

京都大学数理解析研究所共同利用研究会「情報物理学の数学的構造」2006年6月28日 - 30日

量子アニーリングとその収束定理

東京工業大学 大学院理工学研究科 物性物理学専攻
西森秀稔 (Hidetoshi Nishimori), 森田悟史 (Satoshi Morita)
Department of Physics,
Tokyo Institute of Technology

1 はじめに

最適化問題は情報科学の中心課題の一つとして広く研究されている。情報科学における最適化問題の研究スタイルは、通常、各問題の特性を生かした高速解法の開発であるが、統計物理学とのアナロジーから生まれたシミュレーテッド・アニーリング (SA) の方法は、その汎用性が最大の特徴である [1]。最小にしたい関数 (コスト関数) をエネルギーと解釈し、人工的に温度変数を導入する。そして、この系をモンテカルロ法で数値的にシミュレートし、徐々に温度をゼロにまで下げていくことで最適状態を求める。温度揺らぎによる状態遷移によって、途中で極小状態に陥って動かなくなることを防いでいる。

そこで、どのような速度で温度を減少させるのかという温度制御 (アニーリング・スケジュール) が、SA の有効性を決定する上で重要になってくる。非常にゆっくりと温度を減少させれば各時刻で平衡状態に近い状態を取ることで、最終的に最適状態 (基底状態) に到達する可能性が高いと考えられる。しかし、あまりゆっくりと下げるのは計算時間がかかりすぎて、困難である。一方、急激に温度を減少させると系が温度変化に追従できず、途中で極小状態におちいってしまう。それゆえ、どれだけの速さで温度を下げれば、極小状態に陥らずに最適状態へ到達する事ができるかを見極めることが重要になってくる。この問題への一般的な解答が、Geman-Geman によって与えられている [2]。彼らの定理によると、どんな系に対しても、 $N/\log t$ に比例して温度を減少させれば、時刻無限大の極限で最適状態へ収束することが保証される。ここで、 N は系の大きさ、 t はシミュレーションのステップ数を表す。

さて、SA に代わる新たな手法として量子アニーリング (QA) が注目されている [3]-[8]。QA では、温度の代わりに量子効果を制御することで最適状態を探索する。元の最適化問題をポテンシャルとみなし、運動エネルギーに相当する量子力学的な遷移項を導入して、後者の大きさを非常に大きい値から 0 に向けて徐々に減少させることにより状態空間を探索しながら最適解に行き着こうというのである。量子力学の断熱定理によると、ハミルトニアンが十分ゆっくり変化するなら、量子力学的な遷移項が支配する初期の自明な基底状態から出発して、ポテンシャルが支配する非自明な基底状態に最終的に移行できるはずである。

主に数値計算によって QA の有効性が精力的に調べられてきたが、面白いことにほとんどすべての場合において、QA のほうが SA より効率的に最適化問題の解に行き着くことが分かってきた。しかし少数ながら例外も見つかっているし、そもそもなぜ QA のほうがうまくいく場合が多いかというメカニズムについてはほとんど分かってない。したがって、どのような条件下で QA が収束するかという問いに対する一般的な答えを与えておくことは十分意味がある。

本稿では、この問題に対するひとつの解答として、QA が収束するための十分条件を与える定理をいくつか証明する。数値計算で QA を行う場合の多くは、経路積分モンテカルロ法や Green 関数モンテカルロ法などの数値的な確率手法を用いることが多い。大規模な系では、Schrödinger 方程式を数値的に解くのが非常

に困難だからである。このような状況を反映して、本稿では QA に対応するモンテカルロシミュレーションの収束条件を導出する。SA の収束条件を与えた Geman-Geman のアイデアを応用して議論を進めていく。

次の節では、モンテカルロ法を数学的に記述するための準備として、非一様 Markov 過程に対する種々の定義を与える。第 3 節と第 4 節で、経路積分モンテカルロ法と Green 関数モンテカルロ法による QA の収束性を議論する。最後の節はまとめである。

なお、本稿は文献 [9] の内容を解説したものである。証明や計算の詳細はそちらを参照されたい。

2 非一様 Markov 連鎖

本稿では経路積分モンテカルロ法と Green 関数モンテカルロ法の 2 つの量子モンテカルロ法を用いた QA の収束性を議論する。これらの方法は数学的には Markov 連鎖で記述される [10, 11]。QA では各時刻で系のパラメータを変化させるため、遷移確率が時間とともに変化する Markov 過程（非一様な Markov 連鎖）を考える必要がある。そこで、QA の収束性を議論する前に、非一様 Markov 連鎖にまつわる定義と収束に関する定理をいくつか述べておくことにしよう。

