量子アニーリングにおける量子効果

東京工業大学 理学院 物理学系 須佐 友紀 Yuki Susa Department of Physics, School of Science, Tokyo Institute of Technology

概要

本稿では、non-stoquastic ハミルトニアンの下での量子アニーリングでは量子効果が伴って いるケースがあることを解説をする。non-stoquastic ハミルトニアンの例として無限レンジ強 磁性 p 体相互作用模型に反強磁性相互作用を加えたものをここでは取り上げる。この例を通じ て量子効果の有無が量子アニーリングの時間的効率性と関係している可能性について触れる。

1 はじめに

量子アニーリングとは、巡回セールスマン問題に代表されるような「組み合わせ最適化問題」 を量子効果を利用して解くための計算手法である [1-3]。組み合わせ最適化問題はイジングハミル トニアンの基底状態を探索する問題と対応しており、量子アニーリングでは自明な基底状態を与 えるハミルトニアンから目的のイジングハミルトニアンへと基底状態を保ちながら断熱変化させ ることで最適解を得る(故に断熱量子計算と呼ばれることもある)。2011 年にカナダの D-Wave Systems 社が量子アニーリングを実行出来る装置を発表して以来大きな注目を集めている [4]。

組み合わせ最適化問題は NP 困難に分類され、一般的な古典のアルゴリズムでは解を得るまで に非常に長い時間が必要である [5,6]。量子アニーリングが完了するまでに必要な時間は、アニー リング中に起こる量子相転移の次数に着目することで大凡見積もることが可能である。断熱定理 に従うと、量子アニーリングを完了するのに必要な時間は基底状態と第一励起状態とのエネルギー ギャップの二乗に反比例していることがわかる。エネルギーギャップは量子相転移の次数と関連 しており、一次相転移の場合はスピン数 N に対して指数関数的に減少し (e^{-N}) 、二次相転移で は冪で減少する $(N^{-a}(a > 0))$ ことが経験則より知られている。よって一次相転移が起こるよう な場合には、基底状態を得るまでに指数関数時間が必要となるため、量子アニーリングは非効率 な手段となる。一方で二次相転移であれば多項式時間程度で完了するため、量子アニーリングは 効率的な手段となり得る。一次相転移が起こる例として、無限レンジ強磁性 p 体相互作用模型が 挙げられる [7]。この模型では量子アニーリングが完了するまでに指数関数的な時間が必要となる が、ハミルトニアンに新たに「反強磁性相互作用」を加える事で一次相転移を二次相転移に変え ることができると証明されている [8,9]。

ここで文献 [10] で導入された"stoquastic" ハミルトニアンという概念について触れておく。 stoquastic ハミルトニアンとは非対角成分がすべて非正な実数で構成されているようなハミルト ニアンであり、この条件を満たさないようなハミルトニアンを non-stoquastic ハミルトニアン と呼ぶ¹。non-stoquastic ハミルトニアンは一般的に負符号問題により量子モンテカルロでシミュ

¹ハミルトニアンによっては基底変換により stoquastic から non-stoquastic に変化させること(あるいはその逆) は可能であるが、本稿では量子アニーリングの文脈に合わせるためスピン-z 基底に限定して議論を進める。

レートが困難であることが知られている。無限レンジ強磁性 p 体相互作用模型の例では、反強磁 性相互作用を加える事で non-stoquastic ハミルトニアンに変化しており、効率的に量子アニーリ ングが実行できるようになる [11]。他にも、non-stoquastic ハミルトニアンの下では量子アニー リングが効率的であることが示された例があり [12–14]、古典的にシミュレート出来ないことから non-stoquastic ハミルトニアンと量子アニーリングの効率向上の背景には量子効果があるのでは ないかと考えられる。

そこで本稿では例として無限レンジ強磁性 p 体相互作用模型に反強磁性相互作用を加えたもの を取り上げ、non-stoquastic ハミルトニアンの下での量子アニーリング中に量子効果が生まれて いることを示す。まずは文献 [15] での手法と同様に、半古典近似でのスピンコヒーレント状態と 数値的に計算される厳密な基底状態とのトレースノルム距離を計算する。これは量子アニーリン グの過程がどの程度古典的に記述出来るかの評価基準になる。また、量子エンタングルメントの 測度であるコンカレンスの計算を数値的に行う [16]。なお本稿の内容は文献 [17] から抜粋したも のである。

