

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 24 年 5 月 18 日現在

機関番号：32601

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2008～2011

課題番号：20740225

研究課題名（和文） 量子アニーリングの大規模系に対する基礎付けと量子スピングラスへの応用

研究課題名（英文） Foundation of quantum annealing in large systems and its application to quantum spin-glasses

## 研究代表者

鈴木 正（SUZUKI SEI）

青山学院大学・理工学部・助教

研究者番号：30391999

研究成果の概要（和文）：量子アニーリングは量子揺らぎを利用して最適化問題の解を見出す最適化手法である。研究代表者は、量子アニーリングを行う際に障害となる量子相転移に注目し、相転移近傍での系のダイナミクスを調べることで量子アニーリングの有効性の一端を明らかにした。また、研究代表者は量子アニーリングの考えを活かして計算効率を高めた量子モンテカルロ法をフラストレーションを強く含んだ横磁場イジング模型に適用し、静的な物性を明らかにした。

研究成果の概要（英文）：Quantum annealing is an optimization method which seeks a solution of an optimization problem utilizing quantum fluctuations. The project leader revealed the validity of quantum annealing by focusing on the quantum phase transition, which hinders quantum annealing, and studying the dynamics near a quantum phase transition. In addition, he applied a quantum Monte Carlo method to the study of a frustrated transverse Ising model and revealed static physical properties. The present quantum Monte Carlo method used here involves an essence of quantum annealing and makes clever use of quantum fluctuations.

## 交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2009年度	700,000	210,000	910,000
2010年度	700,000	210,000	910,000
2011年度	700,000	210,000	910,000
年度			
総計	3,100,000	930,000	4,030,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：物性理論、統計力学、計算物理、量子計算

## 1. 研究開始当初の背景

(1)量子アニーリングは量子揺らぎを用いた最適化手法である。量子アニーリングの本質はハミルトニアンを時間変化させることによる、自明な基底状態から非自明なそれへの

断熱的な時間発展である。状態が基底状態のまま断熱的に時間発展するには、各時刻で基底状態と励起状態の間に有限のエネルギーギャップが空いていなければならない。巨視的な系の場合、このエネルギーギャップは量

量子相転移点で閉じることが知られており、量子相転移は量子アニーリングにとって決定的な役割を持っている。本研究が開始される頃、このような認識はある程度持たれていた。一方、量子相転移を越える時間発展は冷却原子の実験を契機として量子アニーリングとは全く別の観点からも関心を集めていた。実際に、量子相転移を起こす最も簡単な1次元横磁場イジング模型やランダム横磁場イジング模型に対して研究が行われ、研究者の注目が高まりつつある状況だった。研究代表者は、量子アニーリングを古典的な手法である熱アニーリングと対比すること、調べられていない模型における量子アニーリングを量子相転移の観点から調べることに関心を持っていた。

(2) 量子スピングラスは古くから研究対象となってきた模型であるが、計算手法の不十分さにより必ずしも十分には研究されてこなかった。本研究を開始する時点で、主に計算手法の発展や計算機資源の増大により、再び量子スピングラスに光を当てる環境は整いつつあった。特に量子アニーリングの研究に伴って、量子揺らぎをうまく利用して計算効率を上げるという新たな発想が生まれ、計算手法におけるある意味でのブレイクスルーがあったと言っても過言ではない。研究代表者は、かつては困難だった問題に挑戦するのにいい時だと考えていた。

## 2. 研究の目的

(1) 量子相転移点を越える時間発展に注目し、比較的取り組みやすい1次元ランダムイジング模型などにおいて、量子アニーリングにより系がどの程度励起するかを明らかにする。具体的には励起のアニーリング速度依存性を明らかにする。

(2) 量子揺らぎを用いて計算効率を高めた量子モンテカルロ法により量子スピングラスの静的・動的性質を調べる。静的性質としては、横磁場イジングスピングラス模型の温度-横磁場相図を求め、横磁場中でのスピングラス相の性質を明らかにする。動的性質としては、スピングラス相における横磁場の時間変化に伴う履歴現象を調べる。