状態全体の集合（状態空間） S は、離散的で大きさは有限であると仮定する。時刻 t で系の状態が $x \in S$ であるとき、次の時刻で状態 $y \in S$ へ移る遷移確率 $G(y, x; t)$ は次のように書くことができる。

$$G(y, x; t) = \begin{cases} P(y, x)A(y, x; t) & (x \neq y) \\ 1 - \sum_{z \in S} P(z, x)A(z, x; t) & (x = y). \end{cases} \quad (2.1)$$

ここで、 $P(y, x)$ と $A(y, x; t)$ は、それぞれ生成確率と受理確率と呼ばれる。生成確率は、現在の状態 x から次の状態の候補 y を作る確率である。この確率は、時間に依存せず、以下の条件を満たすと仮定する。

$$\forall x, y \in S : P(y, x) = P(x, y) \geq 0, \quad (2.2)$$

$$\forall x \in S : P(x, x) = 0, \quad (2.3)$$

$$\forall x \in S : \sum_{y \in S} P(y, x) = 1, \quad (2.4)$$

$$\forall x, y \in S, \exists n > 0, \exists z_1, \dots, z_{n-1} \in S : \prod_{k=0}^{n-1} P(z_{k+1}, z_k) > 0, z_0 = x, z_n = y. \quad (2.5)$$

最後の条件は、生成確率が規約であることを意味する。つまり、どの状態から出発しても有限回の遷移であらゆる状態へ移ることが可能である。状態 x から 1 ステップで到達できる状態の集合を状態 x の近傍 S_x

$$S_x = \{y | y \in S, P(y, x) > 0\}. \quad (2.6)$$

とする。受理確率 $A(y, x; t)$ は、状態 x から生成された候補 y へ実際に遷移するかを決定する確率である。この具体的な形は、第 3 節、第 4 節で与える。

遷移確率を行列として扱うと便利である。 (y, x) 成分が $[G(t)]_{y,x} = G(y, x; t)$ で与えられる行列 $G(t)$ を遷移行行列と呼ぶ。状態空間 S 上で定義された確率分布全体の集合を \mathcal{P} とし、確率分布 $p \in \mathcal{P}$ を要素 $[p]_x = p(x)$ を持つ縦ベクトルと見なす。この行列とベクトルの表記法を用いると、時刻 t_0 で系が確率分布 $p_0 \in \mathcal{P}$ で表されるとき、時刻 t での確率分布は

$$p(t, t_0) = G^{t, t_0} p_0 \equiv G(t-1)G(t-2) \cdots G(t_0) p_0 \quad (2.7)$$

と書ける。分野によっては、確率分布を横ベクトルとし遷移行行列を右から掛ける定義もあるが、本稿では量子力学を念頭に入れて、左から掛ける上記の書式を採用する。

第3節, 第4節では, 量子アニーリングを記述する非一様マルコフ連鎖がエルゴード性を持つことを証明する。エルゴード性には, 次のように強弱の2種類がある。弱エルゴード性は, 確率分布が漸近的に初期状態に依存しないことを意味する。

$$\forall t_0 \geq 0: \limsup_{t \rightarrow \infty} \{\|p(t, t_0) - p'(t, t_0)\| \mid p_0, p'_0 \in \mathcal{P}\} = 0. \quad (2.8)$$

ここで, $p(t, t_0)$ と $p'(t, t_0)$ は異なる初期分布 p_0, p'_0 から出発した状態分布である。確率分布のノルムは,

$$\|p\| = \sum_{x \in S} |p(x)|, \quad (2.9)$$

で定義される。強エルゴード性は, 確率分布が初期条件に依らず, ある一定の確率分布に収束することを意味する。

$$\exists r \in \mathcal{P}, \forall t_0 \geq 0: \limsup_{t \rightarrow \infty} \{\|p(t, t_0) - r\| \mid p_0 \in \mathcal{P}\} = 0. \quad (2.10)$$

定義から明らかなように, 強エルゴード性は弱エルゴード性よりも強い性質であり, 強エルゴード的ならば弱エルゴード的であることが示せる。

エルゴード性が成立するための条件として, 強弱のそれぞれについて以下の定理が知られている。

定理 1 (弱エルゴード定理) 非一様 Markov 連鎖が弱エルゴード的であるための必要十分条件は, 単調増加整数列

$$0 < t_0 < t_1 < \dots < t_k < t_{k+1} < \dots \quad (2.11)$$

が存在して,

$$\sum_{k=0}^{\infty} (1 - \alpha(G^{t_{k+1}, t_k})) \rightarrow \infty \quad (2.12)$$

が成立することである。

ここで, $\alpha(G^{t', t})$ は以下のように定義される。

$$\alpha(G^{t', t}) = 1 - \min_{z, y \in S} \left\{ \sum_{x \in S} \min\{G^{t', t}(z, x), G^{t', t}(z, y)\} \right\} \quad (2.13)$$