2 量子アニーリングにおけるハニルトニアン

ここでは量子アニーリングにおいて取り扱われるハミルトニアンに関して述べる。一般的に量 子アニーリングでのハミルトニアンは以下のように記述される。

$$\hat{H}(t) = (t/\tau)\hat{H}_0 + (1 - t/\tau)\hat{H}_i$$
(1)

ここで $\hat{H}_i \ge \hat{H}_0$ はそれぞれ初期、目的のハミルトニアンである。 τ は量子アニーリングが完了するまでに必要な時間で、t は 0 から τ までの時間パラメータである。本稿では記述上の便宜のため無次元化した時間パラメータ $s := t/\tau$ を以降導入する。通常、量子アニーリングにおいて初期ハミルトニアンは横磁場

$$\hat{H}_i = \hat{V}_{\rm TF} := -\sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^x \tag{2}$$

が採用される。 $\hat{\sigma}_{i}^{x} := |0\rangle_{i}\langle 1| - |1\rangle_{i}\langle 0|$ はパウリ行列の x 成分であり、 V_{TF} の基底状態は $\otimes_{i=1}^{N}(|0\rangle_{i} + |1\rangle_{i}\rangle/\sqrt{2}$ である。この基底状態は $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の重ね合わせであり、全ての 0、1 を組み合わせた量 子状態を内包している。今回、我々が対象とする目的ハミルトニアンは無限レンジ強磁性 p 体相 互作用模型であり、

$$\hat{H}_0 = -N \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^z\right)^p \tag{3}$$

と記述される。 $\hat{\sigma}_i^z := |0\rangle_i \langle 0| - |1\rangle_i \langle 1|$ はパウリ行列の z成分である。pは相互作用の数で、pが 偶数の場合は \hat{H}_0 の基底状態は $\otimes_{i=1}^N |0\rangle_i$ もしくは $\otimes_{i=1}^N |1\rangle_i$ と縮退しており、pが奇数の場合は $\otimes_{i=1}^N |0\rangle_i$ のみが基底状態である。以降、簡単のため pは奇数とする。文献 [8,9] に従い、一次相 転移を回避するために反強磁性相互作用

$$\hat{V}_{\text{AFI}} := N \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \hat{\sigma}_i^z \right)^2 \tag{4}$$

を導入する。そのため、全体のハミルトニアンを

$$\hat{H}(s,\lambda) = s[\lambda\hat{H}_0 + (1-\lambda)\hat{V}_{\rm AFI}] + (1-s)\hat{V}_{\rm TF}$$
(5)

衣 1: λ と V と	\overline{X} I: $\lambda \in V \in H(s, \lambda)$ の対応関係		
λ の値	$\lambda = 1$	$0 \leq \lambda < 1$	
反強磁性相互作用 \hat{V}_{AFI}	なし	あり	
ハミルトニアン $\hat{H}(s,\lambda)$	stoquastic	non-stoquastic	

とする。反強磁性相互作用を導入するために新たに λ というパラメータを加えた。 λ は $\tau = 0$ では 0 から 1 までの任意の値を取り、量子アニーリング完了時には 1 となるパラメータである。 $\lambda = 1$ は反強磁性相互作用 \hat{V}_{AFI} が無い場合に相当するため量子アニーリング完了時の基底状態は \hat{H}_0 のものである。また、 $\lambda = 1$ のときはハミルトニアン $\hat{H}(s, \lambda)$ は stoquastic であり、 $0 \le \lambda < 1$ のときは non-stoquastic である (表 1)。

3 半古典近似スピンコヒーレント状態とトレースノルム距離

ここではまず、アニーリング中でのトレースノルム距離を計算するための半古典近似のスピ ンコヒーレント状態とその基底状態を議論する。スピンコヒーレント状態は以下のように記述さ れる。

$$|\theta,\phi\rangle := \bigotimes_{i=1}^{N} |\theta,\phi\rangle_{i} = \bigotimes_{i=1}^{N} \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle_{i} + \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\phi} |1\rangle_{i} \right]$$
(6)

