イジングモデルの基底エネルギー探索の方法

鴨下正彦

2021 年 10 月 9 日

量子アニーリングを行うデバイス (以下アニーラーと表記) がどのようにして，イジングモデルの基底状態を求めることができるかについて，物理学的な視点からまとめる．アニーラーは特別なアルゴリズムを用意することなく，量子力学 (断熱定理) により自発的に基底エネルギーの探索を行っている．

まず，横磁場イジングモデルを用いてどのように基底状態を探索しているかを説明した後，その議論で必要な断熱定理について説明する．その後，相転移といったアニーラーが考慮しなければいけない制約についても触れる．

1 横磁場イジングモデルと量子アニーリング

量子アニーリングでは，イジングハミルトニアンにおける横の磁場の項が量子力学的な探索に大きな役割を持つ．

横磁場イジングハミルトニアンは次式で表される．

$$\hat{H}(t) = -\sum_{i,j} J_{ij}\sigma_z^i\sigma_z^j - \Gamma(t)\sum_i \sigma_x^i \qquad (1.1)$$
$$where \quad \Gamma > 0$$

ただし，$\Gamma > 0$ である．Γ は外部から制御できる横磁場の大きさを表すパラメータである．なので，$\Gamma > 0$ となるように x の方向を見めることができる．

$\Gamma(t=0) = \infty, \Gamma(t=\infty) = 0$ であるとする．$t=0$ のとき，ハミルトニアンは，

$$\hat{H}(0) = \Gamma(t)\sum_i \sigma_x^i \qquad (1.2)$$

となる．このときの基底状態 $|\psi_0\rangle$ は，σ_x^i の固有値 1 の固有ベクトル $|+\rangle$ のテンソル積となる．

$$|\psi_0\rangle = \otimes_{i=1}^N |+\rangle_i \qquad (1.3)$$

この状態から，$\Gamma(t)$ をゆっくり時間発展させにすると，量子力学の断熱定理 (式 (2.1) を参照) から各瞬間の状態 $\psi(t)$ は，各瞬間の定常状態のシュレーディンガー方程式の基底状態 $\psi_G(t)$ に十分に近い．

$$\hat{H}(t)\psi_G(t) = E(t)\psi_G(t) \qquad (1.4)$$
$$\psi(t) \sim \psi_G(t) \quad (\langle\psi(t)|\psi_G(t)\rangle \sim 1)$$

$\Gamma(t)$ をゆっくり変化させ，$\Gamma = 0$ とすれば，$\hat{H}(t) = -\sum_{i,j} J_{ij}\sigma_z^i\sigma_z^j$ の基底状態を，特別なアルゴリズムを用いず，自然を記述するシュレーディンガー方程式を制御するだけで求めることができる．このようにして量子アニーリングは，横磁場の強さを適切に制御することで自動的に解を探索し，組み合わせ最適化問題を解くことができる．

個人的な疑問

一般的なイジングハミルトニアン:

$$-\sum_{i,j} J_{ij}\sigma_z^i\sigma_z^j - \sum_i J_i\sigma_z^i$$

も同様の議論で最適化できるのだろうか？

有限時間での探索

実際には無限に時間を取れないので，予め決めた時刻 τ で横磁場を切って，そのときに得られた状態が最適な状態であるとする．

2　断熱定理

$t = 0$ で基底状態 $|0(t=0)\rangle$ から出発したとき，時刻 t で系が励起状態 $|j(t)\rangle$ に存在する確率は，次の関係式が満たされるとき十分に小さい．

$$\frac{1}{\Delta_j(t)^2}\left|\left\langle j(t)\left|\dot{\hat{H}}\right|0(t)\right\rangle\right| << 1 \tag{2.1}$$

ただし，$\Delta_j(t)$ は基底状態と励起状態のエネルギー差である．断熱定理は，系の時間変化 $\dot{\hat{H}}$ が十分小さいとき，系を時間発展することで基底状態から励起状態に遷移する確率は小さく，状態は各瞬間の基底状態近傍であることを主張している．

証明は後日．今勉強中．

量子アニーリングでは，自明な基底状態から出発し，断熱定理が成り立つくらいゆっくり系を変化させることで，十分に高い確率でイジングモデルの基底状態を求めている．

3　相転移

異なる相の状態に変化することを相転移と呼ぶ．相転移を論じるために，磁化と呼ばれる秩序変数 m を導入する．

$$m \equiv \frac{1}{N}\sum_i \sigma_i \tag{3.1}$$

初期の状態は，考えられる全ての 2^N の状態が等しい確率で重ね合わされている．そのため初期状態は，$m = 0$ である．このような状態は**量子常磁性相**と呼ばれる．しかし，最終的に得られる状態は，$m \neq 0$ である．このような状態は**秩序相**と呼ばれる．

量子常磁性相から秩序相への変化する過程は相転移の 1 つである．相転移の際は，m が不連続に変化する**一次転移**または連続的に変化する**二次転移**が起こり，系が急激に変化する．また基底状態と励起状態のエネルギー差が小さくなることが知られている．そのため，**相転移が起こる付近では特に慎重に外部パラメータ Γ を変えていく必要がある．**

量子アニーリングの成功するかどうかは，相転移の存在と相転移の性質 (一次転移か二次転移かなど) に大きく左右され，その解析には統計力学が用いられる．

相転移の例

一次元の横磁場イジングモデルと，p-spin ハミルトニアンの m を実際に計算して，一次転移や二次転移を議論することができる．一次元の横磁場イジングモデルや 2-spin ハミルトニアンでは二次転移が起こり，p-spin ハミルトニアン ($p \geq 3$) では一次転移が起こることを示すことができる．

今後の自分のやることリスト

1. 一般的な (一体相互作用を持つ) イジングモデルをアニーラーによって最適化する方法が同様の議論で行えるかを確認する．
2. 断熱定理の証明
3. 一次相転移と二次相転移について，統計力学と量子力学を用いて導出する．
4. アニーラーは，古典コンピュータ上でシミュレーションすることができる．その実装を行ってみる．また，ゲート方式でもシミュレーションできることが知られており，それについても見ていく．

参考文献

[1] 西森，大関著，量子アニーリングの基礎 (4 章，5 章)