この量は, エルゴード係数と呼ばれ, 1ステップでの状態変化を特徴付ける量である。

定理 2 (強エルゴード定理) 非一様 Markov 連鎖は, 次の条件を満たすとき強エルゴード的である。

1. 弱エルゴード的である。
2. 各時刻 t において定常状態 $p_t = G(t)p_t$ が存在する。
3. 上記の p_t が以下を満たす。

$$\sum_{t=0}^{\infty} \|p_t - p_{t+1}\| < \infty. \quad (2.14)$$

さらに, 確率分布 p_t がある確率分布 p に収束する, すなわち, $p = \lim_{t \rightarrow \infty} p_t$ ならば, p は (2.10) 式の r に等しい。

3 経路積分モンテカルロ法による量子アニーリング

3.1 経路積分モンテカルロ法

経路積分モンテカルロ法 (Path-integral Monte Carlo method, PIMC) [12] を用いて量子アニーリングを行う場合の収束条件を議論する。PIMC は、経路積分を用いて量子系を古典系に移し、その古典系で通常のモンテカルロ法を走らせる計算手法である。

まずは具体的に、組み合わせ最適化問題の典型例として、Ising スピン系の基底状態探索問題を考えよう。組み合わせ最適化問題の多く、例えば、スピングラスの基底状態探索問題はもちろんのこと、巡回セールスマン問題、ニューラルネットワーク、 k -SAT 問題なども、Ising スピンによる表現が可能である。

Ising 模型に量子揺らぎを導入する最も単純な方法は、系に横磁場を加えることである。この系は横磁場 Ising 模型 (Transverse-field Ising model, TFIM) と呼ばれ、そのハミルトニアンは

$$H(t) = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i^x \sigma_j^x - \Gamma(t) \sum_{i=0}^N \sigma_i^z \quad (3.1)$$

で与えられる。 σ_i^α ($\alpha = x, y, z$) は Pauli 行列で、サイト i にある $S = 1/2$ のスピン演算子の各成分を表す。 z 方向のスピン演算子、 σ^z を対角化する基底で表現すると、

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

である。 σ^z の固有状態に σ^x を作用させると、もう一方の固有状態に移ることが見て取れる。つまり、 σ^x は z 方向を向いているスピンを反転させる作用があり、横磁場によって状態遷移が引き起こされる。

ハミルトニアンの第一項は、スピン間の相互作用を表し、組み合わせ最適化問題のコスト関数に相当する。つまり、この項を最小にするスピン配位が求めたい状態である。簡単のため、通常の 2 スピン間の相互作用しか表記していないが、スピンの z 方向間の多体相互作用や縦方向のランダム磁場 $h_i \sigma_i^z$ が存在しても構わない。また、空間次元や格子構造には、制限は一切無い。唯一の条件は、スピンの z 成分のみで表現できることである。

横磁場 $\Gamma(t)$ は、量子的な運動エネルギーの強さを制御するパラメータである。QA では、 $\Gamma(t)$ が非常に大きい値、あるいは無限大からゼロまで、時間とともに徐々に減少させる。最初は、横磁場項が系を支配するため、基底状態は自明で、全てのスピンの x 方向上向き状態である。横磁場をゆっくりと減少していけば、系は各時刻で常に基底状態を辿り、 $\Gamma(t) = 0$ のときには、元々の問題 $-\sum J_{ij} \sigma_i^x \sigma_j^x$ の非自明な基底状態へ到達することが期待できる。そのためには、どれだけゆっくりと減少させればよいか、重要な問題となる。

経路積分法では、鈴木-Trotter の公式 [13, 14] を用いることで、 d 次元 TFIM を $d+1$ 次元 Ising スピン系に写像する。まず Boltzmann 因子を鈴木-Trotter の公式

$$\exp[-\beta(H_0 + H_1)] = \lim_{M \rightarrow \infty} \exp\left(-\frac{\beta H_0}{M}\right) \exp\left(-\frac{\beta H_1}{M}\right) \quad (3.3)$$

により、対角項と非対角項、つまり相互作用項と横磁場項に分割する。指数関数の間に恒等演算子を挿入し、横磁場項を評価することで、最終的に分配関数は、

$$Z(t) \approx \sum_{\{S_i^{(k)}\}} \exp\left(\frac{\beta}{M} \sum_{k=1}^M \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i^{(k)} S_j^{(k)} + \gamma(t) \sum_{k=1}^M \sum_{i=0}^N S_i^{(k)} S_i^{(k+1)}\right) \quad (3.4)$$

と近似される。 M は Trotter 数と呼ばれ、古典系に移した時に増えた次元の長さである。 $S_i^{(k)}$ は、Trotter 方向 k 番目のレプリカ上にあるサイト i の古典 Ising スピンである。隣接する Trotter スライス間の相互作用は、強磁性的で

$$\gamma(t) = \frac{1}{2} \log \left(\coth \frac{\beta \Gamma(t)}{M} \right) \quad (3.5)$$