ここで全てのスピンは同じ θ 、 ϕ であるとし、スピン数Nは大きいものとする。アニーリング中でのスピンコヒーレント状態 $|\theta,\phi\rangle$ の基底状態を与える θ 、 ϕ を得るためにスピンコヒーレント状態に基づく半古典ポテンシャル $V_{SC}(\theta,\phi,s,\lambda)$ の計算を行う [15,18–20]。すると

$$V_{\rm SC}(\theta,\phi,s,\lambda) := \lim_{N \to \infty} N^{-1} \langle \theta,\phi | \hat{H}(s,\lambda) | \theta,\phi \rangle$$
$$= s[-\lambda \cos^p \theta + (1-\lambda) \sin^2 \theta \cos^2 \phi] - (1-s) \sin \theta \cos \phi \tag{7}$$

となる。これは

$$_{i}\langle\theta,\phi|\hat{\sigma}_{i}^{z}|\theta,\phi\rangle_{i} = \cos\theta \tag{8a}$$

 $_{i}\langle\theta,\phi|\hat{\sigma}_{i}^{x}|\theta,\phi\rangle_{i} = \sin\theta\cos\phi \tag{8b}$

であることから

$$\langle \theta, \phi | V_{\rm TF} | \theta, \phi \rangle = -N \sin \theta \cos \phi \tag{9a}$$

$$\langle \theta, \phi | \hat{V}_{\text{AFI}} | \theta, \phi \rangle = 1 + (N-1) \sin^2 \theta \cos^2 \phi$$
 (9b)

$$\langle \theta, \phi | \hat{H}_0 | \theta, \phi \rangle = -N \cos^p \theta + \mathcal{O}(1) \tag{9c}$$

より計算される。²

² 例えば
$$p = 3$$
 の場合を厳密に計算すると

$$\langle \theta, \phi | \hat{H}_0 | \theta, \phi \rangle = -N^{-2} \langle \theta, \phi | \left(\sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^z \right)^3 | \theta, \phi \rangle$$

$$= -N^{-2} \langle \theta, \phi | \left(\sum_{k_1+k_2+\dots+k_N=3} \frac{3}{k_1! k_2! \cdots k_N!} (\hat{\sigma}_1^z)^{k_1} (\hat{\sigma}_2^z)^{k_2} \cdots (\hat{\sigma}_N^z)^{k_N} \right) | \theta, \phi \rangle$$

$$= -\{N^{-1} \cos \theta + 3(1-N^{-1}) \cos \theta + (N-3+2N^{-1}) \cos^3 \theta\}$$



図 1: 上段: 横軸 θ としたときの半古典ポテンシャル V_{SC} 、下段: 横軸を s としたときの半古典 ポテンシャルを最小化する θ (θ_{min})。いずれの場合も p = 11、 $\phi = 0$ とした。 λ の値はそれぞれ (a)(a') 1、(b)(b') 0.1、(c)(c') 0.3 と固定した。(a) での横の破線と(a')(c') での縦の破線は一次 相転移を表しており、(b')(c') での縦の実線は二次相転移を表している。

 ϕ に関しては $\phi = 0$ が基底状態を与えることが簡単にわかるが、半古典ポテンシャルの最小値 を与える θ (以下、 θ_{\min})に関しては数値的に求める必要がある。

図1の上段のグラフは、p = 11、 $\phi = 0$ での半古典ポテンシャル V_{SC} を θ についてプロット したものである。いずれの λ の場合においても、s = 0のときは $\theta_{\min} = \pi/2$, s = 1のときは $\theta_{\min} = 0$ であることがわかる。このことは図1の下段にある、半古典ポテンシャルに基いてプロッ トした s に対しての θ_{\min} のグラフからもわかる。(a') は $\lambda = 1$ の stoquastic ハミルトニアンの 場合で、s = 0.487 で θ_{\min} が不連続になっていることがわかるが、ここでは一次相転移が起きて いる。一方で $\lambda = 0.1$ の non-stoquastic ハミルトニアン場合である (b') においては、s = 0.357で θ_{\min} が $\pi/2$ から連続的に変化していおり、一次相転移ではなく二次相転移が起きていること がわかる。(c')の $\lambda = 0.3$ も non-stoquastic ハミルトニアンの場合であるが一次相転移が消失せ ずに、一次と二次の相転移が両方起きている。

