

令和元年6月27日現在

機関番号：32689

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2018

課題番号：15K17720

研究課題名（和文）量子情報科学に立脚した統計力学の新しい展開

研究課題名（英文）Development of statistical mechanics based on quantum information science

研究代表者

田中 宗 (TANAKA, Shu)

早稲田大学・グリーン・コンピューティング・システム研究機構・主任研究員（研究院准教授）

研究者番号：40507836

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：量子情報科学と統計力学の境界領域を探求すべく、(1)トポロジカル相転移がある統計力学モデルにおけるエンタングルメント特性の検討、(2)量子アニーリングの計算性能向上のための理論的考察を行った。(1)では一般化クラスタリングモデルのトポロジカル量子相転移とエンタングルメント特性の関係とを基底状態解析並びにダイナミクス解析の両面から検討した。(2)では量子アニーリングのボトルネックの一つである量子1次相転移の回避方法や、計算性能向上のための各種パラメタ設定法の検討を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究課題で得られた成果は、それぞれ長年の歴史を経て発展してきた量子情報科学と統計力学のギャップを埋めるものである。特にトポロジカル相転移をエンタングルメント特性の観点から検討したことは、トポロジカル物性においても量子情報科学においても重要な進展である。また、量子アニーリングの計算性能向上を指向した理論解析は今後、量子アニーリングの応用探索を推進する上で重要な礎となると期待される。

研究成果の概要（英文）：In order to bridge between quantum information science and statistical mechanics, (1) examination of entanglement characteristics in statistical mechanics model associated with topological phase transition, (2) theoretical consideration for improving the computational performance of quantum annealing. In the study of (1), the relationship between the topological quantum phase transition and the entanglement property of the generalized clustering model is studied from both the ground-state analysis and the dynamics analysis. In the study of (2), we examined the method of avoiding the first-order phase transition of the quantum which is one of the bottlenecks of quantum annealing, and various parameter setting methods for improving the calculation performance.

研究分野：統計力学、量子アニーリング、イジングマシン

キーワード：エンタングルメント トポロジカル相転移 量子アニーリング 断熱量子計算 量子相転移

## 1. 研究開始当初の背景

量子力学に立脚した情報処理である量子情報処理に対する期待が高まっていた。量子情報処理は物理学の原理に基づく情報処理であることから、量子情報処理の計算性能を探索し、そして向上させるためには、理論物理学の観点からの検討が必須である。また、量子情報処理を基礎科学的観点から取り扱う量子情報科学の発展に伴い、量子情報科学に着想を得た基礎物理学の発展が期待される。量子情報科学と統計力学の境界領域に位置づけられる研究としてこれまで、下記のような研究が実施されてきた。

### (1) いくつかの統計力学モデルにおけるエンタングルメント特性

1次元量子系における臨界現象とエンタングルメントエントロピーとの関係が調査されてきた[G. Vidal et al., Phys. Rev. Lett. **90**, 227902 (2003)]。また、厳密に基底状態を構成することが可能な2次元量子系としてValence-Bond-Solid(VBS)状態やはしご格子上的量子格子気体モデルに対するエンタングルメント特性(エンタングルメントエントロピーやエンタングルメントスペクトル)との関係が調査されてきた[H. Katsura and S. Tanaka et al., J Phys A. **43**, 255303 (2010), J. Lou and S. Tanaka et al., Phys. Rev. B **84**, 245128 (2011), S. Tanaka et al., Phys. Rev. A **86**, 032326 (2012)]。また、エンタングルメント特性をより理解するための一つの指標としてネステッド・エンタングルメントエントロピーと呼ばれる新しい量が定義され、それに関する調査も行われてきた[J. Lou and S. Tanaka et al., Phys. Rev. B **84**, 245128 (2011)]。