である。この相互作用の大きさは、時間と共に増加し、 $t \rightarrow \infty$ で無限大になる。(3.4) の近似は、逆温度 β を固定して $M \rightarrow \infty$ の極限を取ると厳密になる。実際の数値計算では、 M と β は非常に大きい値で固定する。従って、次に述べる定理は、系が真の基底状態に収束することを直接保証するわけではない。実際には、有限温度の平衡状態へ収束する。しかし、 M と β を大きくすることで、平衡状態は幾らでも基底状態へ近く取ることが出来る。

(3.4) 式を

$$Z(t) = \sum_{x \in S} \exp \left(-\frac{F_0(x)}{T_0} - \frac{F_1(x)}{T_1(t)} \right) \quad (3.6)$$

と書くと、より一般的な問題を扱えるため便利である。 $F_0(x)$ はコスト関数であり、この最小値が求めたい解である。温度 T_0 は、十分に小さい値に固定する。 $F_1(x)$ は、TFIM の横磁場項から導出されたもので、一般には運動エネルギーに対応する。量子揺らぎは $T_1(t)$ によって制御される。

分配関数 (3.6) を元に、PIMC の受理確率を次のように定義する。

$$A(y, x; t) = g \left(\frac{q(y; t)}{q(x; t)} \right) \quad (3.7)$$

$$q(x; t) = \frac{1}{Z(t)} \exp \left(-\frac{F_0(x)}{T_0} - \frac{F_1(x)}{T_1(t)} \right) \quad (3.8)$$

2 行目の $q(x; t)$ は、時刻を固定したときの平衡 Boltzmann 因子である。1 行目右辺の関数 $g(u)$ は、受理関数と呼ばれ、 $0 \leq g(u) \leq 1$ かつ $g(1/u) = g(u)/u$ を満たす $u \geq 0$ で定義された単調増加関数である。具体的には、

$$g(u) = \frac{u}{1+u} \quad (\text{熱浴法}) \quad (3.9)$$

$$g(u) = \min\{1, u\} \quad (\text{Metropolis 法}) \quad (3.10)$$

等が使用される。 $g(u)$ の条件は、時刻 t を固定した遷移行列 $G(t)$ によって生成される Markov 連鎖の定常状態が $q(x; t)$ であることを保証する。別の言い方をすると、 $q(t) = G(t)q(t)$ である。

3.2 QA-PIMC の収束定理

PIMC による QA が収束するための十分条件は、以下の定理によって与えられる。

定理 3 ((3.6) で表される系の強エルゴード性) (2.1)(3.7)(3.8) によって生成される非一様 Markov 連鎖は、

$$T_1(t) \geq \frac{\Delta}{\log(t+2)} \quad (3.11)$$

のとき強エルゴード的であり、 $\exp(-F_0(x)/T_0)$ に比例した状態分布に収束する。

一般に、定数 Δ は系の大きさ N に比例する。この定理を TFIM における QA-PIMC(3.4) の場合に適用することで、次の系を得る。

系 1 (TIMC における PIMC-QA の強エルゴード性) (3.4) の右辺の Boltzmann 因子から生成される非一様 Markov 連鎖は,

$$\Gamma(t) \geq \frac{M}{\beta} \tanh^{-1} \frac{1}{(t+2)^{2/\Delta}} \quad (3.12)$$

ならば強エルゴード的である。

十分 t が大きい場合には, 上記の不等式は

$$\Gamma(t) \geq \frac{M}{\beta} (t+2)^{-2/\Delta} \quad (3.13)$$

と評価できる。つまり, PIMC によって TFIM の QA を行う場合, 横磁場をべき的に減少することで, 収束が保証される。

このアニーリングスケジュールは, Geman-Geman の定理による SA のアニーリングスケジュール

$$T_{SA}(t) \geq \frac{\Delta}{\log(t+2)} \quad (3.14)$$

に比べると, どれ位速いのだろうか。横磁場が非常に小さな値 δ に達するために必要な時間を見積もると,

$$t_{QA} \sim \exp\left(\frac{kN}{2} \log \frac{M}{\beta\delta}\right) \quad (3.15)$$

である。但し, $\Delta = kN$ とした。一方, SA において温度が δ に到達する時間は,

$$t_{SA} \sim \exp\left(\frac{k'N}{\delta}\right) \quad (3.16)$$

である。どちらも, NP 完全問題を含む一般的な問題を扱うため, 問題のサイズ N の指数関数になっている。しかし, 微量 δ の依存性が, t_{SA} は $\mathcal{O}(1/\delta)$ なのに対し, t_{QA} は $\mathcal{O}(\log \delta)$ となっている。その分だけ指数関数内の N の係数が改善されている。

