^2} \quad (252)$$

であり、シミュレーティッドアニーリングでは

$$\rho^{\text{SA}} \sim \frac{1}{\ln \tau} \quad (253)$$

である。ここで τ は量子アニーリングの場合には横磁場の降下率の逆数、シミュレーティッドアニーリングの場合には温度の降下率の逆数である。この結果は量子アニーリングの方が誤差の減少率が大きいことを示している。まず第5節の前半では、量子アニーリング後の終状態のキंक密度の導出を行った。横磁場中のイジング模型はある横磁場の強さで量子相転移を起こす。有限系で転移点上でのエネルギーギャップの分布と Landau-Zener 公式から転移点での状態の非断熱遷移確率を求める。それから終状態における強磁性の相関長、さらにキंक密度を評価することが可能となる。後半ではシミュレーティッドアニーリングを議論した。1次元イジング模型は有限温度で相転移を起こさないが、絶対零度に向かって相関長および緩和時間が発散する。それらの物理量の温度依存性と温度降下のスケジュールを用いて Kibble-Zurek の議論からアニーリング後のキंक密度を求めることができる。1次元ランダム強磁性イジング模型の結果をただちに他のランダムイジング模型に一般化することはできない。しかし、ここで示したように少なくとも1次元系で量子アニーリングとシミュレーティッドアニーリングに違いが現れることは確かであり、その違いが他の模型に対しても同じように現れることは十分に考えられる。一般のランダムイジング模型に対して量子アニーリングダイナミクスと熱的アニーリングダイナミクスに違いが生じるのか、そしてそれは何故か、という疑問に答えることが本論文で残された課題である。

謝辞

本論文の内容の一部は筆者と岡田真人先生（東京大学）または筆者と西森秀稔先生（東京工業大学）との共同研究によるものです。共同研究していただいた両先生に感謝いたします。鈴木増雄先生（東京理科大学）、Giuseppe E. Santoro 氏 (SISSA, Trieste)、久保健先生（青山学院大学）には議論を通じて有益なコメントをいただきました。ここに感謝いたします。

A 2準位系のシミュレーティッドアニーリング

図3に示されているようにエネルギー差が Δ の2つの準位があり、準位間に励起準位から測って高さ B のエネルギー障壁があるとする。この系で高温の平衡状態から温度を時間に線形に下げた時に、絶対零度で残留エネルギーがどうなるか、という問題を考える [5, 92]。

系が励起準位にいる確率を $p(t)$ とすると、 $p(t)$ が従うマスター方程式は

$$\frac{d}{dt}p(t) = e^{-(\Delta+B)/T(t)}(1-p(t)) - e^{-B/T(t)}p(t) \quad (254)$$

と書ける。時間に依存する温度は始め $t=0$ で T_0 にあり、 $t=\tau$ で絶対零度になるとする。温度スケジュールは

$$T(t) = T_0 \left(1 - \frac{t}{\tau}\right) \quad (255)$$

を仮定する。無次元化されたエネルギーギャップ $\mu = \Delta/B$ 、温度変化率 $\delta = T_0/B\tau$ を導入し、変数変換 $t \mapsto x = e^{-B/T(t)}$ を行くと、マスター方程式は

$$\delta \frac{d}{dx} \bar{p}(x) = \frac{1}{(\ln x)^2} \{-x^\mu + (1+x^\mu)\bar{p}(x)\} \quad (256)$$

となる。ただし $\bar{p}(x) \equiv p(t(x))$ とした。この方程式に対して、 $\tau \rightarrow \infty$ つまり $\delta \rightarrow 0$ の極限で漸近解析を行う。 $\bar{p}(x)$ を δ でベキ級数展開する。

$$\bar{p}(x) = c_0(x) + c_1(x)\delta + c_2(x)\delta^2 + \dots \quad (257)$$

δ の各次数で方程式 (256) が成り立つとして、係数 c_i の満たす式を次のように得る。

$$-\frac{x^\mu}{(\ln x)^2} + \frac{1+x^\mu}{(\ln x)^2} c_0(x) = 0, \quad (258)$$

$$\frac{dc_0(x)}{dx} = \frac{1+x^\mu}{(\ln x)^2} c_1(x), \quad (259)$$

$$\frac{dc_1(x)}{dx} = \frac{1+x^\mu}{(\ln x)^2} c_1(x), \quad (260)$$

...

これより各係数は求まって、

$$c_0(x) = \frac{x^\mu}{1+x^\mu}, \quad (261)$$

$$c_1(x) = \frac{(\ln x)^2}{1+x^\mu} \frac{\mu x^{\mu-1}}{(1+x^\mu)^2}, \quad (262)$$

$$\dots \quad (263)$$

結局

$$p(x) = \frac{x^\mu}{1+x^\mu} \left[1 + \delta \mu \frac{(\ln x)^2}{x(1+x^\mu)^2} + \mathcal{O}(\delta^2) \right] \quad (264)$$

となる。この展開は $x \gg \delta$ 、すなわち $T(t) \gg \frac{B}{-\ln \delta}$ で正しい。逆に言うと $x \lesssim \delta$ ではこの展開は破たんする。

$x \lesssim \delta$ の範囲における $\bar{p}(x)$ の振る舞いを調べるために、 x を δ 程度の大きさの x_0 で規格化する。 x_0 の具体的な定義は後に与える。 $X = x/x_0$ と $P(X) \equiv p(x)/x_0^\mu$ を定義する。 $P(X)$ の従う方程式は式 (256) に $P(X)$ と X の定義を代入すると

$$\frac{\delta (\ln x_0)^2}{x_0} \frac{d}{dX} P(X) = \frac{1}{\left(1 + \frac{\ln X}{\ln x_0}\right)^2} \{-X^\mu + (1+x_0^\mu X^\mu)P(X)\} \quad (265)$$

となる。ここで x_0 を $x_0 = \delta (\ln x_0)^2$ で決まる量として定義する。すると上の方程式は

$$\frac{d}{dX} P(X) = \frac{1}{\left(1 + \frac{\ln X}{\ln x_0}\right)^2} \{-X^\mu + (1+x_0^\mu X^\mu)P(X)\} \quad (266)$$

あるいは

$$-\frac{1+x_0^\mu X^\mu}{\left(1+\frac{\ln X}{\ln x_0}\right)^2}P(X) + \frac{d}{dX}P(X) = -\frac{X^\mu}{\left(1+\frac{\ln X}{\ln x_0}\right)^2} \quad (267)$$

と書ける。ここで

$$\frac{1}{F(X)} \frac{dF(X)}{dX} = -\frac{1+x_0^\mu X^\mu}{\left(1+\frac{\ln X}{\ln x_0}\right)^2} \quad (268)$$

を満たす関数 $F(X)$ を導入する。 $F(0) = 1$ を仮定してこの方程式を解くと

$$F(X) = \exp \left[-\int_0^X dX' \frac{1+x_0^\mu X'^\mu}{\left(1+\frac{\ln X'}{\ln x_0}\right)^2} \right] \quad (269)$$

