

博士学位論文

大規模な組合せ最適化問題に対する
量子アニーリングマシンの活用方法に関する研究

東北大学大学院情報科学研究科

応用情報科学専攻

岡田俊太郎

B7ID4004

(令和元年度)

目次

第 1 章	序論	5
1.1	本論文の背景	5
1.2	本論文の目的	11
1.3	本論文の構成	11
第 2 章	量子アニーリングと Ising モデルの基底状態探索	13
2.1	本章の概要	13
2.2	量子アニーリングの概要	13
2.3	組合せ最適化問題の Ising 表現	15
2.4	Ising モデルの基底状態探索の難しさ	18
第 3 章	D-Wave マシンの概要	21
3.1	本章の概要	21
3.2	D-Wave マシンの制約	21
3.3	D-Wave マシンによる最適化の流れ	23
3.4	今後の D-Wave マシンの発展	25
第 4 章	大規模問題への量子アニーリングマシンの適用	28
4.1	本章の概要	28
4.2	ハイブリッド手法の先行研究と課題	28
4.3	マイナー埋込みアルゴリズムの先行研究	30
4.3.1	先行研究の概観	30
4.3.2	マイナー埋め込みの定義	31
4.3.3	Cai のアルゴリズムの詳細	32
4.4	部分問題の埋込アルゴリズムの提案	33
4.5	埋め込み性能の評価	36
4.6	近傍範囲の拡大による解精度の改善	39
4.7	本章のまとめ	45
第 5 章	整数変数で定義された最適化問題の分割方法	47
5.1	本章の概要	47
5.2	one-hot 表示と部分問題分割における課題	47
5.3	one-hot 制約下の分割に関する先行研究	48
5.4	効率的な分割方法の提案	49
5.4.1	整数分割の方法	49

5.4.2	2 値分割の方法	52
5.5	評価結果	54
5.5.1	解精度の比較	54
5.5.2	部分問題に含まれる許容解の数	57
5.6	考察	60
5.7	本章のまとめ	64
第 6 章	量子揺らぎのスケジューリングによる高速化	66
6.1	本章の概要	66
6.2	断熱定理の導出	66
6.3	アニーリング時間のスケジューリング依存性	69
6.4	長時間極限における失敗確率のスケジューリング依存性	72
6.5	グローバー問題のスケジューリング	74
6.5.1	ハミルトニアンの特角化	75
6.5.2	アニーリング時間のスケジューリング依存性	77
6.5.3	数値計算による確認	79
6.6	数分割問題のスケジューリング	82
6.6.1	問題設定	82
6.6.2	アニーリング時間のスケジューリング依存性	82
6.6.3	数値計算による確認	84
6.7	SA の量子系へのマッピング	86
6.7.1	マスター方程式の概要	86
6.7.2	マスター方程式と虚時間シュレーディンガー方程式の対応	88
6.8	虚時間シュレーディンガー方程式の断熱定理	90
6.9	虚時間シュレーディンガー方程式によるグローバー問題の QA	92
6.9.1	アニーリング時間のスケジューリング依存性	93
6.9.2	線形スケジューリングでの成功確率	93
6.9.3	数値計算による確認	99
6.10	QA-IT における効率的なスケジューリングの考察	102
6.11	本章のまとめ	103
第 7 章	XX 量子揺らぎの導入による高速化	105
7.1	本章の概要	105
7.2	先行研究	105
7.3	鈴木-トロッター展開と Non-stoquastic Hamiltonian	106
7.4	全結合 XX 相互作用の平均場理論による取り扱い	108
7.5	1 次元 Ising モデルの場合	110
7.5.1	自由エネルギーと鞍点方程式	110
7.5.2	横磁場のみを印加した場合: $\Gamma_2 = 0$	111
7.5.3	反強磁性相互作用を印加した場合: $\Gamma_2 < 0$	112
7.5.4	強磁性相互作用を印加した場合: $\Gamma_2 > 0$	113
7.6	1 次元 XY モデルの場合	115