## 3. 研究の方法

(1) 1次元の横磁場イジング模型はJordan-Wigner変換により自由フェルミオン系に移すことができる。この方法によりかなり大きな系でも時間に依存したシュレーディンガー方程式を数値的に解くことが可能になる。さらに、系が一樣な場合には厳密解も知られている。これらの数値的・解析的な解に基づいて、量子アニーリングによる系の励起を計算する。

(2) 量子スピングラスの研究に関しては量子

モンテカルロ法によるシミュレーションに頼る。ただし、本研究で使う量子モンテカルロ法は虚時間軸に沿ったスピンについてクラスター更新を行う。さらに、異なる横磁場での計算を平行して行い、時々状態を入れ替える量子レプリカ交換を導入する。ここに計算効率を上げるための工夫があり、量子揺らぎが活かされている。

## 4. 研究成果

(1) 量子アニーリングの有効性について

① 量子アニーリングは熱アニーリングとよく似ている。前者は量子揺らぎを時間とともに変化させるが、後者は熱揺らぎを変化させる。量子力学は計算に本質的な役割を果たせるか？という大きな問いに答えるためにも両者を比較し、対比によって量子アニーリングの有効性を示すことは重要である。研究代表者はKibble-Zurekの議論を用いて量子アニーリングと熱アニーリングを同じ枠組みで比較できることに気づき、1次元ランダムイジング模型において量子アニーリングの方が誤差の収束が速いことを解析的に示した。ここでKibble-Zurekの議論とは、温度や横磁場などのパラメータを変化させる速さと系の相間時間という二つの特徴的時間の釣り合いから、状態が凍結する状況を導くものである。Kibble-Zurekの議論をアニーリングの研究に持ち込んだのは本研究が初めてであり、数値計算以外の手法により量子アニーリングが熱アニーリングより有効であることを明確に示したのも本研究が初めてである。

② 量子アニーリングではハミルトニアンを連続的に時間変化させる。一方で、不連続的に時間変化させる場合の系の時間発展にも関心が集まっている。量子アニーリングの目的からすると不連続的な時間変化はナンセンスだが、それを調べることは巨視的な系の非平衡ダイナミクスというより基本的なことについて理解を深めることにつながる。研究代表者はイタリアのグループと共同で、1次元横磁場イジング模型において横磁場を瞬間的に変化させた場合の系の時間発展を調べた。その結果、物理量によって特徴的時間スケールを持って緩和するものとそうでないものがあることが明らかになった。

③ キタエフ模型は2次元蜂の巣格子上で定義される量子スピン系の一つであり、Jordan-Wigner変換により自由フェルミオンに移すことができるという著しい性質を持つ。また、基底状態は量子相転移を起こすことが知られている。研究代表者は一樣なキタエフ模型と非一樣なそれにおいて、模型に含まれるパラメータを量子臨界点を通過するように時間変化(アニーリング)させ、それによる励起エネルギーと準粒子励起密度を

アニーリング速度の関数として求めた。一般的なキタエフ模型に対して得られた結果は、量子臨界点の異方性により既存の理論では説明できないものであり、研究代表者らはキタエフ模型の結果から既存の理論を含む新しい一般論を作った。非一般的なキタエフ模型に対する結果は臨界点近傍での潤粒子の状態密度などから理解することに成功した。本研究は最適化問題とは直接関係ないが、量子相転移を越える時間発展に関する新しい知見を与えており、その意味で量子アニーリングの理解につながるものである。

④ 1次元、2次元のランダムイジング模型における量子アニーリングを Kibble-Zurek の観点から調べた。2次元以上の非自明な最適化問題に Kibble-Zurek の議論を適用したのは本研究が初めてである。本研究では数値計算により2次元系で量子アニーリングの方が熱アニーリングより誤差の収束が速いことを示したが、Kibble-Zurek の議論による結果と数値計算の結果の整合性が必ずしも取れていない。その意味で本研究は今後の研究に道筋をつけるものである。