となる。この $F(X)$ を使うと方程式 (267) は

$$\frac{1}{F(X)} \frac{d}{dX} [F(X)P(X)] = -\frac{X^\mu}{\left(1+\frac{\ln X}{\ln x_0}\right)^2} \quad (270)$$

となる。この方程式は容易に解くことができ、 $F(0) = 1$ に注意すると

$$F(X)P(X) = P(0) - \int_0^X dX' F(X') \frac{X'^\mu}{\left(1+\frac{\ln X'}{\ln x_0}\right)^2} \quad (271)$$

$$P(X) = F(X)^{-1} \left[P(0) - \int_0^X dX' F(X') \frac{X'^\mu}{\left(1+\frac{\ln X'}{\ln x_0}\right)^2} \right] \quad (272)$$

が得られる。

ここで $X \rightarrow \infty$ を考える。 $F(X)^{-1}$ は $X \rightarrow \infty$ で発散するので、式 (272) の $P(X)$ が発散しないためには次が成り立たないといけなない。

$$P(0) = \int_0^\infty dX F(X) \frac{X^\mu}{\left(1+\frac{\ln X}{\ln x_0}\right)^2} \quad (273)$$

$$= \int_0^\infty dX \exp \left[-\int_0^X dX' \frac{1+x_0^\mu X'^\mu}{\left(1+\frac{\ln X'}{\ln x_0}\right)^2} \right] \frac{X^\mu}{\left(1+\frac{\ln X}{\ln x_0}\right)^2}. \quad (274)$$

上式で指数関数の部分は e^{-X} より小さいので、被積分関数で $X \gg 1$ のところは積分に寄与がない。一方で $x_0 \sim \delta \ll 1$ より $|\ln x_0| \gg 1$ 、従って被積分関数の中の $\frac{\ln X}{\ln x_0}$ は無視しても構わない。従って

$$P(0) \approx \int_0^\infty dX \exp \left[-\int_0^X dX' (1+x_0^\mu X'^\mu) \right] X^\mu \quad (275)$$

$$= \int_0^\infty dX \exp \left[-\left(X + \frac{x_0^\mu}{1+\mu} X^{\mu+1} \right) \right] X^\mu \quad (276)$$

が得られる。もし $\mu \sim 1$ ならば $x_0^\mu \ll 1$ となるので

$$P(0) \approx \int_0^\infty dX e^{-X} X^\mu + \mathcal{O}(x_0^\mu) = \Gamma(1+\mu) + \mathcal{O}(x_0^\mu), \quad (277)$$

すなわち

$$p(0) \approx x_0^\mu \Gamma(1 + \mu) + \mathcal{O}(x_0^{2\mu}). \quad (278)$$

ただし $\Gamma(z)$ はガンマ関数である。もし $\mu \ll 1$ なら $1 + \mu \approx 1$ なので

$$\begin{aligned} P(0) &\approx \int_0^\infty dX X^\mu \exp(-(1 + x_0^\mu)X) + \mathcal{O}(\mu) \\ &= \frac{1}{(1 + x_0^\mu)} \Gamma(1 + \mu) + \mathcal{O}(\mu) \approx \frac{\Gamma(1)}{1 + x_0^\mu} + \mathcal{O}(\mu) \\ &= \frac{1}{1 + x_0^\mu} + \mathcal{O}(\mu), \end{aligned} \quad (279)$$

すなわち

$$p(0) \approx \frac{x_0^\mu}{1 + x_0^\mu} + \mathcal{O}(x_0^\mu \mu). \quad (280)$$

ここでこの式を $\mu \sim 1$ に外挿すると $x_0^\mu/(1 + x_0^\mu) + \mathcal{O}(x_0^\mu \mu) \approx \mathcal{O}(x_0^\mu)$ となることから、それを $\mu \sim 1$ の表式 (278) に整合させて $\mathcal{O}(x_0^\mu) = x_0^\mu + \mathcal{O}(x_0^{2\mu})$ を得る。式 (278) と (280) を足したものから $\mu \sim 1$ で整合させた x_0^μ を引いて、 μ に関して一様に成り立つ表式 [93]

$$p(0) \approx x_0^\mu \Gamma(1 + \mu) + \frac{x_0^\mu}{1 + x_0^\mu} - x_0^\mu \quad (281)$$

$$= x_0^\mu \Gamma(1 + \mu) - \frac{x_0^{2\mu}}{1 + x_0^\mu} \quad (282)$$

を得る。この式は $\mu \sim 1$ では $\mathcal{O}(x_0^{2\mu} \mu)$ 、 $\mu \ll 1$ では $\mathcal{O}(x_0^\mu \mu)$ 、つまり μ に関して一様に $\mathcal{O}(x_0^{2\mu} \mu)$ 程度の誤差を持ちうる。さて、 x_0 の定義 $x_0 = \delta(\ln x_0)^2$ を思い出すと、 $\delta \rightarrow 0$ で

$$\begin{aligned} x_0 &= \delta \left[\ln \left(\delta(\ln x_0)^2 \right) \right]^2 = \delta (\ln \delta + 2 \ln \ln x_0)^2 \\ &\approx \delta (\ln \delta)^2 \end{aligned} \quad (283)$$

と近似できるので、 $p(0)$ の $\delta \rightarrow 0$ の漸近形として

$$p(0) \approx \delta^\mu (\ln \delta)^{2\mu} \Gamma(1 + \mu) - \frac{\delta^{2\mu} (\ln \delta)^{4\mu}}{1 + \delta^\mu (\ln \delta)^{2\mu}} \quad (284)$$

が得られる。

B 1次元ランダムイジング模型のグラウバーダイナミクスと緩和時間

この節では温度は時間によらず一定とする。

1次元ランダムイジング模型

$$H = - \sum_i J_i \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (285)$$

を考える。結合定数は後で具体的に与えるが、ここではひとまず何でもよいとしておく。系のスピン状態 $(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ の時刻 t での確率分布を $p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; t)$ と書く。ただし系にあるス

ピンの数を N とする。単位時間に i 番目のスピンの σ から $-\sigma$ に変わり、他のスピンが変化しない遷移確率を $w_i(\sigma)$ と書く。 $p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; t)$ が従うマスター方程式は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; t) &= - \left(\sum_i w_i(\sigma_i) \right) p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; t) \\ &\quad + \sum_i w_i(-\sigma_i) p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N; t) \end{aligned} \quad (286)$$

と書ける。 $p_{\text{eq}}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ を平衡状態における確率分布とする。詳細つりあいの条件から

$$\begin{aligned} \frac{p_{\text{eq}}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N)}{P_{\text{eq}}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N)} &= \frac{w_i(\sigma_i)}{w_i(-\sigma_i)} = \frac{\exp[-\beta(J_{i-1}\sigma_i\sigma_{i-1} + J_i\sigma_i\sigma_{i+1})]}{\exp[\beta(J_{i-1}\sigma_i\sigma_{i-1} + J_i\sigma_i\sigma_{i+1})]} \\ &= \frac{1 - \sigma_i \tanh[\beta(J_{i-1}\sigma_{i-1} + J_i\sigma_{i+1})]}{1 + \sigma_i \tanh[\beta(J_{i-1}\sigma_{i-1} + J_i\sigma_{i+1})]} \\ &= \frac{1 - C_i^- \sigma_{i-1} \sigma_i - C_i^+ \sigma_i \sigma_{i+1}}{1 + C_i^- \sigma_{i-1} \sigma_i + C_i^+ \sigma_i \sigma_{i+1}} \end{aligned} \quad (287)$$