3.3 定理 3 の証明

定理 3 の証明を行う前に, 幾つかの概念を導入する。 $F_1(x)$ が状態 x の近傍 S_x において最大であるような状態 x の集合,

$$S_m = \{x | x \in S, \forall y \in S_x, F_1(x) \geq F_1(y)\} \quad (3.17)$$

を $F_1(x)$ の極大状態集合と呼ぶ。状態 x から状態 y まで遷移するのに必要な最小ステップ数を $d(x, y)$ と書く。これを用いて次の量を定義する。

$$R = \min_{x \in S \setminus S_m} \left\{ \max_{y \in S} \{d(y, x)\} \right\}, \quad (3.18)$$

$$x^* = \arg \min_{x \in S \setminus S_m} \left\{ \max_{y \in S} \{d(y, x)\} \right\}. \quad (3.19)$$

R を振動半径, x^* を振動の中心と呼ぶ。状態 x から任意の状態まで遷移するには高々 $\max\{d(y, x) | y \in S\}$ 回のステップで十分である。このステップ数は初期状態 x に依存しており, $F_1(x)$ の極大状態集合以外の状態からスタートするときの最小値が R である。そして, 高々 R 回の遷移で任意の状態へ行ける状態が x^* である。生成確率が対称であることを思い出すと, R 回のステップで, 任意の状態から x^* まで遷移できるとも言える。

関数 $F_0(x)$, $F_1(x)$ が 1 ステップでどれだけ変動するかを表す定数として,

$$L_0 = \max\{|F_0(x) - F_0(y)| \mid x, y \in S, P(y, x) > 0\} \quad (3.20)$$

$$L_1 = \max\{|F_1(x) - F_1(y)| \mid x, y \in S, P(y, x) > 0\} \quad (3.21)$$

を定義する。生成確率 $P(y, x)$ の 0 でない最小値を

$$w = \min\{P(y, x) \mid x, y \in S, P(y, x) > 0\} \quad (3.22)$$

と書く。

強エルゴード性を証明するには、まず非一様 Markov 連鎖が弱エルゴード的であることを示さなければならない。そのために次の補題を用意する。

補題 1 (遷移確率の下限) (2.1)(3.7)(3.8) によって定義される遷移確率は、以下の下限を持つ。

$$P(y, x) > 0 \Rightarrow \forall t > 0: G(y, x; t) \geq wg(1) \exp\left(-\frac{L_0}{T_0} - \frac{L_1}{T_1(t)}\right), \quad (3.23)$$

$$\exists t_1 > 0, \forall t \geq t_1, \forall x \in S \setminus S_m: G(x, x; t) \geq wg(1) \exp\left(-\frac{L_0}{T_0} - \frac{L_1}{T_1(t)}\right). \quad (3.24)$$

(3.23) は、受理関数 $g(u)$ の性質を利用することで証明できる。(3.24) の証明は、 $x \in S \setminus S_m$ より、 $F(y) > F(x)$ なる状態 y が存在することに注目する。この状態に対して、受理確率が $t \rightarrow \infty$ で 0 に収束することより、 $G(x, x) > 0$ が示せる。一方で、(3.24) の右辺は t を大きくすれば幾等でも小さくなるので、(3.24) を証明することができる。

以上でエルゴード性を証明するための準備が整った。まずは、定理 1 を用いて、弱エルゴード性を証明する。

弱エルゴード性の証明

任意の状態 x から振動の中心 x^* への遷移を考える。 x^* と振動半径 R の定義より、次のような R 回以内のステップで x から x^* まで到達する遷移ルートが必ず 1 つは存在する。

$$x \equiv x_0 \neq x_1 \neq x_2 \neq \dots \neq x_i = x_{i+1} = \dots = x_R \equiv x^* \quad (3.25)$$

補題 1 より、 t が十分に大きければ、

$$G(x_{i+1}, x_i; t - R + i) \geq wg(1) \exp\left(-\frac{L_0}{T_0} - \frac{L_1}{T_1(t - R + i)}\right) \quad (3.26)$$

が成立する。これを、 $i = 0$ から $i = R - 1$ まで掛け合わせて、 $T_1(t)$ が t の単調減少関数であることを用いれば、

$$G^{t, t-R}(x^*, x) \geq w^R g(1)^R \exp\left(-\frac{RL_0}{T_0} - \frac{RL_1}{T_1(t-1)}\right) \quad (3.27)$$

を得る。従って、 $G^{t, t-R}$ のエルゴード係数は

$$1 - \alpha(G^{t, t-R}) \geq w^R g(1)^R \exp\left(-\frac{RL_0}{T_0} - \frac{RL_1}{T_1(t-1)}\right) \quad (3.28)$$

と評価される。エルゴード係数の定義にある和のなかに、 $z = x^*$ が必ず含まれることを用いている。

ここで、単調増加整数列として $t_k = kR$ を採用する。上式より、ある整数 k_0 が存在し、 $k \geq k_0$ を満たす全ての k に対し

$$1 - \alpha(G^{kR, kR-R}) \geq w^R g(1)^R \exp\left(-\frac{RL_0}{T_0} - \frac{RL_1}{T_1(kR-1)}\right) \quad (3.29)$$