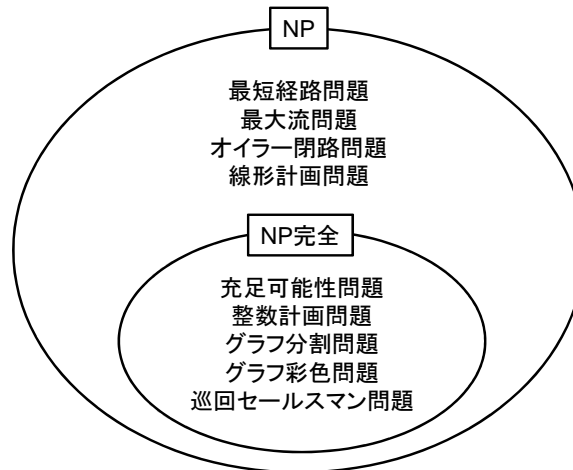
7.6.1	自由エネルギーと鞍点方程式	115
7.6.2	反強磁性相互作用を印加した場合: $\Gamma_2 < 0$	116
7.6.3	強磁性相互作用を印加した場合: $\Gamma_2 > 0$	117
7.7	本章のまとめ	120
第 8 章	one-hot 表示した整数最適化問題の高速解法	121
8.1	本章の概要	121
8.2	先行研究	121
8.3	Potts モデルのハミルトニアン of Ising 表現	122
8.4	全結合強磁性 Potts モデルの QA	123
8.4.1	問題設定	123
8.4.2	自由エネルギーとオーダーパラメータ	124
8.4.3	オーダーパラメータの量子揺らぎ依存性	124
8.5	half-hot 制約下の繰り返し最適化	126
8.6	全結合強磁性 Potts モデルへの適用	127
8.6.1	繰り返し最適化による基底状態への到達	127
8.6.2	half-hot 制約下の相転移の次数: Q が偶数の場合	128
8.6.3	half-hot 制約下の相転移の次数: Q が奇数の場合	129
8.6.4	half-hot 制約下の相転移の次数: $Q \rightarrow \infty$ の場合	130
8.7	全結合 Potts グラスモデルへの適用	133
8.7.1	half-hot 制約下の自由エネルギーと鞍点方程式: $Q \rightarrow \infty$ の場合	133
8.7.2	2 回目以降の最適化問題について	135
8.8	本章のまとめ	136
第 9 章	結論と今後の展望	138
9.1	本論文の要約	138
9.2	今後の展望	140
付 録 A	one-hot 表示におけるパラメータ λ の決め方	141
A.1	λ の下限を求める基本的な考え方	141
A.2	反強磁性 Potts モデルに対する λ の下限	142
A.3	強磁性 Potts モデルに対する λ の下限	142
A.4	Potts グラスモデルに対する λ の下限	143
付 録 B	グローバー問題の QA-IT における $\Delta\phi_{10}(u)$ の近似	147
付 録 C	鈴木-トロッター展開	149
C.1	QA-TMF の有効ハミルトニアン	149
C.2	XX 相互作用を導入した場合	150
付 録 D	1 次元 Ising モデルと XY モデルの分配関数の導出	152
D.1	1 次元強磁性 Ising モデルの分配関数	152
D.2	1 次元 XY モデルの分配関数	155

D.2.1	Majorana 場を用いる方法	155
D.2.2	Jordan-Wigner 変換を用いる方法	157
付 録 E	one-hot 表示した Potts モデルの自由エネルギーの導出	159
E.1	one-hot 制約下の全結合強磁性 Potts モデルの自由エネルギーの導出	159
E.2	half-hot 制約下の全結合強磁性 Potts モデルの自由エネルギーの導出	161
E.3	half-hot 制約下の全結合 Potts グラスモデルの自由エネルギーの導出	163
付 録 F	全結合 XX 相互作用を導入した全結合強磁性 Potts モデルの QA	175
付 録 G	横磁場を印可した SK モデルの自由エネルギーの導出	182
謝辞		186
参考文献		187
研究業績		197

第1章 序論

1.1 本論文の背景

組合せ最適化問題とは、離散変数によって定義された評価関数と制約条件が与えられたとき、制約条件を満たす範囲内で評価関数を最小化或いは最大化する問題である。一般的に、最大化問題の評価関数に -1 を掛ければ最小化問題として書き換えることができるため、本論文では最小化に限定して話を進める。評価関数の値に対して目標値が与えられている場合は、評価関数の値が目標値以下となる組合せの存在に対して yes または no で答える問題に単純化され、決定問題と呼ばれる。組合せ最適化問題や決定問題が与えられたとき、それらを解くのにどれ程の計算ステップを要するかは非常に重要な問題である。計算量理論では、一般の計算問題に対して、問題の入力サイズ N （例えば、組合せ最適化問題では評価関数を定義する離散変数の数）の増加と共に計算ステップ数がどのように変化するかが研究されており、計算ステップ数 T が入力サイズ N に対して多項式的な増加に抑えられる場合 $T \sim O(N^k)$ と指数関数的に増加する場合 $T \sim O(k^N)$ に大別される。ここで、 k は N に依存しない定数を表す。計算ステップを議論するためには、問題进行处理する機械を定める必要がある。まず、決定問題の分類について簡単に説明すると、通常のコンピュータのように解を逐次的に探索する決定性計算機によって多項式時間で解ける問題はクラス P (Polynomial) と呼ばれる。一方で、クラス NP (Nondeterministic Polynomial) とは、各計算ステップで Q 個の分岐を許し、 n ステップにおいて分岐した Q^n 個の解を同時に処理可能な仮想的な計算機（非決定性計算機）を用いて多項式時間で解ける問題の集合である。非決定性計算機を用いた場合、 N 個の 2 値変数によって定義された決定問題は、各ステップで 1 つの変数の値を固定する分岐を生成すれば、 N ステップの処理で全ての解をチェックできる。離散変数で定義される決定問題の多くは全ての解の列挙によって解くことができるため、クラス NP に属する。また、2 つの問題 A と B の難しさを比較する重要な概念として多項式時間還元がある。つまり、 A の任意の問題例 a を B の問題例 b に多項式時間で変換でき、且つ a と b の yes または no の答えが一致する場合、 A は B に多項式時間還元可能という。この場合は、 B を効率的に解くアルゴリズムが存在すれば A も多項式時間で解けることになるため、 B は A と同等以上に難しい問題であるとされる。NP の中で最も難しい決定問題は NP 完全と呼ばれ、NP に属する任意の問題を問題 A に多項式時間還元可能なとき、問題 A は NP 完全であると定義される。最初に NP 完全に属することが証明された問題は充足可能性問題（論理式が与えられたとき、その論理式を満たすブール変数の組合せが存在するかを答える問題）であり、充足可能性問題を起点に多項式時間還元を適用することで様々な NP 完全問題が発見された。定義から明らかなように、NP 完全問題の中の 1 つでも決定性計算機を用いて多項式時間で解く方法が発見されれば、 $P=NP$ となる。NP は決定性計算機より強力な機械を用いて多項式時間で解ける問