が成り立つ。ただし

$$C_i^- = \frac{1}{2} \left(\tanh[\beta(J_{i-1} + J_i)] + \tanh[\beta(J_{i-1} - J_i)] \right) \quad (288)$$

$$C_i^+ = \frac{1}{2} \left(\tanh[\beta(J_{i-1} + J_i)] - \tanh[\beta(J_{i-1} - J_i)] \right) \quad (289)$$

である。式 (287) より遷移確率 $w_i(\sigma_i)$ は

$$w_i(\sigma_i) = \frac{\alpha}{2} \left(1 - \frac{1}{2} C_i^- \sigma_{i-1} \sigma_i - \frac{1}{2} C_i^+ \sigma_i \sigma_{i+1} \right) \quad (290)$$

となる。因子 $\alpha/2$ は式 (287) からは定まらない比例係数である。時刻 t での i 番目のスピンの期待値（磁化）を $S_i(t)$ と書くことにする。

$$S_i(t) = \langle \sigma_i \rangle(t) = \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; t). \quad (291)$$

マスター方程式 (286) を用いると

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} S_i(t) &= \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i \frac{d}{dt} p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; t) \\ &= \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i \left[- \left(\sum_j w_j(\sigma_j) \right) p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; t) \right. \\ &\quad \left. + \sum_j w_j(-\sigma_j) p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, -\sigma_j, \dots, \sigma_N; t) \right] \\ &= \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i \sum_j \sigma_j \sum_{\sigma'_j=\pm 1} (-\sigma'_j) w_j(\sigma'_j) p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma'_j, \dots, \sigma_N; t) \\ &= -2 \sum_{\{\sigma_i\}} \sigma_i w_i(\sigma_i) p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N; t) \\ &= -\alpha \left(S_i(t) - C_i^- S_{i-1}(t) - C_i^+ S_{i+1}(t) \right), \end{aligned} \quad (292)$$

ここで α を時間の単位にとり、 αt を改めて t と書くと

$$\frac{d}{dt}S_i(t) = -S_i(t) + C_i^- S_{i-1}(t) + C_i^+ S_{i+1}(t) \quad (293)$$

が得られる。これが 1 次元ランダムイジング模型のグ라우バーダイナミクスの方程式である。

以下で文献 [91] に沿ってスピン期待値 $S_i(t)$ の緩和を議論する。

スピンの期待値をベクトル $|S(t)\rangle = [S_1(t), S_2(t), \dots, S_N(t)]^T$ を用いて表し、時間発展の行列

$$\Lambda \equiv \begin{bmatrix} 1 & -C_1^+ & & & \\ -C_2^- & 1 & -C_2^+ & & \\ & -C_3^- & 1 & -C_3^+ & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -C_{N-1}^- & 1 & -C_{N-1}^+ \\ & & & & -C_N^- & 1 \end{bmatrix} \quad (294)$$

を導入すると、方程式 (293) は

$$\frac{d}{dt}|S(t)\rangle = -\Lambda|S(t)\rangle \quad (295)$$

と書くことができる。初期条件として全てのスピンのそろっている状態 $|S(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}(1, 1, \dots, 1)^T$ を仮定する。方程式 (295) の解は $|S(t)\rangle = \int_0^t dt' e^{-\Lambda t'} |S(0)\rangle$ となる。ランダム平均を考慮すると、時刻 t における系の磁化の平均値は

$$M(t) = \langle S(0)|S(t)\rangle = \left[\langle S(0)| \int_0^t dt' e^{-\Lambda t'} |S(0)\rangle \right]_{\text{av}} \quad (296)$$

である。ここで行列 Λ の固有値 λ と右固有ベクトル $|e_R(\lambda)\rangle$ 、および左固有ベクトル $\langle e_L(\lambda)|$ を導入して、固有ベクトルの完全性 $\sum_\lambda |e_R(\lambda)\rangle \langle e_L(\lambda)| = 1$ を用いると

$$\begin{aligned} \langle S(0)| \int_0^t dt' e^{-\Lambda t'} |S(0)\rangle &= \langle S(0)| \sum_\lambda \int_0^t dt' e^{-\lambda t'} |e_R(\lambda)\rangle \langle e_L(\lambda)| S(0)\rangle \\ &= \sum_\lambda \int_0^t dt' e^{-\lambda t'} \langle S(0)|e_R(\lambda)\rangle \langle e_L(\lambda)|S(0)\rangle, \end{aligned} \quad (297)$$

従って

$$\begin{aligned} M(t) &= \left[\sum_\lambda \int_0^t dt' e^{-\lambda t'} \langle S(0)|e_R(\lambda)\rangle \langle e_L(\lambda)|S(0)\rangle \right]_{\text{av}} \\ &= \int_0^\infty d\lambda D(\lambda) e^{-\lambda t} \end{aligned} \quad (298)$$

と表せる。ただし固有値の分布関数（状態密度） $D(\lambda)$ は

$$D(\lambda)d\lambda = \left[\sum_{\lambda' \in [\lambda, \lambda+d\lambda]} \langle S(0)|e_R(\lambda')\rangle \langle e_L(\lambda')|S(0)\rangle \right]_{\text{av}} \quad (299)$$

で与えられる。

ここから結合定数 $\{J_i\}$ が次の分布に従う場合を考える。

$$P(J_i) = (1 - q)\delta(J_i) + q\delta(J_i - J), \quad 0 \leq q \leq 1, \quad J > 0. \quad (300)$$

すなわち隣り合うスピン間には確率 q で強さ J の強磁性的相互作用が働き、確率 $(1 - q)$ で相互作用が働かない。この時、系は長さの異なる独立な強磁性的のクラスターの集まりとみなせる。ただしクラスター内のスピンは一様に強さ J で相互作用している。