### (2) 量子アニーリングや断熱量子計算の提案

イジングモデルの基底状態を求める計算技術として、量子アニーリングと呼ばれる方法が提案された[T. Kadowaki and H. Nishimori, Phys. Rev. E **58**, 5355 (1998)]。はじめに強い横磁場を印加し、そのハミルトニアンでの基底状態を初期状態として設定し、徐々に横磁場を弱めることにより基底状態を得る方法である。また、対象とするハミルトニアンの基底状態を求める計算技術として、断熱量子計算と呼ばれる方法が提案された[E. Farhi et al., Science **292**, 472 (2001)]。これらに着想を得たハードウェアとして量子アニーリングマシンが発表され、時間に依存する横磁場イジングモデルを用いて実験的に基底状態を求めるといった試みが行われてきた[M. W. Johnson et al., Nature **473**, 194 (2011)]。

## 2. 研究の目的

上記の背景の中、量子情報科学と統計力学の境界領域を探索すべく、本研究課題「量子情報科学に立脚した統計力学の新しい展開」を推進することにした。上記の各項目に対応する目的は以下の通りである。

### (1) トポロジカル相転移がある統計力学モデルにおけるエンタングルメント特性

トポロジカル相転移がある統計力学におけるエンタングルメント特性(エンタングルメントエントロピーやエンタングルメントスペクトル)を調査する。特に、トポロジカル相を特徴づけるトポロジカル数とエンタングルメント特性の関係や、トポロジカル数が変化するトポロジカル相転移点を通るダイナミクスとエンタングルメント特性の関係について検討する。

### (2) 量子アニーリングの計算性能向上のための理論的考察

量子アニーリングの計算性能が悪化する要因として、エネルギーギャップがシステムサイズと共に指数関数的に減衰する場合が注目されている。これは量子1次相転移点で起こりうる現象であり、これを回避する方法を検討する。また、量子アニーリングの計算性能を向上させるためには、様々なパラメータ設定を適切に行う必要があり、その系統的な方法を検討する。また、量子アニーリングを用いた応用探索を行う。

## 3. 研究の方法

上記目的を達成するため、以下の方法を用いて検討した。それぞれの番号は上記のそれぞれの目的に対応する。

### (1) トポロジカル相転移がある統計力学モデルにおけるエンタングルメント特性

厳密に基底状態を構成することが可能であり、かつ、トポロジカル相転移を起こす1次元クラスタモデルに着目し、これに付加的に相互作用を導入することで、より様々なトポロジカル相転移を引き起こす統計力学モデルを構築した。構築した統計力学モデルについて、厳密な解析ならびにiTEBD(infinite time-evolving block decimation)を用いた数値計算によってトポロジカル量子相転移を調査した。また、トポロジカル量子相転移点を横切るスイープダイナミクスを検討し、これをiTEBD(infinite time-evolving block decimation)

を用いた数値計算によって実装した。

(2) 量子アニーリングの計算性能向上のための理論的考察ならびに、量子アニーリングの応用探索

- I. 基底状態を求めたいハミルトニアン（対象とするハミルトニアン）が階層構造を持つ場合について検討するため、階層構造を持つハミルトニアンを構築した。それに対して、時間依存するシュレディンガー方程式を用いて量子アニーリング性能を検討した。
- II. 量子1次相転移を起こす量子スピンモデルを提案した。また、そのモデルについて平均場近似に基づく解析を行った。

#### 4. 研究成果

上記方法を用いて、以下の成果を得た。それぞれの番号は上記のそれぞれの目的・方法に対応する。

(1) トポロジカル相転移がある統計力学モデルにおけるエンタングルメント特性

1次元クラスタモデルと呼ばれるトポロジカル相転移を起こす典型的な統計力学モデルが存在する。これに対して双対な相互作用を加え、更に、イジング相互作用を加えた一般化1次元クラスタモデルを提案した。このモデルには三つの相互作用が存在する。相互作用値を変えることにより量子相転移が生じる。我々はこのモデルの基底状態相図を厳密な解析及び数値計算を用いて完成させた。また、相転移点を横切る相互作用スイープによる動的特性は、相転移点の特性を反映する。我々は異なるトポロジカル数を持つ二つの量子相の間のスイープダイナミクス及び、同じトポロジカル数を持つ二つの異なる量子相の間のスイープダイナミクスを検討した。その結果、トポロジカルブロッキング現象と呼ばれる、トポロジカル系に特有の動的現象を観測した。これは初期状態のトポロジカル特性を反映した特徴的な動的現象と言える。また同様の解析を、トポロジカル量子数に変化する量子相転移の場合としない量子相転移の場合についてそれぞれ詳細に検討した。更に得られた結果の物理的意味を考察するため、相互作用が周期的に切断されているモデルについて同様の計算を行った。