注1. 上記の問題は全て決定問題として表現した場合の分類を示す
 注2. NP完全を最小化或いは最大化問題として表すとNP困難となる

図 1.1: 決定問題の分類

題の集合であるため $P \subseteq NP$ は自明だとして、 $P=NP$ なのか $P \neq NP$ なのかは未解決問題である。ただし、現状では $P \neq NP$ を信じている人が多いようで、決定性計算機を用いて NP 完全問題を多項式時間で解くことはできないと予想されている。 $P \neq NP$ を仮定した場合の関係を図 1.1 に示す。ここまでは決定問題の分類を示したが、評価関数の最小化或いは最大化を扱う最適化問題が対象となる分類として NP 困難がある。NP 困難は、NP に属するとは限らないが、全ての NP 問題を多項式時間還元可能な問題の集合と定義される。この定義から、NP 困難問題は NP 完全問題と同等以上に難しい。例えば、巡回セールスマン問題において、複数の都市と都市間の距離が与えられたとき、全ての都市を 1 度訪問する巡回路の中で移動距離が最小の経路を求める問題は NP 困難に属するが、移動距離が目標値以下の経路が存在するかを答える問題は NP 完全である。明らかに、巡回セールスマン問題の NP 困難バージョンが解ければ NP 完全バージョンに即座に回答することができる。NP 完全問題と同様に、決定性計算機を用いて NP 困難問題を多項式時間で解くことは絶望視されており、計算ステップ数は指数関数的に増加すると予想されている。

そこで、厳密解の取得を諦めて、高精度な近似解を現実的な計算時間で得るためのアルゴリズムがオペレーションズリサーチの分野で活発に研究されてきた。NP 困難に属する組合せ最適化問題は多くの実用的な場面で表れることが知られており、例えばグラフ分割問題は VLSI のレイアウト設計、最大クリーク問題はコミュニティ検出、巡回セールスマン問題は配送計画に利用することができる。計算量理論では最適解への到達保証を前提とした計算ステップを評価しているが、実用上は高精度な近似解を現実的な時間で得られれば十分な価値が認められることも多い。近似解を探索するアルゴリズムの中で精度保証がないものはヒューリスティクス（発見的手法）と呼ばれ、その中でも問題の構造に依存せずに汎用的に適用可能なものはメタヒューリスティクスと呼ばれる。メタヒューリスティクスの代表的な例としては、近傍探索をベースとした山登り法やタブーサーチ、生物の進化にヒントを得た遺伝的アルゴリズム、昆虫の群れに着想を得た粒子群最適化が挙げられる。この中で最も単純な方法は山登り法である。山登り法では暫定解の初期値をランダム