今、ある一つのスピンを選んだとして、それが長さ l のクラスターに属している確率は次のように求められる。スピンのまわりのボンドは $(l - 1)$ 個連続して結合定数 J を持ち、両端のボンドは切れていないといけない。そのようになる確率は $(1 - q)^2 q^{l-1}$ であり、ひとつ選んだスピンがそのクラスターにある場合の数は l である。従って求める確率は $l(1 - q)^2 q^{l-1}$ で与えられる。さて、長さ l のクラスターは高々 N/l 個存在することが許される。 l 個おきにスピンを N/l 個取るとすると、それぞれのまわりに確率 $l(1 - q)^2 q^{l-1}$ で長さ l のクラスターがあることから、長さ l のクラスターの個数の期待値は

$$\frac{N}{l} l(1 - q)^2 q^{l-1} \quad (301)$$

で与えられる。

長さ l のクラスターを一つ取り出して考えてみたい。クラスター内のスピンには $i = 1, 2, \dots, l$ のラベルが付いているとする。 $C_i^\pm$ の定義 (288)、(289) より

$$C_1^- = 0, \quad C_1^+ = \tanh \beta J \quad (302)$$

$$C_i^- = C_i^+ = \frac{1}{2} \tanh 2\beta J, \quad (i = 2, 3, \dots, l - 1) \quad (303)$$

$$C_l^- = \tanh \beta J, \quad C_l^+ = 0 \quad (304)$$

である。 $\tanh \beta J = A$ 、 $\frac{1}{2} \tanh 2\beta J = B$ とすると、クラスター内のスピンの期待値 $|S_{cl}(t)\rangle$ の時間発展は $l \times l$ の行列

$$\Lambda_{cl} \equiv \begin{bmatrix} 1 & -A & & & \\ -B & 1 & -B & & \\ & -B & 1 & -B & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -B & 1 & -B \\ & & & & -A & 1 \end{bmatrix} \quad (305)$$

により $\frac{d}{dt}|S_{cl}(t)\rangle = -\Lambda_{cl}|S_{cl}(t)\rangle$ で定まる。

行列 Λ_{cl} の固有値 λ を以下に求める。まず、 λ は次の方程式を満たす。

$$\det(\Lambda_{cl} - \lambda I) = (1 - \lambda)^2 D(l - 2) - 2AB(1 - \lambda)D(l - 3) + A^2 B^2 D(l - 4) = 0 \quad (306)$$

ここで $D(l)$ は $l \times l$ 行列の行列式で、

$$D(l) \equiv \det \begin{bmatrix} 1-\lambda & -B & & & \\ -B & 1-\lambda & -B & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -B & 1-\lambda & -B \\ & & & & -B & 1-\lambda \end{bmatrix} \quad (307)$$

である。上式を余因子展開すると

$$D(l) = (1-\lambda)D(l-1) - B^2 D(l-2) \quad (308)$$

が得られる。この式を用いると λ の方程式 (306) は

$$\{(1-\lambda)^2 - A^2\} D(l-2) + (A^2 - 2AB)(1-\lambda)D(l-3) = 0 \quad (309)$$

と変形できる。さて、漸化式 (308) から $D(l)$ は求まって、

$$D(l) = \frac{\beta^{l-1} - \alpha^{l-1}}{\beta - \alpha} D(2) - \frac{\alpha\beta(\beta^{l-2} - \alpha^{l-2})\beta - \alpha}{D} (1) \quad (310)$$

のようになる。ただし、 α と β は漸化式 (308) の特性方程式の解で

$$\alpha = \frac{1}{2} \left[(1-\lambda) - \sqrt{(1-\lambda)^2 - 4B^2} \right], \quad \beta = \frac{1}{2} \left[(1-\lambda) + \sqrt{(1-\lambda)^2 - 4B^2} \right] \quad (311)$$

である。また $D(2) = (1-\lambda)^2 - B^2$ 、 $D(1) = 1-\lambda$ である。ここで、クラスターの長さ l が無限大の時に行列 Λ_{cl} の固有値が $1 - \tanh 2\beta J \cos k$ となることから

$$\lambda = 1 - \tanh 2\beta J \cos k \quad (312)$$

とにおいて k の満たす方程式を導くことにする。まず式 (310)、(311) より

$$D(l) = \frac{1}{2^l} (\tanh 2\beta J)^l (\sin lk \cot k + \cos lk) \quad (313)$$

が得られる。この式から得られる $D(l-2)$ と $D(l-3)$ 、さらに $(1-\lambda)^2 - A^2 = \tanh^2 2\beta J \cos^2 k - \tanh^2 \beta J$ と $A^2 - 2AB = \tanh \beta J (\tanh \beta J - \tanh 2\beta J)$ を式 (309) に代入して両辺に $\sin k \coth^2 \beta J$ をかけて $\sin(l-1)k \cos^2 k$ で割って式変形すると

$$(\tanh 2\beta J \coth \beta J - 1)^2 = \tan^2 k - 2 \cot(l-1)k \tan k (\tanh 2\beta J \coth \beta J - 1) \quad (314)$$

が得られる。ここで $\tanh 2\beta J \coth \beta J - 1 = a$ と書くと

$$(a + \cot(l-1)k \tan k)^2 = \frac{\tan^2 k}{\sin^2(l-1)k}, \quad (315)$$

従って次式が得られる。

$$a + \cot(l-1)k \tan k = \frac{\tan k}{\sin(l-1)k}. \quad (316)$$

ただし、(左辺) = -(右辺) はパリティ-奇の固有ベクトルを持ち、式 (299) の状態密度に寄与しないので除外した。従って、 k は

$$a = \tan k \left(\frac{1}{\sin(l-1)k} - \cot(l-1)k \right) = \tan k \tan \frac{1}{2}(l-1)k \quad (317)$$

を満たす。以上をまとめると、行列 Λ_{cl} の固有値 λ は

$$\begin{aligned} \lambda &= 1 - \tanh 2\beta J \cos k \\ \tan k \tan \frac{1}{2}(l-1)k &= a \\ a &= \tanh 2\beta J \coth \beta J - 1 \end{aligned} \quad (318)$$

で与えられる。

次に行列 Λ_{cl} の右固有ベクトルを求める。右固有ベクトルの各成分を u_i ($i = 1, 2, \dots, l$) とすると

$$(1 - \lambda)u_1 - Au_2 = 0, \quad -Au_{l-1} + (1 - \lambda)u_l = 0 \quad (319)$$

$$-Bu_{i-1} + (1 - \lambda)u_i - Bu_{i+1} = 0, \quad (i = 2, 3, \dots, l-1) \quad (320)$$

が成り立つ。これよりまず $u_2 = \frac{1-\lambda}{A}u_1$ が得られ、 $i = 3$ から $i = l$ に対しては

$$u_i = \frac{1-\lambda}{B}u_{i-1} + u_{i-2} = 0 \quad (321)$$

が成り立つので、この漸化式の解として u_i を求め、そこに $A = \tanh \beta J$ 、 $B = \frac{1}{2} \tanh 2\beta J$ 、 $\lambda = 1 - \tanh 2\beta J \cos k$ を代入すると

$$u_i = (a \cot k \sin(i-1)k + \cos(i-1)k) u_1 \quad i = 2, 3, \dots, l \quad (322)$$

が得られる。ちなみに上式による u_{l-1} と u_l を式 (319) の式 $-Au_{l-1} + (1 - \lambda)u_l = 0$ に代入すると固有値 λ (すなわち k) が満たす式 (318) が出てくる。

左固有ベクトルも同様にして求めることができる。左固有ベクトルの各成分を v_i ($i = 1, 2, \dots, l$) と書くと

$$(1 - \lambda)v_1 - Bv_2 = 0, \quad -Av_1 + (1 - \lambda)v_2 - Bv_3 = 0 \quad (323)$$

$$-Bv_{l-2} + (1 - \lambda)v_{l-1} - Av_l = 0, \quad -Bv_{l-1} + (1 - \lambda)v_l = 0 \quad (324)$$

$$-Bv_{i-1} + (1 - \lambda)v_i - Bv_{i+1} = 0 \quad (i = 3, 4, \dots, l-2) \quad (325)$$