(2) 量子アニーリングの計算性能向上のための理論的考察ならびに、量子アニーリングの応用探索

I. 量子エンタングルメントと量子アニーリングの性能の関係を調査した。エンタングルメントエントロピーが厳密に計算でき、かつ、その値を自在に動かすことができる最も簡単な場合として、階層構造を持つデータ行列の特異値分解を量子アニーリングで行うという問題設定で検討した。ここで階層構造を持つデータ行列とは、基本となる小さな行列の直積で与えられる行列を指す。階層数を大きくするに従い、エンタングルメントエントロピーは、一次元量子臨界系に見られる対数関数での発散が起こることを明らかにした。一次元量子臨界系におけるエンタングルメントエントロピーとエネルギーギャップの潰れ方との関係の類推から、エンタングルメントエントロピーと量子アニーリングの性能に相関があると予想したが、同一のエンタングルメントエントロピーの値を有する異なる行列について、量子アニーリングの性能が全く異なることが明らかになった。また、断熱量子計算や量子アニーリングを用いた特異値分解の量子ダイナミクスについては、階層的構造を持つ行列を対象とした場合と、行列要素がランダムな値の場合の両者について検討した。その結果、初期ハミルトニアン構造や行列要素の値を適切に設定することにより、断熱量子計算や量子アニーリングを用いた特異値分解の計算精度が向上することを示唆する結果を得た。

II. **Wajnflasz-Pick** モデルと呼ばれる一般化イジングモデルに対して、横磁場を導入することにより一次の量子相転移が生じる。これについて、横方向相互作用や **Wajnflasz-Pick** モデルの内部パラメータを調整することにより、転移の次数を変化させることが可能であることを確認した。これは、断熱量子計算や量子アニーリングにおけるボトルネックとして知られる一次の量子相転移を回避することができる方法となっている。また、断熱量子計算や量子アニーリングの計算効率を向上させるための前処理方法について、一般化横磁場イジングモデルを対象に考察した。その結果、組合せ最適化問題を表現するイジングモデルの設定方法を適切に行うことが重要であることを確認した。

#### 5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 10 件)

- 1) Daisuke Oku, Kotaro Terada, Masato Hayashi, Masanao Yamaoka, Shu Tanaka, Nozomu Togawa, A Fully-Connected Ising Model Embedding Method and Its Evaluation for CMOS Annealing Machines, IEICE Transactions, 印刷中
- 2) Kotaro Tanahashi, Shinichi Takayanagi, Tomomitsu Motohashi, Shu Tanaka, Application of Ising Machines and a Software Development for Ising Machines, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 88, 061010-1-10 (2019). DOI:10.7566/JPSJ.88.061010
- 3) Yuya Seki, Shu Tanaka, Shiro Kawabata, Quantum Phase Transition in Fully Connected Quantum Wajnflasz-Pick Model, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 88, 054006-1-12 (2019). DOI:10.7566/JPSJ.88.054006
- 4) 田中 宗, 松田 佳希, 量子アニーリングの動作原理と応用探索, 計測と制御, 査読有, Vol. 58, 203-208 (2019).
- 5) 田中 宗, 棚橋 耕太郎, 本橋 智光, 高柳 慎一, 量子アニーリングの基礎と応用事例の現状, 低温工学, 査読有, Vol. 53, 287-294 (2018).
- 6) 田中 宗, 量子アニーリング — 計算アルゴリズムの観点から —, 電子情報通信学会論文誌 C, 査読有, Vol. J101-C, 166-171 (2018).
- 7) 田中 宗, 量子アニーリングの基礎と応用事例, 知能と情報, 査読有, Vol. 30, 42-47 (2018).
- 8) Carlos Romero Muniz, Ryo Tamura, Shu Tanaka, and Victorino Franco, Applicability of scaling behavior and power laws in the analysis of the magnetocaloric effect in second-order phase transition materials, Physical Review B, 査読有, Vol. 94, 134401-1-13 (2016). DOI:10.1103/PhysRevB.94.134401
- 9) Takumi Ohta, Shu Tanaka, Ipepei Danshita, and Keisuke Totsuka, Topological and dynamical properties of a generalized cluster model in one dimension, Physical Review B, 査読有, Vol. 93, 165423-1-16 (2016). DOI:10.1103/PhysRevB.93.165423
- 10) Takumi Ohta, Shu Tanaka, Ipepei Danshita, and Keisuke Totsuka, Phase Diagram and Sweep Dynamics of a One-Dimensional Generalized Cluster Model, Journal of the Physical Society of Japan, 査読有, Vol. 84, 063001-1-4 (2015). DOI: 10.7566/JPSJ.84.063001