ここで θ_{\min} に基いて、 $s \ge \lambda$ を軸とした相図が書けることを述べておく。一次相転移が起きる s は (a') で見たように θ_{\min} の不連続点である。二次相転移が起きる s に関しては、半古典ポテンシャルを θ について二階微分することで

$$\frac{\partial^2 V_{\rm SC}}{\partial \theta^2}\Big|_{\theta=\pi/2} = -2s(1-\lambda) + (1-s) = 0 \Leftrightarrow s = 1/(3-2\lambda) \tag{10}$$

と解析的に導くことが出来る。図2にてp=3、5、11の場合の相図をプロットした。p=3の場合、反強磁性相互作用 \hat{V}_{AFI} を加えたとしても一次相転移を回避するのが難しいことがわかる。一



図 2: $s-\lambda$ 平面での相図。実線は一次相転移を表し、破線は二次相転移を表す。点線は $s = 1/(3-2\lambda)$ を満たすがは相転移は起きない。



図 3: p = 11、N = 160のときのトレースノルム距離 D。 λ の値はそれぞれ (a) 1、 (b) 0.1、(c) 0.3 と固定した。

方で p=5の場合は、 $\lambda=0\sim0.3$ 程度とすれば、一次相転移を回避することが出来る。p=11の場合でも、 λ を小さい値に設定すれば一次相転移を回避することが出来るが、値によっては一次相転移を回避できずに二次相転移の後に起きる場合がある。

トレースノルム距離の評価を行う。半古典ポテンシャルを最小化するスピンコヒーレント状態 $|\theta_{\min}, 0\rangle$ と数値的に計算される厳密な基底状態 $|\psi_{GS}\rangle$ のトレースノルム距離は以下の様に計算される。

$$D := \sqrt{1 - |\langle \theta_{\min}, 0 | \psi_{\rm GS} \rangle|^2} \tag{11}$$

D = 0の場合、 $|\theta_{\min}, 0\rangle$ と $|\psi_{GS}\rangle$ は一致しているので、基底状態 $|\psi_{GS}\rangle$ は古典的である。逆に D = 1の場合は、 $|\psi_{GS}\rangle$ は直積状態では記述できないことを示すので量子的である。

図3は、p = 11、N = 160のときのトレースノルム距離 Dをプロットしたものである。 λ の 値はそれぞれ (a) 1、 (b) 0.1、(c) 0.3 と固定している。反強磁性相互作用が無い場合に相当する (a) では、s = 0.487 で一次相転移が起きる。転移点でトレースノルム距離はピーク値を取るがそ の前後ではほぼ 0 である。non-stoquastic ハミルトニアンの場合である (b) では、s = 0.357 で二 次相転移が起きピーク値を取る。(a) の時と異なり (b) では相転移後に明らかに Dはゼロでは無 い値を取る。よって一次相転移が消失し二次相転移に変化する non-stoquastic ハミルトニアンの 場合は量子効果が認められる。また、(c) の $\lambda = 0.3$ の場合も、相転移後の D の値はゼロでは無



図 4: p = 11、N = 160のときのリスケールドコンカレンス。横軸を s とし、 λ の値はそれぞれ (a) 1、 (b) 0.1、 (c) 0.3 と固定した。縦の点線は一次相転移が起きている s を表している。

いため量子的である。しかし、この場合は二次相転移の後に一次相転移が起こるため反強磁性相 互作用を加えたことによる量子効果があれば、必ずしも量子アニーリングが効率的になるとは限 らないことがわかる。