が成立する。さらに,

$$\Delta \geq RL_1 \quad (3.30)$$

とし, アニーリング・スケジュール (3.11) を代入すると

$$1 - \alpha(G^{kR, kR-R}) \geq w^R g(1)^R \exp\left(-\frac{RL_0}{T_0}\right) \frac{1}{kR+1} \quad (3.31)$$

となる。この k に対する和を取ると,

$$\sum_{k=1}^{\infty} (1 - \alpha(G^{kR, kR-R})) \geq w^R g(1)^R \exp\left(-\frac{RL_0}{T_0}\right) \sum_{k=k_0}^{\infty} \frac{1}{kR+1} \rightarrow \infty \quad (3.32)$$

と評価できる。従って, 定理 1 より弱エルゴード性が証明できた。

強エルゴード性の証明

いよいよ定理 3 の証明を行う。定理 2 の条件のうち, 1. は既に示した。また, 先に述べたように各時刻の遷移行列 $G(t)$ の定常状態は, (3.8) の Boltzmann 分布 $q(x; t)$ であるので, 条件 2. も満足する。従って, $p_t = q(x; t)$ として条件 3. を示せば良い。まず, $q(x; t)$ の単調性に注目する。

$$\forall t \geq 0, \forall x \in S_1^{\min} : q(x; t+1) \geq q(x; t), \quad (3.33)$$

$$\exists t_1 > 0, \forall t \geq t_1, \forall x \in S \setminus S_1^{\min} : q(x; t+1) \leq q(x; t). \quad (3.34)$$

ここで, S_1^{\min} は, $F_1(x)$ の最小状態の集合である。上式の証明は, $T_1(t)$ が単調減少であることから証明することができる。この事実より, $t > t_1$ ならば, $\|q(t)\| = \sum_{x \in S_1^{\min}} q(x; t) + \sum_{x \notin S_1^{\min}} q(x; t) = 1$ であることに注意して,

$$\begin{aligned} \|q(t+1) - q(t)\| &= \sum_{x \in S_1^{\min}} \{q(x; t+1) - q(x; t)\} - \sum_{x \notin S_1^{\min}} \{q(x; t+1) - q(x; t)\} \\ &= 2 \sum_{x \in S_1^{\min}} \{q(x; t+1) - q(x; t)\} \end{aligned} \quad (3.35)$$

を得る。従って,

$$\sum_{t=t_1}^{\infty} \|q(t+1) - q(t)\| = 2 \sum_{x \in S_1^{\min}} \{q(x; \infty) - q(x; t_1)\} < 2 \quad (3.36)$$

であるから,

$$\sum_{t=0}^{\infty} \|q(t+1) - q(t)\| \leq 2t_1 + 2 < \infty \quad (3.37)$$

となり, $q(t)$ は条件 3. を満たすことが分かる。以上より, 強エルゴード性が証明された。

4 Green 関数モンテカルロ法による量子アニーリング

経路積分モンテカルロ法は, もともと, 量子系の有限温度での平衡状態をシミュレーションするために開発されたものである。そのため, 有限温度の系のみしか扱うことができず, さらに, 時間発展は Schrödinger 方程式によるものではない。これらの問題点を改善する計算手法として Green 関数モンテカルロ法 (Green's function Monte Carlo method, GFMC) [12, 15, 16] がある。この手法の基本的なアイデアは, 虚時間 Schrödinger 方程式を確率的に解釈することである。虚時間の時間発展の方が, 実時間 Schrödinger 方程式

よりも速く最適状態へ収束するのが報告されている [17]。我々の目的は組み合わせ最適化問題を解くことであるので、自然な実時間発展よりも、虚時間 Schrödinger 方程式を議論するほうが重要である。

初期状態 $|\psi_0\rangle$ として、虚時間 Schrödinger 方程式による状態の時間発展は、T-積を用いて

$$|\psi(t)\rangle = U(t,0)|\psi_0\rangle = T \exp\left(-\int_0^t dt' H(t')\right) |\psi_0\rangle \quad (4.1)$$

と表すことができる。時間発展演算子 $U(t,0)$ はユニタリーではないので、波動関数は規格化されていない。右辺を微小時間の時間発展演算子の積に分解する。

$$|\psi(t)\rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \hat{G}(t_{n-1}) \hat{G}(t_{n-2}) \cdots \hat{G}(t_1) \hat{G}(t_0) |\psi_0\rangle \quad (4.2)$$