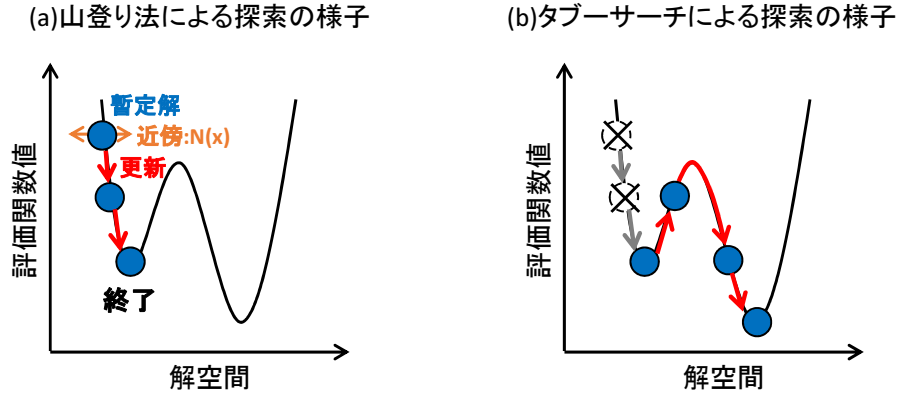


図 1.2: 山登り法とタブーサーチによる近似解の探索

に選択し、現在の暫定解 x に対する近傍 $N(x)$ を定義した上で、近傍 $N(x)$ の中で評価関数を最小化する解 $x' \in N(x)$ への更新を繰り返す。最終的に、 $x = x'$ となったときに山登り法は処理を終了する [図 1.2(a) 参照]。終了時点で得られた解は定義された近傍の範囲で評価関数を最小化するものであって、解空間全体における最小値と一致するとは限らないため、局所最適解と呼ばれる。最も簡単な近傍の定義は、離散変数をランダムに 1 つ選択し、選択した 1 つの変数の更新を近傍に含めるものである。当然ながら、複数の離散変数の同時更新を近傍に含めた方が山登り法で達成できる解精度は改善するが、近傍範囲の中で評価関数値を最小化する解を見つけ出す時間は増加する。近傍範囲の拡大による性能改善は *large-neighborhood local search* [1, 2] としてこれまでに検討されてきた。また、近傍探索で高精度解を得るための別の方策として、局所最適解に到達した後に、さらに精度が高い他の局所最適解をどのように探していくかも重要である。タブーサーチでは局所最適解から脱出する工夫として、探索済みの解への更新を禁止するとともに、評価関数の値が増加する場合でも現在の暫定解以外の近傍解に更新する [図 1.2(b) 参照]。メタヒューリスティクスの多くが近傍探索の繰り返しによって暫定解を改善する戦略をとるが、局所最適解に陥った場合の対策は高精度解を得るにあたって非常に重要な要素である。

一方で、物性物理学では低温における物質の性質が研究の対象となることが多く、エネルギーが低い状態を見つけ出すことが重要な課題として認識されてきた。その中でも、磁性研究のためのモデルとして導入された Ising モデルの基底状態探索は、特定の場合を除いて NP 困難問題であることが知られている [3]。ここで、Ising モデルのハミルトニアン \mathcal{H}_0 (系のエネルギーを表す関数) はスピン変数 $\sigma_i \in (+1, -1)$ の関数として定義され、基底状態とはエネルギーを最小にするスピン変数の組合せを指す。最適化問題の文脈で言えば、ハミルトニアンが評価関数に対応し、エネルギーが評価関数値に対応し、スピン変数が離散変数に対応し、基底状態が最適解に対応する。このことから、物理学に根差した最適化手法もこれまでに多く提案されてきた [4–12]。これらの中で最も広く使われている方法がシミュレーテッド・アニーリング (SA) [4] であろう。SA は金属の焼きなましにヒントを得た方法で、近傍探索をベースとするメタヒューリスティクスである。金属の焼きなましとは、結晶欠陥の少ない綺麗な金属材料を得るために、金属材料を高温に熱した後に徐冷する作業のことを指す。SA ではコンピュータ上で疑似的に焼きなましを実行する目的で疑似的な温度を導入し、近傍解への遷移確率を温度によって制御する。大雑把に言え