が成り立つ。これらの漸化式から

$$\begin{aligned} v_2 &= 2v_1 \cos k \\ v_i &= \left(\frac{2a}{a+1} \cot k \sin(i-1)k + \frac{2}{a+1} \cos(i-1)k \right) v_1 \quad (i = 3, 4, \dots, l-1) \\ v_l &= \frac{B}{1-\lambda} v_{l-1} = \left(\frac{a}{a+1} \frac{\sin(l-2)k}{\sin k} + \frac{1}{a+1} \frac{\cos(l-2)k}{\cos k} \right) v_1 \end{aligned} \quad (326)$$

が得られる。

さて、仮に長さ l のクラスターが一つだけ長さ N の系にある状況を考える。全系の時間発展行列 Λ の固有ベクトルはクラスターに対応する部分は Λ_{cl} の固有ベクトルとなり、それ以外はゼロとなる。従って

$$\langle S(0)|e_R(\lambda)\rangle\langle e_L(\lambda)|S(0)\rangle = \frac{1}{N} \frac{\left(\sum_{i=1}^l u_i\right)\left(\sum_{i=1}^l v_i\right)}{\sqrt{\sum_{i=1}^l u_i^2}\sqrt{\sum_{i=1}^l v_i^2}} \quad (327)$$

となる。三角級数の公式

$$\sum_{i=1}^l \sin ik = \frac{\sin \frac{lk}{2} \sin \frac{(l+1)k}{2}}{\sin \frac{k}{2}}, \quad \sum_{i=1}^l \cos ik = \frac{\sin \frac{lk}{2} \cos \frac{(l+1)k}{2}}{\sin \frac{k}{2}} \quad (328)$$

と式 (318) の $a \cot k = \tan \frac{(l-1)k}{2}$ を用いると、式 (322) より

$$\sum_{i=1}^l u_i = u_1 \frac{1 - (1-a)\cos k}{2\sin^2 \frac{k}{2}} \quad (329)$$

$$\sum_{i=1}^l v_i = v_1 \frac{a}{a+1} \frac{1}{\sin^2 \frac{k}{2}} \quad (330)$$

が求まる。 $0 \leq a \leq 1$ なので $\sum_{i=1}^l u_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^l v_i \geq 0$ 、従って

$$\langle S(0)|e_R(\lambda)\rangle\langle e_L(\lambda)|S(0)\rangle \geq 0 \quad (331)$$

であることがわかる。

ここで、固有値 λ が最小となる基底固有ベクトルについて考えよう。今の場合、基底固有ベクトルは Perron-Frobenius の定理から全ての成分を正にできて、従って式 (327) の値が基底固有ベクトルで最も大きくなる。一方、基底固有ベクトルに対して $(\frac{1}{l} \sum u_i)^2 / \frac{1}{l} \sum u_i^2$ や $(\frac{1}{l} \sum v_i)^2 / \frac{1}{l} \sum v_i^2$ はクラスターサイズ l が大きくなると小さくなる。そこで $l \rightarrow \infty$ でこれらの値を求めて、基底固有ベクトルに対する式 (327) を下から押える。 u_i や v_i に含まれる k は式 (318) より $\tan k \tan \frac{(l-1)k}{2} = a$ の解である。 a は k によらない $0 \leq a \leq 1$ の数であり、 $\lambda = 1 - \tanh 2\beta J \cos k$ を最小にする k はゼロに最も近い解である。 $l \gg 1$ とすると解は $0 < k < \frac{\pi}{l-1}$ の範囲にあるので、 $\tan k \approx k$ とすると

$$\tan \frac{(l-1)k}{2} \approx \frac{a}{k} \gg 1, \quad (332)$$

従って解は $\frac{(l-1)k}{2} \approx \frac{\pi}{2}$ すなわち $k \approx \frac{\pi}{l}$ である。これを上で求めた $\sum u_i$ 、 $\sum v_i$ に代入すると

$$\sum_{i=1}^l u_i \approx u_1 \frac{2al^2}{\pi^2}, \quad \sum_{i=1}^l v_i \approx v_1 \frac{a}{a+1} \frac{4l^2}{\pi^2} \quad (333)$$

が得られる。 $\sum u_i^2$ 、 $\sum v_i^2$ については

$$\sum_{i=1}^l u_i^2 = u_1^2 \left(1 + a^2 \cot^2 k \sum_{i=2}^l \sin^2(i-1)k + a \cot k \sum_{i=2}^l \sin 2(i-1)k + \sum_{i=2}^l \cos^2(i-1)k \right) \quad (334)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^l v_i^2 &= v_1^2 \left[1 + 4 \cos^2 k + \frac{1}{(a+1)^2} \sum_{i=3}^{l-1} (2a \cot k \sin(i-1)k + 2 \cos(i-1)k)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{(a+1)^2} \left(a \cot k \frac{\sin(l-2)k}{\sin k} + \frac{\cos(l-2)k}{\cos k} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (335)$$

を三角級数の公式を用いて変形し、 $k \approx \frac{\pi}{l}$ を代入して主要項だけを取り出すと

$$\sum_{i=1}^l u_i^2 \approx u_1^2 \frac{a^2 l^3}{2\pi^2}, \quad \sum_{i=1}^l v_i^2 \approx v_1^2 \frac{a^2}{(a+1)^2} \frac{2l^3}{\pi^2} \quad (336)$$

が得られる。これより

$$\frac{(\frac{1}{l} \sum_{i=1}^l u_i)(\frac{1}{l} \sum_{i=1}^l v_i)}{\sqrt{\frac{1}{l} \sum_{i=1}^l u_i^2} \sqrt{\frac{1}{l} \sum_{i=1}^l v_i^2}} \rightarrow \frac{8}{\pi^2} \quad (l \rightarrow \infty) \quad (337)$$

すなわち式 (327) は

$$\langle S(0) | e_R(\lambda) \rangle \langle L(\lambda) | S(0) \rangle \geq \frac{l}{N} \frac{8}{\pi^2} \quad (338)$$

で下から押えられる。ところで、クラスターの時間発展行列 Λ_{cl} の固有値は式 (312) より

$$\lambda_0 = 1 - \tanh 2\beta J \quad (339)$$

により下から押えられる。従って $\lambda < \lambda_0$ に対して状態密度は $D(\lambda) = 0$ である。 $\lambda > \lambda_0$ に対しては、ある長さの限界 $l_c(\lambda)$ があって $l < l_c(\lambda)$ であるクラスターは λ より小さい固有値を持たない。その $l_c(\lambda)$ は式 (318) から

$$l_c(\lambda) = 1 + \left\lceil \frac{2}{k} \tan^{-1}(a \cot k) \right\rceil \quad (340)$$