ここで、 $t_k = k\Delta t$, $\Delta t = t/n$, $\hat{G}(t) = U(t+\Delta t, t)$ である。GFMC では、 n を十分大きな値に固定し、 $\hat{G}(t)$ を

$$\hat{G}_1(t) = 1 - \Delta t(H(t) - E_T) \quad (4.3)$$

に置き換えることで、右辺の積を近似する。新たに付け加わった E_T は、参照エネルギーと呼ばれ、基底状態のエネルギーに近い値に設定する。物理的にはエネルギーの基準を変更するだけで何も影響を与えないが、 $\hat{G}_1(t)$ の行列要素を全て正にする重要な役割を担う。

式(4.2)を確率的に実現するために、帰納的な表現に書き換えよう。基底を $|x\rangle$ として波動関数を $\psi_k(x) = \langle x|\psi_k\rangle$ と表し、Green 関数 $\hat{G}_1(t)$ の各成分を

$$\hat{G}_1(y, x; t) = \langle y|1 - \Delta t(H(t) - E_T)|x\rangle \quad (4.4)$$

と書く。すると、(4.2) は、

$$\psi_{k+1}(y) = \sum_x \hat{G}_1(y, x; t) \psi_k(x) \quad (4.5)$$

と書くことができる。この式の見方は、Markov 過程と同じである。しかし、Green 関数が規格化されていない ($\sum_y \hat{G}(y, x; t) \neq 0$) という点で決定的に異なる。この問題を回避するために、Green 関数を規格化された確率 G と規格化因子に相当する重み w に分解する。

$$\hat{G}_1(y, x; t) = G_1(y, x; t) w(x; t), \quad (4.6)$$

$$G_1(y, x; t) = \frac{\hat{G}_1(y, x; t)}{\sum_y \hat{G}_1(y, x; t)}, \quad w(x; t) = \sum_y \hat{G}_1(y, x; t). \quad (4.7)$$

常に $G_1(y, x; t)$ を確率と見なすことができるとは限らないが、ここでは適切な基底とパラメータを選択することで、 $0 \leq G_1(y, x; t) \leq 1$ となり、 $G_1(y, x; t)$ を遷移確率と見なせると仮定する。後述するように、横磁場 Ising 模型ではこの仮定は確かに成立する。遷移確率 G_1 と重み w による表式を用いると、時刻 t での波動関数は、

$$\begin{aligned} \psi_n(y) &= \sum_{\{x_k\}} \delta_{y, x_n} w(x_{n-1}; t_{n-1}) w(x_{n-2}; t_{n-2}) \cdots w(x_0; t_0) \\ &\quad \times G_1(x_n, x_{n-1}; t_{n-1}) G_1(x_{n-1}, x_{n-2}; t_{n-2}) \cdots G_1(x_1, x_0; t_0) \psi_0(x_0) \end{aligned} \quad (4.8)$$

と書き表せる。

GFMC のアルゴリズムは、上式を以下のような重み付きランダムウォークによって解釈することで実現される。まず始めに、初期状態として全ての成分が非負である波動関数 $\psi_0(x_0)$ を 1 つ用意する。この $\psi_0(x_0)$ に比例した確率分布で、ランダムウォーカーの初期位置 x_0 を決定する。次に、遷移確率 $G_1(x_1, x_0; t)$ に従い、次の位置 x_1 へウォーカーを移動させる。同時に、このウォーカーの重みを $W_1 = w(x_0; t_0) W_0$ に従い

更新する。但し、最初の重みは $W_0 = 1$ である。この確率過程を n 回繰り返す事で、このウォーカーの最終的な位置 x_n と重み W_n が決まる。上記の過程を、 M 個の独立なウォーカーに対して行うことで、求めたい波動関数は

$$\psi_n(y) = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M W_n^{(i)} \delta_{y, x_n^{(i)}} \quad (4.9)$$

と求まる。

具体例として、TFIM で GFMC を行う場合を考えよう。 σ^z を対角化する基底を選ぶと、Green 関数は

$$\hat{G}_1(y, x; t) = \begin{cases} 1 - \Delta t(E_0(x) - E_T) & (x = y) \\ \Delta t \Gamma(t) & (x \text{ と } y \text{ が } 1 \text{ スピンフリップのみ異なる場合}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases} \quad (4.10)$$

と計算できる。ここで、 $E_0(x) = \langle x | (-\sum_{ij} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z) | x \rangle$ である。 Δt と E_T は、全ての状態 x に対し $1 - \Delta t(E_0(x) - E_T) \geq 0$ となるように選ぶ必要がある。 $w(x; t) = \sum_y \hat{G}_1(y, x; t)$ より、重みは

$$w(x; t) = 1 - \Delta t(E_0(x) - E_T) + N \Delta t \Gamma(t) \quad (4.11)$$

で与えられる。遷移確率 $G_1(y, x; t) = \hat{G}_1(y, x; t)/w(x; t)$ は、(2.1) のように生成確率と受理確率に分解することができる。

$$P(y, x) = \begin{cases} \frac{1}{N} & (1 \text{ スピンフリップ}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}, \quad (4.12)$$

$$A(y, x; t) = \frac{N \Delta t \Gamma(t)}{1 - \Delta t(E_0(x) - E_T) + N \Delta t \Gamma(t)}. \quad (4.13)$$