[学会発表] (計 51 件) うち招待講演 : 15 件、国際学会 : 20 件

- 1) 関 優也、田中 宗、川畑 史郎, 量子 Wajnflasz-Pick 模型の相転移現象, 日本物理学会 第 74 回年次大会, 2019 年
- 2) Yuya Seki, Shu Tanaka, Shiro Kawabata, Control of Phase Transitions in Wajnflasz-Pick model, American Physical Society March Meeting 2019(国際学会), 2019 年
- 3) Shu Tanaka, Recent Development and Future Perspective of Quantum Annealing, 24th Asia and South Pacific Design Automation Conference (ASP-DAC 2019)(招待講演)(国際学会), 2019 年
- 4) 田中 宗, 量子アニーリング及び関連技術の研究開発の現状と展望, 超スマート社会を切り拓く技術トレンドを探る 第 5 回:人工知能時代のコンピューティング基盤(招待講演), 2018 年
- 5) 田中 宗, アニーリング技術の基礎と応用発掘の取り組み事例, 第五回電子状態理論シンポジウム(招待講演), 2018 年
- 6) Shu Tanaka, Preprocessing of adiabatic quantum computation, D-Wave User Conference North America 2018(国際学会), 2018 年
- 7) 田中 宗, 量子アニーリングの現状と将来展望, 第 39 回日本公認会計士協会研究大会徳島大会 2018(招待講演), 2018 年
- 8) 田中 宗, 組合せ最適化問題のための量子アニーリングの現状と展望:量子技術を用いた新計算技術の挑戦, 平成 30 年度電気関係学会東北支部連合大会(招待講演), 2018 年
- 9) Yuya Seki, Shu Tanaka, Shiro Kawabata, Phase transitions in quantum annealing on a qudit system, 第 8 回半導体/超伝導量子効果と量子情報の夏期研修会, 2018 年
- 10) 田中 宗, 量子アニーリングや周辺技術の現状と展望:組合せ最適化処理の高速化・高精度化を目指して, サイエントフィックシステム研究会 HPC フォーラム 2018(招待講演), 2018 年
- 11) Shu Tanaka, Preprocessing of adiabatic quantum computation, Adiabatic Quantum Computing Conference 2018 (AQC-18)(国際学会), 2018 年
- 12) Ryo Tamura, Yoichiro Hashizume, Shu Tanaka, Adiabatic quantum computation to obtain singular vectors, Adiabatic Quantum Computing Conference 2018 (AQC-18)(国