で与えられる。ただし λ と k は式 (318) 上の式の関係にあることに注意する。上式の $\lceil \dots \rceil$ は ... より大きくて最も ... に近い整数を表す。 $l \geq l_c(\lambda)$ のクラスターは少なくとも 1 つは λ と同じか λ より小さい固有値を持つ。それに対応する固有ベクトルは式 (338) より、次式で定義される状態数

$$I(\lambda) \equiv \int_{\lambda_0}^{\lambda} D(\lambda) d\lambda \quad (341)$$

に少なくとも $\frac{l}{N} \frac{8}{\pi^2}$ の寄与を持つ。今、長さ l のクラスターは式 (301) より平均で $\frac{N}{l} l(1-q)^2 q^{l-1}$ 個だけ系にある。従って状態数は

$$\begin{aligned} I(\lambda) &\geq \sum_{l=l_c(\lambda)}^{\infty} \frac{8}{\pi^2} \frac{l}{N} \frac{N}{l} l(1-q)^2 q^{l-1} \\ &= \frac{8}{\pi^2} (1-q)^2 \sum_{l=l_c(\lambda)}^{\infty} l q^{l-1} = \frac{8}{\pi^2} q^{l_c(\lambda)-1} (1 + (l_c(\lambda) - 1)(1-q)) \\ &\geq \frac{8}{\pi^2} q^{l_c(\lambda)-1} \end{aligned} \quad (342)$$

で下から押えられる。 λ が上から λ_0 に近づくと

$$\lambda - \lambda_0 \approx \frac{1}{2} k^2 \tanh 2\beta J \quad (343)$$

となるので

$$l_c(\lambda) \approx \frac{2\pi}{k} \approx \frac{\pi}{\sqrt{2}} \sqrt{\tanh 2\beta J} (\lambda - \lambda_0)^{-1/2}, \quad (344)$$

従って

$$I(\lambda) \geq \frac{8}{\pi^2} \exp \left[-C(\lambda - \lambda_0)^{-1/2} \right] \quad (345)$$

$$C = \ln \frac{1}{q} \cdot \frac{\pi}{\sqrt{2}} \sqrt{\tanh 2\beta J} \equiv \epsilon \frac{\pi}{\sqrt{2}} > 0 \quad (346)$$

が得られる。ただし $\epsilon = \ln \frac{1}{q} \sqrt{\tanh 2\beta J}$ である。

もし $l \gg l_c(\lambda)$ だとすると、長さ l のクラスターはたくさんの λ より小さい固有値を持つ。そのそれぞれは式 (331) より $I(\lambda)$ に正の寄与を与える。完全性よりクラスターの状態の寄与の総和は多くとも $\frac{1}{N}$ である。長さ l のクラスターの数平均が式 (301) で与えられることを用いると $I(\lambda)$ は次のように上から押えられる。

$$\begin{aligned} I(\lambda) &\leq \sum_{l=l_c(\lambda)}^{\infty} \frac{l}{N} \frac{N}{l} l(1-q)^2 q^{l-1} \\ &= q^{l_c(\lambda)-1} (l_c(\lambda) - (l_c(\lambda) - 1)q) \\ &\leq l_c(\lambda) q^{l_c(\lambda)-1} \\ &\approx \frac{\pi}{\sqrt{2}} \sqrt{\tanh 2\beta J} (\lambda - \lambda_0)^{-1/2} \exp \left[-C(\lambda - \lambda_0)^{-1/2} \right] \end{aligned} \quad (347)$$

式 (338) と (347) で評価された上限と下限から、 $\lambda \approx \lambda_0$ における $I(\lambda)$ の漸近的挙動が

$$I(\lambda) \approx F(\lambda) \exp \left(-\frac{2\epsilon}{k} \tan^{-1} \frac{a}{k} \right) \quad (348)$$

となることがわかる。これより状態密度が

$$D(\lambda) \approx G(\lambda) \exp \left(-\frac{2\epsilon}{k} \tan^{-1} \frac{a}{k} \right) \quad \lambda \approx \lambda_0 \quad (349)$$

のように書けることが結論づけられる。ここで $F(\lambda)$ と $G(\lambda)$ は指数関数 $e^{-1/\sqrt{\lambda-\lambda_0}}$ に比べて穏やかな関数である。以下の議論にとって重要ではない。

ここから式 (298) により磁化の時間発展を求めていく。 t が大きい時、鞍点評価による近似が有効であるから

$$\ln M(t) \approx \max_{\lambda_0 \leq \lambda \leq \infty} [-\lambda t + \ln D(\lambda)] \quad (350)$$

としてよい。ここで $M(t)$ から $e^{-\lambda_0 t}$ で減衰する部分を取り出し、

$$M(t) = e^{-\lambda_0 t} \Phi(t) \quad (351)$$

とする。また、 λ が λ_0 に近い時、すなわち k が小さい時の近似式

$$\lambda \approx 1 - \tanh 2\beta J + \tanh 2\beta J \frac{1}{2} k^2 = \lambda_0 + \frac{1}{2} k^2 \tanh 2\beta J \quad (352)$$

を用いる。すると式 (350) は次のように書き換えられる。

$$\ln \Phi(t) \approx \max_k \left[-\frac{1}{2}(\tanh 2\beta J)tk^2 - \frac{2\epsilon}{k} \tan^{-1} \frac{a}{k} \right] \quad (353)$$

ただし、 $D(\lambda)$ の主要でない λ 依存性 (式 (349) の $G(\lambda)$) は無視した。変数変換 $\bar{k} \equiv k/a$ 、 $\bar{t} \equiv (a^3/\epsilon) \tanh 2\beta Jt$ を行くと上式は

$$\ln \Phi(t) \approx -\frac{\epsilon}{a} \min_{\bar{k}} \left[\frac{1}{2}\bar{t}\bar{k}^2 + \frac{2}{\bar{k}} \tan^{-1} \frac{1}{\bar{k}} \right] \quad (354)$$

となる。 $\bar{t} \gg 1$ の時、上式は $\bar{k} \ll 1$ で最小化されるので $(2/\bar{k}) \tan^{-1}(1/\bar{k}) \approx \pi/\bar{k}$ と近似すると

$$\min_{\bar{k}} \left[\frac{1}{2}\bar{t}\bar{k}^2 + \frac{2}{\bar{k}} \tan^{-1} \frac{1}{\bar{k}} \right] \approx \min_{\bar{k}} \left[\frac{1}{2}\bar{t}\bar{k}^2 + \frac{\pi}{\bar{k}} \right] = \frac{3}{2} (\pi^2 \bar{t})^{1/3} \quad (355)$$

が得られる。従って磁化の時間発展は $t \rightarrow \infty$ で漸近的に

$$M(t) \approx \exp \left[-\lambda_0 t - \frac{3\epsilon}{2a} \left(\frac{\pi^2 a^3}{\epsilon} \tanh 2\beta J \right)^{1/3} t^{1/3} \right] \quad (356)$$

$$\approx \exp(-\lambda_0 t) \quad (357)$$

となる。この式から、緩和時間は $t \rightarrow \infty$ で

$$\tau_R \equiv - \left(\frac{\ln M(t)}{t} \right)^{-1} = \frac{1}{\lambda_0} = \frac{1}{1 - \tanh 2\beta J} \quad (358)$$