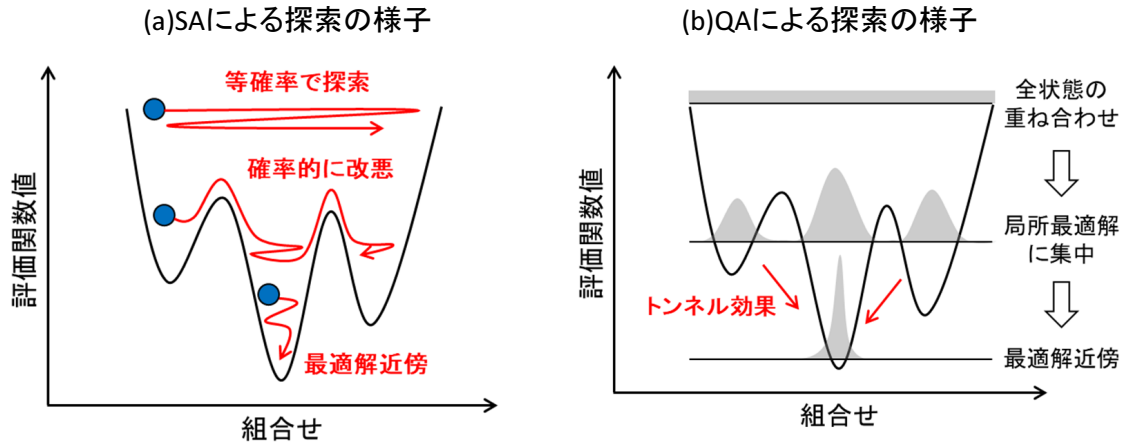


図 1.3: SA と QA による最適解探索の概念図

ば、温度が高い場合はエネルギーが高い近傍解への遷移を高い確率で許し、温度が下がるにつれてエネルギーが減少する近傍解への遷移に限定していく。その結果、非常に高い温度が設定される SA の初期では、高いエネルギーから低いエネルギーまで全ての解が等確率で表れることになり、暫定解のエネルギーの揺らぎ（分散）が大きくなる。一方で、温度が下がってくると暫定解は低いエネルギーに集中するようになり、エネルギーの揺らぎ（分散）は小さくなる。このようなエネルギーの揺らぎは温度によってもたらされたものであり、温度揺らぎと呼ばれる。先程説明したように近傍探索で高精度解を得るためには、局所最適解から抜け出してさらにエネルギーが低い局所最適解を探しに行くことが重要である。SA では温度に依存してエネルギーが増加する近傍解への遷移が発生するため、評価関数の山を登って他の局所最適解を探索しに行ける [1.3(a) 参照]。また、SA は非常にゆっくり温度を下げていくと高い確率で最適解に到達できることが証明されている [13]。本論文で着目する量子アニーリング (QA) [7] は SA に着想を得て考案された方法であり、量子力学的な揺らぎを導入して基底状態を探索する。QA においても SA の温度と同様に揺らぎを制御するパラメータが導入される。初期状態として全ての解を等確率で同時に探索する重ね合わせ状態を用意した後、パラメータを制御して徐々にエネルギーの低い解に確率を収束させていく。最終的に基底状態に確率を収束させるためには、QA の途中段階で局所最適解に溜まっている確率を回収する必要があるが、QA では量子力学的なトンネル効果を利用して局所最適解からの脱出を図る。QA による最適解の探索の様子を概念的に示したのが図 1.3(b) である。SA と QA では局所最適解から抜け出す方法が異なるため、SA と QA のいずれを用いた方が効率的なのかは解きたい問題に依存すると考えられている。量子揺らぎの導入による QA の優位性についてはこれまで多くの研究が報告されている [14-21]。特に先行研究 [16,17] では評価関数に含まれる谷の構造に着目しており、滑らかで幅広い谷をもつ評価関数では SA が優位となるが、急峻で深い谷をもつ評価関数では QA が優位となることが示されている。

QA は今から 20 年以上も前に提案された手法ではあるものの、D-Wave Systems Inc. による QA の物理的な実装 [22] の成功を契機として、近年非常に大きな注目を集めている。この量子アニーリングマシン（以降、D-Wave マシンと呼ぶ）は、QA を用いて Ising モデルの基底状態を探索する。多くの NP 困難問題が Ising モデルの基底状態探索として表現

できることが知られており [23], また全ての NP 問題が Ising モデルの基底状態探索に多項式時間還元可能であることを考えると, Ising モデルの基底状態探索を高速且つ高精度に解くマシンの価値は非常に大きい. D-Wave マシンを用いて実験的に QA と SA の性能を比較する研究も行われており [24–28], 先行研究 [25] では鋭く深い谷をもつ評価関数で D-Wave マシンの性能が SA に対して優位となる例が示された. さらに, 実用的な問題に対する D-Wave マシンの適用についても企業を巻き込んで活発に検討されており, 回路の故障解析 [31], 機械学習 [34], 交通流最適化 [35], 工場における無人搬送車の効率化 [41], 材料開発 [42] 等を筆頭に数多く報告されている [29–43]. このように, D-Wave マシンは広いクラスの組合せ最適化問題に適用可能な汎用的なマシンとしての可能性を秘めており, 実応用の観点からも大きな期待を集めている.

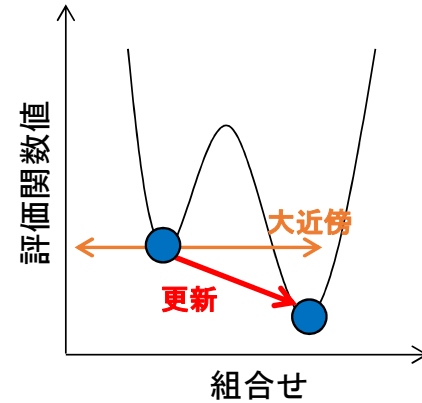
しかしながら, D-Wave マシンが取り扱える問題には強い制約があり, 大規模な組合せ最適化問題を直接解くことは難しい. D-Wave マシンで組合せ最適化問題を解く場合は, 解きたい問題を Ising モデルの基底状態探索として定式化 (以降, 本論文では Ising 表現と呼ぶ) する必要がある. また, その後に「解きたい Ising モデルのスピン変数と変数間の相互作用」と「D-Wave に実装された qubit と qubit 間相互作用」の対応関係を取り, 解きたい Ising モデルを D-Wave マシン上で表現しなければならない. しかしながら, D-Wave マシンには以下に示す 2 つの制約:

- qubit 数の制約
- qubit 間相互作用の制約

が存在するため, これらの対応関係を取るのが難しくなる. これら制約の影響と対処法については次章以降で詳しく説明するが, 1 番目の制約によって一度に取り扱えるスピン変数の数の上限が決定し, 2 番目の制約に適合させるために解きたい問題を冗長な形で表現し直さなければならない. 例えば, 現行の D-Wave マシンには 2,048qubit が実装されているが, 任意のスピン変数間で 2 次の相互作用をする Ising モデルでは最大で 64 変数までしか取り扱えない. そこで, 現在活発に研究されているのが従来の最適化手法と D-Wave マシンによる最適化を組み合わせたハイブリッド手法である [44–57]. その中で最も広く使われており, 且つシンプルな考え方に基づいた方法が *qbsolv* [45] である. *qbsolv* は大規模問題を D-Wave マシンで取り扱えるサイズの部分問題に分割し, 部分問題の最適化を繰り返すことで原問題の近似解を求める [図 1.4(a) 参照]. この方法では, 山登り法の近傍範囲を拡張するために D-Wave マシンを利用しており, 近傍探索の性能改善で検討されてきた *large-neighborhood local search* [1, 2] の一種と解釈することができる [図 1.4(b) 参照]. ここで問題となるのが, 2 番目の制約を回避しながら如何に効率的に部分問題を取り扱うのかということである. 実装上の難しさから D-Wave マシンでは近くに配置された少数の qubit 間の相互作用しか表現できない. このため, 解きたい問題を Ising 表現したときに, 多くのスピン変数と相互作用するものが存在する場合はそのままの形では取り扱えない. そこで, 一般的には 1 つのスピン変数に複数の qubit を割り当て, スピン変数間の相互作用を複数の qubit に分散させる処理が行われる. 例えば, 10 個のスピン変数と相互作用するスピン変数があった場合, qubit を 2 個割当てて各 qubit は 5 個のスピン変数との相互作用だけを表現すれば良くなる. この処理はマイナー埋め込みと呼ばれ, この処理の良し悪しが D-Wave マシンで取り扱える部分問題のサイズに大きな影響を与える. 部分

(a) *qbsolv*による大規模問題の最適化

(b) 近傍範囲の拡張の狙い

図 1.4: 代表的なハイブリッド手法: *qbsolv* の処理と狙い

問題を繰り返し最適化する中で、マイナー埋め込み処理も繰り返し実行する必要があるため、ハイブリッド手法では大きな部分問題を高速に埋め込むアルゴリズムが要求されるが、現状ではこの要件を満たす方法は存在しない。これが D-Wave マシンを大規模問題に適用するにあたっての主要課題の一つであり、2 番目の制約を回避しながら部分問題を効率的に取り扱う方法を構築することが本論文の主要なテーマである。

また、D-Wave マシン特有の課題ではないが、Ising モデルベースの最適化処理に共通する課題として整数変数で定義される組合せ最適化問題の取り扱いがある。グラフ分割問題やグラフ彩色問題、巡回セールスマン問題に代表されるように、多くの組合せ最適化問題の評価関数や制約条件はスピン変数のような 2 値変数ではなく、整数変数によって自然に定義される。評価関数や制約条件が整数変数で定義される問題を、2 値変数で定義される問題と区別するために、本論文では整数最適化問題と呼ぶことにする。整数最適化問題を Ising モデルベースで処理するためには、整数変数を 2 値変数を用いて表現し直す必要がある。最も広く利用されているのが one-hot 表示であり、整数変数 $S_i \in (1, 2, \dots, Q)$ に対して Q 個の 2 値変数 $\{x_{qi}\}_{q=1,2,\dots,Q}$ を割当てて (詳細は第 2 章を参照)。しかしながら、元々 Q 個の整数状態しか存在しなかったものに対して、one-hot 表示では 2^Q 個の組合せが発生することになり、 $(2^Q - Q)$ 個の解は元の整数変数との対応をもたない無効な解となる。このような one-hot 表示の冗長性に起因して、Ising 表現した大規模な整数最適化問題を部分問題に分割する際には注意が必要となる。つまり、元の整数変数と対応をもつ組合せが部分問題の解空間に多く含まれるように工夫しなければならない。本論文では、one-hot 表示を用いて Ising 表現した整数最適化問題に対して、D-Wave マシンの 2 番目の制約を回避しながら、*large-neighborhood local search* を効率的に実行する方法も提案する。

