

量子アニーリングの収束定理

西森秀稔, 森田悟史

東京工業大学 大学院理工学研究科 物性物理学専攻

1 はじめに

最適化問題の汎用解法であるシミュレーテッド・アニーリング (SA) では、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。Geman-Geman 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 [1]。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 [2]-[7]。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、興味深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。

本講演では、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与える。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。そこで、本講演では 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示す。証明については文献 [8] を参照されたい。

2 非一様 Markov 連鎖

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 の収束性を考察する。これらの方法は数学的には Markov 連鎖で記述される [9]。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, 生成確率が既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。

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

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。

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

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。

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) 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

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

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 $-\sum J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z$ 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 [11] 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 1 ((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。

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) がある [10]。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 [12]。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) を確率論的に実現するために、少し表現を書き換えよう。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。この式の見た目は、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、

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

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、 $E_0(x) = \langle x | \left(-\sum_{ij} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z \right) | x \rangle$ 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 2 (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 2 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 おわりに

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について, 対応する非一様 Markov 連鎖の強エルゴード性が成立する条件を示した。横磁場 Ising 模型の場合には, 横磁場を漸的に $\Gamma(t) \sim \text{const}/t^c$ 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. Geman and D. Geman, *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* **PAMI-6** (1984) 721
- [2] T. Kadowaki and H. Nishimori, *Phys. Rev. E* **58** (1998) 5355
- [3] P. Amara, D. Hsu and J. E. Atroub, *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] A. Das and B. K. Chakrabarti (eds), *Quantum Annealing and Related Optimization Methods (Lecture Notes in Physics 679)*, Berlin Heidelberg: Springer (2005)
- [7] G. E. Santoro and E. Tosatti, *J. Phys. A* **39** (2006) R393
- [8] S. Morita and H. Nishimori, *J. Phys. A* **39** (2006) 13903
- [9] 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)
- [10] D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* Cambridge: Cambridge University Press (2000) ch. 8

[11] M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **46** (1971) 1337

[12] L. Stella, G. E. Santoro and E. Tosatti, *Phys. Rev. B* **72** (2005) 014303