4 コンカレンスと量子エンタングルメント

次に量子エンタングルメントを評価するためにコンカレンスを計算する。コンカレンス $C(\rho)$ は 2 スピン間のエンタングルメントの測度であり、密度行列 ρ に対して以下のように定義され る [21,22]。

$$C(\rho) := \max\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}$$

$$(12)$$

 $\lambda_{1,2,3,4}$ はそれぞれ、 $R = \rho(\sigma_i^y \otimes \sigma_j^y)\rho^*(\sigma_i^y \otimes \sigma_j^y)$ の降順での固有値の平方根である。 ρ^* は ρ の 複素共役である。我々が考えているスピン数は N であるが、ここではスピンへ無限レンジで相 互作用しており全て同等なものであるので、系全体のエンタングルメントの評価するために、文 献 [16,23–25] に従ってリスケールドコンカレンス $C_R(\rho)$

$$C_R(\rho) = (N-1)C(\rho) \tag{13}$$

をここでは計算する。

図4にアニーリング中のリスケールドコンカレンス $C_R(\rho)$ の計算結果を載せた。先ほどと同様に λ の値は (a) 1、 (b) 0.1、 (c) 0.3 と固定している。この図で注目すべきは縦軸の目盛りである。いずれも相転移前はゼロであるが、 (a) の stoqustic ハミルトニアンの場合、一次相転移の時点でピーク値を持つが $C_R = 0.06$ 程度である。一方で non-stoquastic ハミルトニアンの場合である (b)(c) では ピーク値が $C_R = 2$ であり、反強磁性相互作用を加えたことでエンタングルメントが発生していることがわかる。特に一次相転移が無い (b) の場合は、相転移後もゼロではない値を取る。一方で (c) では、ピーク値は (b) と同じであるが、二次相転移後に一次相転移が起きるため、トレースノルム距離の評価の時と同様にエンタングルメントがあれば必ずしも量子アニーリングが効率的であるとは限らない事がわかる。

5 まとめ

無限レンジ強磁性 p 体相互作用模型では、一次相転移が問題となるため量子アニーリングが完 了するまでに必要な時間はスピン数に対して指数関数的に増大する。しかし、反強磁性相互作用 を加えることで一次相転移が二次相転移に変わるため多項式時間程度に効率化されることがこれ までに分かっている。この背景には、ハミルトニアンが古典的にシミュレート可能な stoquastic なものであるか、シミュレートが困難な non-stoquastic なものであるかと違いがあるが、本稿で は量子効果の有無に着目して解析を行った。解析には半古典近似でのスピンコヒーレント状態と ハミルトニアンから数値的に計算される厳密な基底状態とのトレースノルム距離、そして量子エ ンタングルメントの測度であるコンカレンスを用いた。いずれにおいても反強磁性相互作用を加 えた場合、すなわちハミルトニアンが non-stoquastic である場合はアニーリング中に量子効果が あることを明らかにした。

注意すべき事として、量子効果があれば必ずしも効率的に量子アニーリングが完了するとは限 らないこと挙げられる。例えば図 3(c) や図 4(c) のように $p = 11, \lambda = 0.3$ の場合は、二次相転移そ して量子効果があっても一次相転移が起きている。今回の取り上げたハミルトニアン例では、反 強磁性相互作用の係数 λ の値が小さいと、一次相転移が回避できる。なおここでの解析は、効率 的に量子アニーリングが完了する特定のハミルトニアンに限定した議論であるため、必ずしも量 子効果があれば量子アニーリングが効率的になることを示せたわけではないことを付記しておく。