となることがわかる。

これより結合定数 J_i が別の分布に従う場合を考える。以下の議論で、次の強磁性不等式を証明抜きで用いる。

イジング模型 $H = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j$ を考える。結合定数は $J_{ij} \geq 0$ で、強磁性的であるとする。 J_{ij} の一様性は仮定せず、ランダムでも構わない。次元は特に指定しない。時間発展は Glauber の方程式を仮定する。サイズは有限でも熱力学極限でも構わない。初期条件として全てのスピンの上向きに揃っていることを仮定する。この時、すべての時刻 t 、すべてのサイト i, j でスピンの期待値 $S_i(t) = \langle \sigma_i \rangle(t)$ は J_{ij} の単調非減少関数である。

上の文章が意味するところは、強磁性の結合が強くなるとスピンの期待値が小さくなることはありえない、というものである。それはもっともなことであるが、今のところは予想にとどまっている。以下、 J_i の分布として、一様分布

$$P(J_i) = \begin{cases} 1 & J_i \in [0, 1] \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases} \quad (359)$$

を考える。

全てのボンドの結合定数を1まで増加させることを考える。すると全てのボンドについて $J_i = 1$ であるイジング模型の磁化は $t \rightarrow \infty$ で $e^{-\lambda_1 t}$ で減衰する。ここで $\lambda_1 = 1 - \tanh 2\beta$ である。強磁性不等式より、元のランダムな系の磁化 $M(t)$ は不等式

$$M(t) \leq \exp(-\lambda_1 t) \quad (360)$$

を満たす。

次に適当な $0 \leq J^* \leq 1$ を満たす J^* を選ぶ。 $J_i < J^*$ であるボンドは $J'_i = 0$ とし、 $J_i \geq J^*$ であるボンドは $J'_i = J^*$ として $\{J_i\}$ を $\{J'_i\}$ で置き換えた新しい系を作る。この系はまさに上で議論した式 (300) の系に他ならない。したがって上の結果 (式 (357)) よりこの系の磁化 $M'(t)$ は

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\ln M'(t)}{t} = -(1 - \tanh 2\beta J^*) = -\lambda^* \quad (361)$$

となる。ここで強磁性不等式より

$$M(t) \geq M'(t) \rightarrow e^{-\lambda^* t} \quad (362)$$

が成り立つ。ところで、 J^* はいくらでも1に近い値に選んでも構わない。 $J^* \rightarrow 1$ とすると $\lambda^* \rightarrow \lambda_1$ となる。この時、式 (362) は

$$M(t) \geq e^{-\lambda_1 t} \quad (363)$$

となる。この式と式 (360) を合わせると、 $t \rightarrow \infty$ で

$$M(t) = e^{-\lambda_1 t} \quad (364)$$

が導かれる。従って J_i が式 (359) の分布の時、緩和時間は

$$\tau_R = \frac{1}{\lambda_1} = \frac{1}{1 - \tanh 2\beta} \quad (365)$$

となる。

参考文献

- [1] M. Mezard, G. Parisi, and M. Virasoro, *Spin Glass Theory and Beyond* (World Scientific 1987).
- [2] 西森秀稔, 「スピングラス理論と情報統計力学」, 岩波書店 (1999).
- [3] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, Jr., and M. P. Vecchi, *Science* **220** 671 (1983).
- [4] S. Geman and D. Geman, *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* **6**, 721 (1984).
- [5] D. A. Huse and D. S. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 2203 (1986).

- [6] M. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University press, 2000).
- [7] P. W. Shor, Proc. 35th Ann. Symp. on Foundations of Computer Science, IEEE Computer Society, 124 (1994).
- [8] A. B. Finnila, M. A. Gomez, C. Sebenik, C. Stenson, and J. D. Doll, Chem. Phys. Lett. **219** 343 (1994).
- [9] T. Kadowaki and H. Nishimori, Phys. Rev. E **58**, 5355 (1998).
- [10] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, and M. Sipser, e-print arXiv:quant-ph/0001106.
- [11] *Quantum Annealing and Related Optimization Methods*, ed. by A. Das and B. K. Chakrabarti (Springer, Heidelberg, 2005).
- [12] G. E. Santoro and E. Tosatti, J. Phys. A **39**, R393 (2006).
- [13] A. Das and B. K. Chakrabarti, Rev. Mod. Phys., in press, arXiv: 0801.2193 [quant-ph].
- [14] B. Apolloni, N. Cesa-Bianchi, D. de Falco, in *Stochastic Processes, Physics and Geometry*, ed. by S. Albeverio, G. Casati, U. Cattaneo, D. Merlini, and R. Moresi (World Scientific 1988) ; B. Apolloni, C. Carvalho, and D. de Falco, Stochastic Processes and their Applications **33** 233 (1989).
- [15] 田中和之, 堀口剛, 電子情報通信学会論文誌 (A) J80-A, 2117 (1997); K. Tanaka and T. Horiguchi, Electron. Commun. Jpn., Part 3 **83**, 84 (2000).
- [16] S. Suzuki and M. Okada, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 1649 (2005).
- [17] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
- [18] T. Caneva, R. Fazio, and G. E. Santoro, Phys. Rev. B **76**, 144427 (2007).
- [19] J. Dziarmaga, Phys. Rev. B **74**, 064416 (2006).
- [20] S. Suzuki, in preparation.
- [21] R. Monasson and R. Zecchina, Phys. Rev. E **56**, 1357 (1997).
- [22] R. Monasson, R. Zecchina, S. Kirkpatrick, B. Selman, and L. Troyansky, Nature **400**, 133 (1999).
- [23] M. Mézard, G. Parisi, and R. Zecchina, Science **297**, 812 (2002).
- [24] M. Mézard and R. Zecchina, Phys. Rev. E **66**, 056126 (2002).

- [25] J. J. Hopfield and D. W. Tank, *Science* **233**, 625 (1986).
- [26] S. F. Edwards and P. W. Anderson, *J. Phys. F* **5**, 965 (1975).
- [27] D. Sherrington and S. Kirkpatrick, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1792 (1975).
- [28] M. Alava, P. Duxbury, C. Moukarzel, and H. Rieger, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed. by C. Domb and J. L. Lobowitz (Academic, SanDiego, 2001), Vol. 18.
- [29] Spin Glass Server at http://www.informatik.uni-koeln.de/lis_juenger/research/sgs/sgs.html.
- [30] F. Barahona, *J. Phys. A* **15**, 3241 (1982).
- [31] S. Cook, in *Proceedings fo the 3rd Annual ACM Symposium on Theory of Computing* (ACM, New York, 1971), p. 151.
- [32] M. R. Garey and D. S. Johnson, *Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness* (Freeman, San Francisco, 1979).
- [33] R. D. Somma, C. D. Batista, and G. Ortiz, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 030603 (2007).
- [34] S. Shinomoto and Y. Kabashima, *J. Phys. A* **24**, L141 (1991).
- [35] S. Suzuki and H. Nishimori, *Phys. Rev. E* **75**, 051112 (2007).
- [36] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, J. Lapan, A. Lundgren, and D. Preda, *Science* **292**, 472 (2001).
- [37] V. N. Smelyanskiy, U. V. Toussaint, and D. A. Timucin, e-print arXiv:quant-ph/0112143.
- [38] T. Hog, *Phys. Rev. A* **67**, 022314 (2003).
- [39] M. Žnidarič, *Phys. Rev. A* **71**, 062305 (2005).
- [40] D-Wave Systems Inc., <http://www.dwavesys.com/>.
- [41] <http://www.sciam.com/article.cfm?id=first-commercial-quantum-computer>.
- [42] M. Steffen, W. van Dam, T. Hogg, G. Breyta, and I. Chuang, *Phys. Rev. Lett.*, **90**, 67903 (2003).
- [43] S. H. W. van der Ploeg, A. Izmailkov, M. Grajcar, U. Hübner, S. Linzen, S. Uchaikin, Th. Wagner, A. Yu. Smirnov, A. Maassen van den Brink, M. H. S. Amin, A. M. Zagorskin, E. Il'ichev, and H.-G. Meyer, e-print arXiv:cond-mat/0702580.
- [44] S. R. White and A. E. Feiguin, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 076401 (2004).