- 際学会), 2018 年
- 13) 田中 宗, 量子アニーリングの理論と応用, The 2nd. cross-disciplinary Workshop on Computing Systems, Infrastructures, and Programming (xSIG 2018)(招待講演), 2018 年
  - 14) 田中 宗, 量子アニーリングにおける適切なハミルトニアン設計手法, 日本物理学会第 73 回年次大会, 2018 年
  - 15) 田中 宗, 量子アニーリング技術の最前線, 平成 30 年電気大会全国大会(招待講演), 2018 年
  - 16) Shu Tanaka, Basics and Applications of Quantum Annealing, 2nd Electron Devices Technology and Manufacturing Conference 2018(招待講演)(国際学会), 2018 年
  - 17) Yuya Seki, Shu Tanaka, Shun Kataoka, and Kazuyuki Tanaka, Effect of State transition of multi-level systems to Performance of Quantum Annealing, Adiabatic Quantum Computing Conference 2017(国際学会), 2017 年
  - 18) Ryo Tamura and Shu Tanaka, Quantum annealing for clustering of artificial data set by quantum Monte Carlo methods, Adiabatic Quantum Computing Conference 2017(国際学会), 2017 年
  - 19) Yoichiro Hashizume, Ryo Tamura, and Shu Tanaka, A construction method of initial Hamiltonian for singular value decomposition by quantum annealing, Adiabatic Quantum Computing Conference 2017(国際学会), 2017 年
  - 20) 田中宗, 量子アニーリングの現状と展望, 第一回 AI アカデミックネットシンポジウム(招待講演), 2017 年
  - 21) 田中宗, 量子アニーリングの研究最前線, 第二回 WIRP ワークショップ, 2017 年
  - 22) 田中宗, 量子アニーリングのこれまでとこれから -- ハード・ソフト・アプリ三方向からの協調的展開 --, 電気学会ナノエレクトロニクス新機能創出・集積化技術専門委員会「新原理コンピューティング」(招待講演), 2017 年
  - 23) 田中宗, 量子アニーリング:基礎研究から応用展開まで, 日本物理学会 2016 年秋季大会(招待講演), 2016 年
  - 24) 橋爪 洋一郎, 田中宗, 田村 亮, 量子アニーリングを用いた階層的構造のあるデータ行列に対する特異値分解, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016 年
  - 25) Shu Tanaka, Quantum Annealing Hybridized Thermal Annealing, Adiabatic Quantum Computing Conference 2016(国際学会), 2016 年
  - 26) Ryo Tamura and Shu Tanaka, Application of Quantum Annealing for Systems with Multi-Valued Variable, Adiabatic Quantum Computing Conference 2016(国際学会), 2016 年
  - 27) Yoichiro Hashizume, Shu Tanaka, and Ryo Tamura, Singular Value Decomposition Analysis of Fractal Images by Quantum Annealing, Adiabatic Quantum Computing Conference 2016(国際学会), 2016 年
  - 28) Yuichiro Minato, Shu Tanaka, and Ryo Tamura, The Performance of Quantum Annealing Depending on Classical Hamiltonian Representation -- Graph Coloring Problem --, Adiabatic Quantum Computing Conference 2016(国際学会), 2016 年
  - 29) 田中宗, 量子アニーリングが拓く機械学習と計算技術の新時代, 第 34 回量子情報技術研究会 (QIT34)(招待講演), 2016 年
  - 30) 関優也, 田中宗, 位相変化を伴う遷移を持つ量子 Wajnflasz-Pick 模型における量子相転移, 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年
  - 31) 田中宗, 量子アニーリング - 計算アルゴリズムの観点から -, 2016 年電子情報通信学会総合大会 (招待講演), 2016 年
  - 32) 田中宗, 次世代量子情報処理技術「量子アニーリング」の現状と展望, 第 5 回超異分野学会関東大会, 2016 年
  - 33) 田中宗, イジングモデル型情報処理の現状と展望, 早稲田大学高等研究所 Top Runners' Lecture Collection 「イジングモデル型情報処理デバイスの現状と展望 -- 物理学と情報科学の夢の架け橋 --」, 2016 年
  - 34) Shu Tanaka, Ryo Tamura, Kazuhiko Tanimoto, and Keisuke Totsuka, Multiple-q phases in a stacked triangular antiferromagnetic Heisenberg model with competing interactions under magnetic field, The international chemical congress of pacific basin societies 2015 (Pacifichem2015) (国際学会), 2015 年
  - 35) Ryo Tamura, Shu Tanaka, Takahisa Ohno, and Hideaki Kitazawa, Magnetic ordered structure dependence of magnetocaloric effect, The international chemical congress of pacific basin societies 2015 (Pacifichem2015) (国際学会), 2015 年
  - 36) Ryo Tamura and Shu Tanaka, Control of the Nature of the Phase Transition in Frustrated Systems, The 9th Intern. ational Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics (STAC-9) (国際学会), 2015 年
  - 37) 田中宗, 状態空間マッピングによる量子アニーリングの性能解析, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年

