局所場応答による基底状態探索演算 II

Ground State Searching Computation by Local Field Response II

日立 研開 ○戸丸 辰也

Hitachi, Research & Development Group, ○Tatsuya Tomaru

E-mail: tatsuya.tomaru.yq@hitachi.com

はじめに：前回、局所場応答法(LFR)を提案し、ボトムアップ的に方法論を述べた[1]。今回は、他の方法との関連にも言及して大局的な立場から述べる。

動作原理：断熱量子計算(AQC)・量子アニール(QA)と同様に[2,3]、イジングスピン・ハミルトニアン $\left(\hat{H}_{\mathrm{p}} = -\sum_{i>j} J_{ij}\hat{\sigma}_i^z\hat{\sigma}_j^z - \sum_j g_j\hat{\sigma}_j^z\right)$ の基底状態が解になるように問題を設定し、$t = 0$ で横磁場 $\boldsymbol{B}$ を印加 $\left(\hat{H}_0 = -\gamma\sum_j \hat{\sigma}_{\mathrm{j}}^x\right)$ して系を基底状態に準備する。その後磁場強度を徐々に $\boldsymbol{B} = 0$ ($t = \tau$)まで下げて解を得る。量子系ならば断熱定理により基底状態が維持される（断熱量子計算）。局所場応答法ではここで量子力学的性質を一部残して古典論に移る。スピンの立場で現象を見れば有効磁場を感じ、それに応答する。期待値と応答関数 $\boldsymbol{r}_j(t)$ を用いてこの描像を直接的に記述すれば $\langle\hat{\boldsymbol{\sigma}}_j(t)\rangle \big/ \left|\langle\hat{\boldsymbol{\sigma}}_j(t)\rangle\right| = \boldsymbol{r}_j(t)\cdot\langle\hat{\boldsymbol{B}}_{\mathrm{eff},j}(t)\rangle \big/ \left|\langle\hat{\boldsymbol{B}}_{\mathrm{eff},j}(t)\rangle\right|$ となる。局所場応答法はこの式を元に演算する。c-number の $\langle\hat{\boldsymbol{\sigma}}_j(t)\rangle$ をスピン変数とみなし、応答関数 $\boldsymbol{r}_j(t)$は別途類似の問題を量子力学的に解くことにより事前に定める。この $\boldsymbol{r}_j(t)$を用いて $\langle\hat{\boldsymbol{B}}_{\mathrm{eff},j}(t_i)\rangle$ から $\langle\hat{\boldsymbol{\sigma}}_j(t_i)\rangle$ を求め、また $\hat{\boldsymbol{B}}_{\mathrm{eff},j} \equiv -\partial\hat{H}(t)/\partial\hat{\boldsymbol{\sigma}}_j$ により $\langle\hat{\boldsymbol{B}}_{\mathrm{eff},j}(t_{i+1})\rangle$ を求めて時間発展させる。局所場応答法は古典的マシンで動作させるが、別途得られた $\boldsymbol{r}_j(t)$を通して量子力学的効果が加味される。他の方法との関係を表1にまとめる。

シミュレーション結果：局所場応答法で非局所相関を考慮しない場合、スピンは局所有効磁場だけで向きが定まり $\boldsymbol{r}_j(t) = 1$ である。非局所相関を考慮した場合は一般に $\boldsymbol{r}_j(t) \neq 1$ である。$\boldsymbol{r}_j(t)$の具体例は[1]に示す。J_{ij} 及び g_j を[-5,5]の一様乱数で設定した8ビット系のランダム相互作用問題を、10000 種類計算した場合の成功率と正確度を表2に示す。ここで正確度とは $p_{\mathrm{a}} \equiv (\varepsilon_{\max} - \varepsilon_{\mathrm{obt}})/(\varepsilon_{\max} - \varepsilon_{\min})$であり、$\varepsilon_{\min}$ が基底状態のエネルギー、$\varepsilon_{\mathrm{obt}}$ が解として得られた状態のエネルギー、$\varepsilon_{\max}$ が $\hat{H}_{\mathrm{p}}$ の最大固有エネルギーである。初期値は $\langle\hat{\boldsymbol{\sigma}}_j(t_0)\rangle = 0$ で、two rounds の2回目の演算では初期値を1回目の演算結果のスピン反転させた状態とする。比較のために Simulated Annealing (SA)も評価した。SA では８種類のビット反転に対する近傍探索を行い、遷移確率をボルツマン因子で決定し、500 ステップで最大性能が得られるようにパラメタを定めた。初期値は g_j で定まる向きとした。局所場応答法ではステップ幅は時間発展に従い変動するもので、最適解の得られたステップ数は平均で 165、標準偏差 93.4 であった。

Table I.

	Principle	Time evolution
AQC	Adiabatic process	Deterministic
LFR	A priori determined $\boldsymbol{r}_j$	Deterministic
SA	Thermal fluctuations	Probabilistic

Table II.

	One round		Two rounds	
	Success	Accuracy	Success	Accuracy
LFR ($\boldsymbol{r}_j = 1$)	88.81%	99.52%	93.63%	99.74%
LFR ($\boldsymbol{r}_j \neq 1$)	92.61%	99.72%	96.52%	99.89%
SA	75.15%	98.39%		

まとめ：少なくともランダム相互作用問題に関しては局所場応答法の性能が SA を上回っている。

謝辞：本研究の一部は文部科学省 イノベーションシステム整備事業の支援により遂行された。

[1] 戸丸辰也、第 75 回応用物理学学会秋季学術講演会 18p-C2-1 (2014).
[2] E. Farhi, et al., Science 292, 472 (2001).
[3] T. Kadowaki et al., Phys. Rev. E 58, 5355 (1998).

© 2015年 応用物理学会