上記のように定義される GFMC によって QA を行う場合、どの程度ゆっくりと量子揺らぎを減少させる必要があるだろうか。次の定理は、この問題の十分条件を与える。

定理 4 (GFMC による QA の強エルゴード性) TFIM 上の QA-GFMC におけるランダムウォーカーが従う非一様 Markov 連鎖 (2.1) (4.12) (4.13) は、

$$\Gamma(t) \geq \frac{b}{(t+1)^c}, \quad 0 < c \leq \frac{1}{N} \quad (4.14)$$

のとき強エルゴード的である。

定理 4 は、ランダムウォーカーがエルゴード的であることを主張するだけであり、ウォーカーが基底状態に集中することを意味するのでは無いことに注意する必要がある。 $t \rightarrow \infty$ では、ウォーカーの分布は

$$q(x; t) = \frac{1}{2^N} - \frac{\Delta t E_0(x)}{2^N \{1 + \Delta t E_T + N \Delta t \Gamma(t)\}} \quad (4.15)$$

に収束する。この分布は、コスト関数 $E_0(x)$ が最小のところにピークを持っているが、かなり幅の広い分布になっている。GFMC のアルゴリズムを考えれば分かるように、基底状態を求めるためには、重み $w(x; t)$ まで考慮する必要がある。重み $w(x; t)$ は $E_0(x)$ が小さいほど大きい値を持つので、基底状態に長く滞在するウォーカーほど、大きな重みが繰り返し掛け合わされる。最終的に、基底状態にいるウォーカーの重みが、他の状態にいるウォーカーを圧倒することで、漸近的にデルタ関数的なピークを持つ波動関数 $\psi_n(x)$ が得られるのである。

5 まとめ

本稿では、経路積分モンテカルロ法と Green 関数モンテカルロ法の 2 つの量子モンテカルロ法で量子アニーリングを行う場合、対応する非一様 Markov 連鎖の強エルゴード性を証明した。横磁場 Ising 模型の場合には、横磁場を漸近的に $\Gamma(t) \sim \text{const}/t^c$ で減少させることで、QA が収束することが保証される。温度によるアニーリングが $T(t) \sim \text{const}/\log t$ で収束することに比べると、QA のほうがより速いアニーリングスケジュールになっている。定数 c は系のサイズ N の逆数程度の大きさなので、大きい N に対しては横磁場は非常にゆっくりとしか変化しないことになる。また、計算時間も N に対し指数関数的に増大する。従って実用的な観点からすると、このアニーリングスケジュールは決して速いとは言えない。しかしながら、極小状態に捕らえられることなく、基底状態 (PIMC は基底状態に近い状態) に必ず収束することを保証するという意味で、我々の結果は実際の数値計算の数学的基礎を与えている。

参考文献

- [1] S. Kirkpatrick, S. D. Gelett and M. P. Vecchi, *Science* **220** (1983) 671
- [2] S. Geman and D. Geman, *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* PAMI-6 (1984) 721
- [3] P. Amara, D. Hsu and J. E. Atrub, *J. Phys. Chem.* **97** (1993) 6715
- [4] A. B. Finnila, M. A. Gomez, C. Sebenik, C. Stenson and J. D. Doll, *Chem. Phys. Lett.* **219** (1994) 343
- [5] 田中和之, 堀口剛, 電子情報通信学会論文誌, **J80** (1997) 2117
- [6] T. Kadowaki and H. Nishimori, *Phys. Rev. E* **58** (1998) 5355
- [7] T. Kadowaki T 1999 *Thesis* (Tokyo Institute of Technology) quant-ph/0205020
- [8] A. Das and B. K. Chakrabarti (eds), *Quantum Annealing and Related Optimization Methods (Lecture Notes in Physics 679)*, Berlin Heidelberg: Springer (2005)
- [9] S. Morita and H. Nishimori, quant-ph/0608154
- [10] 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)
- [11] E. Aarts and J. Korst, *Simulated Annealing and Boltzmann Machines: a Stochastic Approach to Combinatorial Optimization and Neural Computing*, New York: Wiley (1984) ch. 3
- [12] D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* Cambridge: Cambridge University Press (2000) ch. 8
- [13] H. F. Trotter, *Proc. Am. Math. Soc.* **10** (1959) 545
- [14] M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **46** (1971) 1337
- [15] D. M. Ceperley and B. J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **45** (1980) 566
- [16] N. Trivedi and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. B* **41** (1990) 4552
- [17] L. Stella, G. E. Santoro and E. Tosatti, *Phys. Rev. B* **72** (2005) 014303