謝辞

本研究は総合科学技術・イノベーション会議により制度設計された革新的研究開発推進プログ ラム(ImPACT)の支援を受けたものである。

参考文献

- T. Kadowaki and H. Nishimori, Quantum annealing in the transverse Ising model, Phys. Rev. E 58, 5355 (1998).
- [2] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, J. Lapan, A. Lundgren, and D. Preda, A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an NP-complete problem, Science 292, 472 (2001).
- [3] S. Morita and H. Nishimori, Mathematical foundation of quantum annealing, J. Math. Phys. 49, 125210 (2008).
- [4] M. W. Johnson, M. H. S. Amin, S. Gildert, T. Lanting, F. Hamze, N. Dickson, R. Harris, a J. Berkley, J. Johansson, P. Bunyk, E. M. Chapple, C. Enderud, J. P. Hilton, K. Karimi, E. Ladizinsky, N. Ladizinsky, T. Oh, I. Perminov, C. Rich, M. C. Thom, E. Tolkacheva, C. J. S. Truncik, S. Uchaikin, J. Wang, B. Wilson, and G. Rose, Quantum annealing with manufactured spins, Nature 473, 194 (2011).
- [5] M. R. Garey and D. S. Johnson, Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness (Freeman, New York, 1979).
- [6] F. Barahona, On the computational complexity of the Ising spin glass models, J. Phys. A 15, 3241 (1982).
- [7] T. Jörg, F. Krzakala, J. Kurchan, A. C. Maggs, and J. Pujos, Energy gaps in quantum firstorder mean-field - like transitions: The problems that quantum annealing cannot solve, Europhys. Lett. 89, 40004 (2010).

- [8] Y. Seki and H. Nishimori, Quantum annealing with antiferromagnetic fluctuations, Phys. Rev. E 85, 051112 (2012).
- [9] B. Seoane and H. Nishimori, Many-body transverse interactions in the quantum annealing of the p-spin ferromagnet, J. Phys. A 45, 435301 (2012).
- [10] S. Bravyi, D. P. Di Vincenzo, R. Oliveira, and B. M. Terhal, The complexity of stoquastic local Hamiltonian problems, Quantum Inf. Comput. 8, 361 (2008).
- [11] H. Nishimori and K. Takada, Exponential enhancement of the efficiency of quantum annealing by non-stoquastic Hamiltonians, Front. ICT 4, 2 (2017).
- [12] E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann, Quantum adiabatic evolution algorithms with different paths, arXiv:0208135.
- [13] E. Crosson, E. Farhi, C. Y. -Y Lin, H. -H. Lin, and P. Shor, Different strategies for optimization using the quantum adiabatic algorithm, arXiv:1401.7320.
- [14] L. Hormozi, E. W. Brown, G. Carleo, and M. Troyer, Non-stoquastic Hamiltonians and quantum annealing of Ising spin glass, arXiv:1609.06558.
- [15] S. Muthukrishnan, T. Albash, and D. A. Lidar, Tunneling and Speedup in Quantum Optimization for Permutation-Symmetric Problems, Phys. Rev. X 6, 031010 (2016).
- [16] M. Filippone, S. Dusuel, and J. Vidal, Quantum phase transitions in fully connected spin models: An entanglement perspective, Phys. Rev. A 83, 022327 (2011).
- [17] Yuki Susa, Johann F. Jadebeck, and Hidetoshi Nishimori, Relation between quantum fluctuations and the performance enhancement of quantum annealing in a nonstoquastic Hamiltonian, Phys. Rev. A 95, 042321 (2017).
- [18] E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann, Quantum Adiabatic Evolution Algorithms versus Simulated Annealing, arXiv:0201031.
- [19] G. Schaller and R. Schützhold, The role of symmetries in adiabatic quantum algorithms, Quantum Inf. Comput. 10, 0109 (2010).
- [20] S. Boixo, V. N. Smelyanskiy, A. Shabani, S. V. Isakov, M. Dykman, V. S. Denchev, M. H. Amin, A. Y. Smirnov, M. Mohseni, and H. Neven, Computational multiqubit tunneling in programmable quantum annealers, Nature Commun. 7, 10327 (2016).
- [21] S. Hill and W. K. Wootters, Entanglement of a Pair of Quantum Bits, Phys. Rev. Lett. 78, 5022 (1997).
- [22] W. K. Wootters, Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits, Phys. Rev. Lett. 80, 2245 (1998).
- [23] X. Wang and B. C. Sanders, Spin squeezing and pairwise entanglement for symmetric multiqubit states, Phys. Rev. A 68, 012101 (2003).
- [24] J. Vidal, R. Mosseri, and J. Dukelsky, Entanglement in a first-order quantum phase transition, Phys. Rev. A 69, 054101 (2004).
- [25] J. Vidal, Concurrence in collective models, Phys. Rev. A 73, 063218 (2006).