- [45] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992); Phys. Rev. B **48**, 10345 (1992).
- [46] F. Verstraete, M. M. Wolf, D. Perez-Garcia, and J. I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **96**, 220601 (2006).
- [47] N. Schuch, M. Wolf, F. Verstraete, and J. I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **100**, 040501 (2008)
- [48] S. Suzuki and M. Okada, Interdisciplinary Information Sciences **13**, 49 (2007).
- [49] J. Rodoriguez-Laguna, J. Stat. Mech., P05008 (2007).
- [50] M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **56**, 1454 (1976) ; *Quantum Monte Carlo Methods in Condensed Matter Physics*, ed. by M. Suzuki (World Scientific, 1993).
- [51] 大貫義郎, 鈴木増雄, 柏太郎, 「経路積分の方法」, 岩波書店 (1992).
- [52] S. Morita and H. Nishimori, J. Phys. A **39**, 13903 (2006).
- [53] T. Kadowaki, Thesis, Tokyo Institute of Technology, e-print arXiv:quant-ph/0205020.
- [54] G. E. Santoro, R. Martoňák, E. Tosatti, and R. Car, Science **295**, 2427 (2002).
- [55] R. Martoňák, G. E. Santoro, and E. Tosatti, Phys. Rev. B **66**, 094203 (2002).
- [56] R. Martoňák, G. E. Santoro, and E. Tosatti, Phys. Rev. E **70**, 057701 (2004).
- [57] <http://www.iwr.uni-heidelberg.de/groups/comopt/software/TSPLIB95>.
- [58] M. Sarjala, V. Tetäjä, and M. Alava, J. Stat. Mech.: Theory Exp., 1008 (2006).
- [59] D. A. Battaglia, G. E. Santoro, and E. Tosatti, Phys. Rev. E **71**, 066707 (2005).
- [60] Y-H Lee and B. J. Berne, J. Phys. Chem. A **104**, 87 (2000); Ann. Phys. (Leipzig) **9-10**, 668 2000; J. Phys. Chem. A **105**, 459 (2001).
- [61] A. Das, B. K. Chakrabarti, and R. B. Stinchcombe, Phys. Rev. E **72**, 026701 (2005).
- [62] J. Brooke, D. Bitko, T. F. Rosenbaum, and G. Aeppli, Science **284**, 779 (1999).
- [63] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, Vol. 2 (North-Holland, Amsterdam, 1962).
- [64] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics : non-relativistic theory*, 2nd ed. (Pergamon Press, Oxford, 1965).
- [65] C. Zener, Proc. Roy. Soc. London Ser. A **137**, 696 (1932).
- [66] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products* seventh edition, ed. by A. Jeffrey and D. Zwillinger (Academic Press, 2007).

- [67] T. W. B. Kibble, J. Phys. A **9**, 1387 (1976) ; Phys. Rep. **67**, 183 (1980).
- [68] W. H. Zurek, Nature (London) **317**, 505 (1985).
- [69] P. Laguna and W. H. Zurek, Phys. Rev. Lett. **78**, 2519 (1996).
- [70] W. H. Zurek, U. Dorner, and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **95**, 105701 (2005).
- [71] J. Dziarmaga, Phys. Rev. Lett. **95**, 245701 (2005).
- [72] 上坂吉則, 「ニューロコンピューティングの数学的基礎」, 近代科学社 (1993).
- [73] S. Morita, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 104001 (2007).
- [74] D. S. Fisher, Phys. Rev. B **51**, 6411 (1995).
- [75] D. S. Fisher and A. P. Young, Phys. Rev. B **58**, 9131 (1998).
- [76] D. Bitko, T. F. Rosenbaum, and G. Aeppli, Phys. Rev. Lett. **77**, 940 (1996).
- [77] H. Rieger and A. P. Young, Phys. Rev. Lett. **72**, 4141 (1994).
- [78] S. Knysh and V. N. Smelyanskiy, arXiv: cond-mat/0602257.
- [79] C. Ancona-Torres, D. M. Silevitch, G. Aeppli, and T. F. Rosenbaum, arXiv: 0801.2181 [cond-mat.dis-nn].
- [80] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev, Phys. Rev. Lett. **90**, 227902 (2003).
- [81] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, and V. Vedral, to be published in Rev. Mod. Phys; arXiv:quant-ph/0703044.
- [82] L. Cincio, J. Dziarmaga, M. M. Rams, and W. Zurek, Phys. Rev. A **75**, 052321 (2007).
- [83] V. Mukherjee, U. Divakaran, A. Dutta, and D. Sen, Phys. Rev. B **76**, 174303 (2007).
- [84] K. Sengupta, D. Sen, and S. Mondal, Phys. Rev. Lett. **100**, 077204 (2008).
- [85] F. Pellegrini, S. Montangero, G. E. Santoro, and R. Fazio, arXiv: 0801.4475 [cond-mat.other].
- [86] D. Aharonov, W. van Dam, J. Kempe, Z. Landau, S. Lloyd, and O. Regev, in *Proceedings of the 45th Annual IEEE Symposium of Foundations of Computer Science (FOCS '04)*, P. 42 (2004) ; quant-ph/0405098.
- [87] R. D. Somma, S. Boixo, and H. Barnum, arXiv:0712.1008 [quant-ph].
- [88] W. van Dam, M. Mosca, and U. Vazirani, arXiv: quant-ph/0206003.

- [89] N. Kawashima and K. Harada, J. Phys. Soc. Jpn., **73** 1379 (2004).
- [90] R. J. Glauber, J. Math. Phys. **4**, 294 (1963).
- [91] D. Dhar and M. Barma, J. Stat. Phys. **22**, 259 (1980).
- [92] S. A. Langer, A. T. Dorsey, and J. P. Sethna, Phys. Rev. B **40**, 345 (1989).
- [93] C. M. Bender and S. A. Orszag, *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers* (McGraw-Hill, New York, 1978).