(2)

① 研究代表者らはクラスター更新を取り入れた量子モンテカルロ法を用いて量子アニーリングとシミュレーティッドアニーリングを同時に行う「量子-熱アニーリング」を2次元スピングラス模型に適用した。その結果、「量子-熱アニーリング」の性質をシミュレーションによって明らかにすることができた。本研究で用いた計算手法は有限温度・横磁場中のスピングラスのシミュレーションを可能にする。研究計画にある横磁場スピングラスの平衡状態の研究にはこの手法が欠かせない。本研究により量子スピングラスの数値的研究手法が確立された。

② スピングラスを研究する前段階としてフラストレーションを強く含んだチェッカーボード格子上的横磁場イジング模型を研究した。この模型は四角酸のプロトン配位を記述しており、実験との比較が可能である。研究代表者らは量子揺らぎを活かして計算効率を高めた量子モンテカルロ法を用いて数値計算を行い、実験で得られている相図を定性的に説明することに成功した。さらに、低温低横磁場で現れるプロトンの秩序相と、高温強横磁場の無秩序相の間に中間相があることを数値計算で見つけ、それがフラストレーション系に特有の局所秩序状態(ユニットセルにある4個のスピンのうち2個が上を向いている状態)から来ていることを明らかにした。

(3) 本研究課題は横磁場イジング模型を対象としている。研究代表者は他の2名と共同で横磁場イジング模型に関する総合解説として“Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models”という書籍を執筆した。この書籍は本研究課題の内容を全て含んでいる。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計10件)

1) H. Ishizuka, Y. Motome, N. Furukawa, and S. Suzuki, “Quantum Monte Carlo study of the transverse-field Ising model on a frustrated checkerboard lattice”, J. Phys.: Conf. Ser. **320** 012054 (2011) 6ページ, 査読あり、DOI:10.1088/1742-6596/320/1/012054

2) Sei Suzuki, “Kibble-Zurek mechanism in simulated annealing and quantum annealing”, J. Phys.: Conf. Ser. **302** 012046 (2011) 6ページ, 査読あり、DOI:10.1088/1742-6596/302/1/012046

3) T. Hikichi, S. Suzuki, and K. Sengupta, “Non-adiabatic quench dynamics near anisotropic quantum critical point”, J. Phys.: Conf. Ser. **297** 012020 (2011) 6ページ, 査読あり、DOI:10.1088/1742-6596/297/1/012020

4) H. Ishizuka, Y. Motome, N. Furukawa, and S. Suzuki, “Quantum Monte Carlo study of the formation of molecular polarizations and the antiferroelectric ordering in squaric acid crystals”, Phys. Rev. B **84** 064120 (2011) 6ページ, 査読あり、DOI:10.1103/PhysRevB.84.064120

5) T. Hikichi, S. Suzuki, and K. Sengupta, “Slow quench dynamics of the Kitaev model: anisotropic critical point and effect of disorder”, Phys. Rev. B **82** 174305 (2010) 9ページ, 査読あり、DOI:10.1103/PhysRevB.82.174305

6) D. Rossini, S. Suzuki, G. Mussardo, G. E. Santoro, and A. Silva, “Long time dynamics following a quench in an integrable quantum spin chain: Local versus nonlocal operators and effective thermal behavior”, Phys. Rev. B **81** 144302 (2010) 17ページ, 査読あり、DOI:

10.1103/PhysRevB.82.144302

7) S. Suzuki, “Quench dynamics of quantum and classical Ising chains: from the viewpoint of the Kibble-Zurek mechanism” in Quantum Quenching, Annealing and Computation (Lecture Notes in Physics Vol. 802), edited by A. Das, A. Chandra and B. K. Chakrabarti, (Springer, Heidelberg, 2010) p. 114-143 30 ページ, 査読なし、DOI: 10.1007/978-3-642-11470-0