- 38) 橋爪洋一郎, 田中宗, 田村亮, 量子アニーリングを用いた特異値分解とエンタングルメントの研究, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年
- 39) 太田卓見, 田中宗, 段下一平, 戸塚圭介, 次元一般化クラスター模型の臨界性とダイナミクス, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年
- 40) 関優也, 田中宗, Wajnflasz-Pick 模型における量子相転移の制御, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年
- 41) 田中宗, 次世代情報処理技術「量子アニーリング」を用いたデータ駆動型社会イノベーション, イノベーション・ジャパン -- 大学見本市, 2015 年
- 42) Shu Tanaka, Quantum Annealing for Machine Learning, New Horizons of Quantum and Classical Information 2015 (NHQCI2015) - Quantum annealing, Error correcting codes, and Spin glasses - (国際学会), 2015 年
- 43) 田中宗, 量子アニーリングを用いたクラスタ分析, 量子制御技術の発展により拓かれる量子情報の新時代, 2015 年
- 44) 関優也, 田中宗, 西森秀稔, 一般化したイジング模型における量子相転移の次数の制御, 量子制御技術の発展により拓かれる量子情報の新時代, 2015 年
- 45) Shu Tanaka, Ryo Tamura, and Naoki Kawashima, Critical Phenomena in Two-Dimensional Frustrated Heisenberg Models, 20th International Conference on Magnetism (ICM2015), 2015 年
- 46) Ryo Tamura, Shu Tanaka, Takahisa Ohno, and Hideaki Kitazawa, A New Method for Maximizing Magnetic Refrigeration Efficiency in Antiferromagnets, 20th International Conference on Magnetism (ICM2015) (国際学会), 2015 年
- 47) Yuya Seki, Shu Tanaka, and Hidetoshi Nishimori, A Method to Control Order of Quantum Phase Transitions of Generalized Ising Models, Fourth Conference in Adiabatic Quantum Computing (AQC2015) (国際学会), 2015 年
- 48) Shu Tanaka, Takumi Ohta, Ipei Danshita, and Keisuke Totsuka, Topological Phase Transitions and Sweep Dynamics of a generalized cluster model in one dimension, New Perspectives in Spintronic and Mesoscopic Physics (NPSMP2015) (国際学会), 2015 年
- 49) 田中宗, 佐藤一誠, 栗原賢一, 宮下精二, 中川裕志, 量子アニーリングを用いたクラスタ分析, 第 32 回量子情報技術研究会 (QIT32), 2015 年
- 50) 太田卓見, 田中宗, 段下一平, 戸塚圭介, 次元一般化クラスター模型の基底状態と動的特性, 第 32 回量子情報技術研究会 (QIT32), 2015 年
- 51) 田中宗, 次世代量子情報処理技術「量子アニーリング」の現状と展望, 日本学術振興会超伝導エレクトロニクス 146 委員会 第 94 回研究会 (招待講演), 2015 年

[図書] (計 1 件)

- 1) Shu Tanaka, Ryo Tamura, and Bikas K. Chakrabarti, Quantum Spin Glasses, Annealing and Computation, Cambridge University Press, 2017 年

[その他]

ホームページ等

<http://www.shutanaka.com/>

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。