8) S. Morita, S. Suzuki, and T. Nakamura, “Quantum-thermal annealing with a cluster-flip algorithm”, Phys. Rev. E **79** 065701(R) (2009) 4 ページ, 査読あり、DOI: 10.1103/PhysRevE.79.065701

9) S. Suzuki, “Cooling dynamics of pure and random Ising chains”, J. Stat. Mech. P03032 (2009) 10 ページ, 査読あり、DOI: 10.1088/1742-5468/2009/03/P03032

10) S. Suzuki, “A comparison of classical and quantum annealing dynamics”, J. Phys.: Conf. Ser. **143** 012002 (2009) 9 ページ, 査読あり、doi: 10.1088/1742-6596/143/1/012002

[学会発表] (計 13 件)

招待講演

1) S. Suzuki, T. Hikichi and K. Sengupta, “Non-adiabatic quench dynamics near anisotropic quantum critical point”, Dynamics and Manipulation of Quantum Systems, University of Tokyo, 14 February 2011

2) S. Suzuki, “Kibble-Zurek mechanism in quantum annealing and simulated annealing”, International Symposium on Nanoscience and Quantum Physics 2011 (nanoPHYS '11), Tokyo Institute of Technology, 26 January 2011

3) S. Suzuki, T. Hikichi and K. Sengupta, “Non-adiabatic quench dynamics near anisotropic quantum critical point”, STATPHYS Kolkata VII, Saha Institute of Nuclear Physics, Kolkata, India, 28 November 2010

4) S. Suzuki, “Comparison of quench dynamics in quantum and classical systems”, International Workshop on Quantum Phase

Transition and Dynamics: Quenching, Annealing and Quantum Computation (QAQC), Saha Institute of Nuclear Physics, Kolkata, India, 7 February 2009

5) S. Suzuki, “A Comparison of classical and quantum annealing dynamics”, International Workshop on Statistical-Mechanical Informatics 2008 (IW-SMI2008), Sendai International Center, Sendai, Japan, 15 September 2008

一般講演

6) 鈴木正「2次元横磁場スピングラスの量子相転移」日本物理学会、富山大学、2011年9月21日

7) 鈴木正、引地匠、K. Sengupta「量子相転移点で終わる量子クエンチのダイナミクス」日本物理学会、大阪府立大学、2010年9月25日

8) S. Suzuki, D. Rossini and G. E. Santoro, “Quantum quench of a quantum Ising chain”, Dynamics and Manipulation of Quantum Systems, University of Tokyo, 14 October 2009

9) 鈴木正「横磁場イジング模型における量子クエンチとキンク密度の時間発展」日本物理学会、熊本大学、2009年9月26日

10) S. Suzuki, S. Morita and T. Nakamura, “Quantum annealing by a quantum Monte-Carlo method with cluster algorithm”, Dynamics and Manipulation of Quantum Systems, University of Tokyo, 21 October 2008

11) 鈴木正、森田悟、中村統太「クラスターアルゴリズムによる量子アニーリング」日本物理学会、岩手大学、2008年9月20日

ポスター発表

12) 鈴木正「2次元横磁場イジングスピングラスの量子モンテカルロシミュレーション」日本物理学会、第67回年次大会、関西学院大学、2012年3月25日

13) S. Suzuki, T. Hikichi and K. Sengupta, “Quench dynamics of the uniform and non-uniform Kitaev model”, Statistical Physics of Quantum Systems, University of Tokyo, 2 August 2010

[図書] (計 1 件)

S. Suzuki, J. Inoue, and B. K. Chakrabarti,

“Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models”, Springer, in press (掲載決定済み)

6. 研究組織  
(1) 研究代表者

鈴木 正 (SUZUKI SEI)  
青山学院大学・理工学部・助教  
研究者番号：30391999