1.2 本論文の目的

本論文の主目的は、D-Wave マシンの制約を回避して、大規模な整数最適化問題の高精度解を得るための1つの枠組みを構築することである。これを達成するにあたっては、部分問題サイズと処理時間を両立する埋め込みアルゴリズムの提案が最も重要となる。埋め込みアルゴリズムの目標を定めるにあたっては、D-Wave マシンが発展途上の技術であり、将来的に qubit 数や相互作用に関する制約が緩和される可能性を考慮しなければならない。実際に、2011 年に 128qubit を搭載した D-Wave One が発表されて以来、D-Wave マシンに実装される qubit 数は約 2 年ごとに倍増しており、現行の D-Wave2000Q では 2,048qubit が実装されている。また、qubit 間の相互作用に関しても、現行では 1qubit あたり最大で 6 個の qubit との相互作用しか表現できないが、最大で 15 個の qubit との相互作用を表現できるようにアップデートすることが検討されている。これらのことを考慮すると、埋め込みアルゴリズムの処理時間の qubit 数依存性が小さく、且つアルゴリズムの中身が qubit 間相互作用の詳細に依存しないことが重要だと言える。部分問題サイズに関しては、qubit 数と相互作用の制約が決まれば、D-Wave マシンに埋め込み可能な部分問題サイズの上限が解きたい問題毎に決まるため、この上限が目標値となる。本論文では、まず先行研究をもとに qubit 間相互作用の詳細に依存しない部分問題埋め込みアルゴリズムを提案し、処理時間と部分問題サイズの qubit 数依存性を評価する。また、提案アルゴリズムを用いることで従来手法に対して高精度な解が得られることを示す。さらに、提案したアルゴリズムをベースに効率的な整数最適化問題の分割方法を検討し、これを用いることでさらに高精度な解が得られることを確認する。

1.3 本論文の構成

本論文は全 8 章から成り、全体の構成は以下の通りである。

第 2 章では QA の概要を説明した後、組合せ最適化問題を Ising 表現する方法を述べる。また、Ising モデルの基底状態探索の難しさについてスピングラス理論の観点から簡単に説明する。

第 3 章では D-Wave マシンの構成や制約について説明した後、組合せ最適化問題の処理フローについて概説する。

第 4 章は部分問題サイズと処理時間を両立した埋め込みアルゴリズムの提案が主題であり、先行研究をベースに新たなアルゴリズムを検討した後、提案アルゴリズムの性能を評価する。また、提案アルゴリズムを用いて大きな部分問題を繰り返し最適化することで、従来の方法に対して高精度な解が得られることも確認する。

第 5 章では、第 4 章で提案したアルゴリズムを発展させて、大規模な整数最適化問題を効率的に解くための分割方法を検討する。また、整数最適化問題の構造に適した部分問題を抽出することで高精度な解が得られることも示す。

ここまでの本論文の主要部分であり、第 6 章以降の後半では QA の高速化に関する理論的な研究がまとめられている。

第 6 章では、量子揺らぎを制御するパラメータのスケジューリングを工夫して QA を高速化することを検討する。また、虚時間シュレーディンガー方程式とマスター方程式の対応関係に着目し、SA における疑似温度の効率的なスケジューリングについても考察する。

第7章では、量子揺らぎの導入方法を変更した場合の QA 性能の変化を理論的に解析する。SA とは異なり、QA は量子揺らぎを導入する方法の自由度が高く、これを上手く利用することで SA よりも幅広いクラスの問題を効率的に解けるようになると期待される。

第8章では、Ising モデルベースで整数最適化問題を解く場合の高速解法を検討する。ここで提案する方法は QA と SA の両方に対して適用可能な汎用的なものである。

第2章 量子アニーリングと Ising モデルの基底状態探索

2.1 本章の概要

QA は SA に着想を得て提案された方法であり，連続変数の最適化問題から組合せ最適化問題まで幅広い最適化問題に適用可能なメタヒューリスティクスである．本章の第 2.2 節では QA の概要を説明し，局所最適解からの脱出方法の違いに起因する SA との性能差を示す．第 2.3 節では組合せ最適化問題を Ising モデルの基底状態探索として定式化 (Ising 表現) する方法をいくつかの例を用いて説明する．また，第 2.4 節では Ising モデルの基底状態探索の難しさについて，スピングラス理論の観点から簡単に説明する．

2.2 量子アニーリングの概要

QA は一般の最適化問題に適用可能なメタヒューリスティクスであり，解きたい最適化問題の評価関数を物理系のハミルトニアン (エネルギー関数) に見立てて基底状態を探索する．最適化問題の評価関数を \mathcal{H}_0 とおくと，QA のハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}}_{QA}(t) = s(t)\hat{\mathcal{H}}_0 + [1 - s(t)]\hat{\mathcal{H}}_q, \quad (2.1)$$

と書くことができる．ここで， $\hat{\mathcal{H}}_q$ は量子揺らぎを導入するために追加されたハミルトニアンであり， $\hat{\mathcal{H}}_q$ を導入したことに対応して評価関数は量子力学的な演算子 $\hat{\mathcal{H}}_0$ として表現されることになる．また，アニーリング時間を τ とおくと，アニーリング開始時点で $s(t=0) = 0, \hat{\mathcal{H}}_{QA}(t=0) = \hat{\mathcal{H}}_q$ となり，終了時点では $s(t=\tau) = 1, \hat{\mathcal{H}}_{QA}(t=\tau) = \hat{\mathcal{H}}_0$ となるように制御される． $\hat{\mathcal{H}}_q$ は解きたい問題に依存して様々なものを用いることができるが，基本的には以下の要件:

- $\hat{\mathcal{H}}_0$ と非可換: $[\hat{\mathcal{H}}_q, \hat{\mathcal{H}}_0] \neq 0$ であること
- $\hat{\mathcal{H}}_q$ の基底状態が全状態の重ね合わせとなっていること

を満たすものが採用される．例えば，評価関数がスピン変数 $\{\sigma_i^z\}_{i=1,2,\dots,N}$ によって定義される場合には，横磁場:

$$\hat{\mathcal{H}}_q \propto \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^x, \quad (2.2)$$

が用いられることが多い [7]．また，評価関数が連続変数 $\{x_i\}_{i=1,2,\dots,N}$ によって定義される場合は， $\{x_i\}$ を位置と見立てて運動量:

$$\hat{\mathcal{H}}_q \propto \sum_{i=1}^N \hat{p}_i^2, \quad (2.3)$$

を用いることができる [58]．

QA の開始時点で系は $\hat{\mathcal{H}}_q$ の基底状態に設定され， $\hat{\mathcal{H}}_q$ の要件から分かるように，評価関数値が高い解から低い解まで全ての解を等確率で重ね合わせた状態となる．この段階で系の観測を行うと全ての解が等確率で現れるので，得られる解の評価関数値の揺らぎは大きい．時間の経過と共に $s(t)$ を大きくすると $\hat{\mathcal{H}}_0$ の影響が強くなり，評価関数値が小さい状態に確率が集中するようになる． $\hat{\mathcal{H}}_{QA}(t)$ の変化による系の時間発展はシュレーディンガー方程式:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}_{QA}(t) |\psi(t)\rangle, \quad (2.4)$$

で記述される．ここで， $|\psi(t)\rangle$ は系の状態ベクトルを， \hbar はディラック定数を表す．断熱定理 [59] によれば， $\hat{\mathcal{H}}_{QA}(t)$ の時間変化が十分ゆっくりであり，以下の条件:

$$\frac{1}{[\varepsilon_1(t) - \varepsilon_0(t)]^2} \left| \left\langle 1(t) \left| \frac{\hat{\mathcal{H}}_{QA}(t)}{dt} \right| 0(t) \right\rangle \right| \ll 1, \quad (2.5)$$

を満たす場合，系が $\hat{\mathcal{H}}_{QA}(t)$ の基底状態と非常に近い状態に保たれることが保証される．ここで， $\varepsilon_0(t)$ と $\varepsilon_1(t)$ はそれぞれ $\hat{\mathcal{H}}_{QA}(t)$ の基底状態と第一励起状態の固有エネルギーを表し， $|0(t)\rangle$ と $|1(t)\rangle$ はそれぞれ基底状態と第一励起状態の固有状態を表す． $\hat{\mathcal{H}}_q$ の基底状態から出発し，アニーリングの過程で $\hat{\mathcal{H}}_{QA}(t)$ の基底状態を辿ることができれば，QA 終了時点では $\hat{\mathcal{H}}_{QA}(\tau) = \hat{\mathcal{H}}_0$ の基底状態，即ち最適解を高い確率で得られることになる．

次に，局所最適解からの脱出方法の違いによる QA と SA の性能差について説明する．第 1 章で説明したように，SA は評価関数値の改悪を確率的に許容し，評価関数の山を登ることで局所最適解から脱出する．一方で，QA では量子力学的なトンネル効果によって評価関数の山を透過する（図 1.3 参照）．先行研究 [25] では，SA と QA が局所最適解から脱出するのに要する時間を評価関数の形状に関連させて計算しており，SA では局所最適解の谷の高さ ΔE に依存して

$$T_{SA} \propto e^{\beta \Delta E}, \quad (2.6)$$

となるのに対して，QA では局所最適解の谷の距離 D を用いて

$$T_{QA} \propto e^{\alpha(\Gamma)D}, \quad (2.7)$$

と求められている．ここで， $\beta = 1/k_B T$ ， k_B はボルツマン定数を表し， $\alpha(\Gamma)$ は量子揺らぎの強さに依存する定数である．この結果は，解空間の狭い範囲に多数の局所最適解をもつ評価関数では SA に対して QA が優位となり，局所最適解の谷が浅い場合には SA が優位となることを示している（図 2.1）．以上のように，QA と SA が有効となる状況は異なっており，それぞれの良さを引き出すためのハイブリッドな方法も様々提案されている [48, 54]． ΔE と D の両方が大きい場合には，QA と SA を組み合わせたとしても効率的に解くことはできないが，従来とは異なる方法で局所最適解から抜け出す QA の登場によって，効率的に近似解を求められる問題の範囲が広がることが期待される．

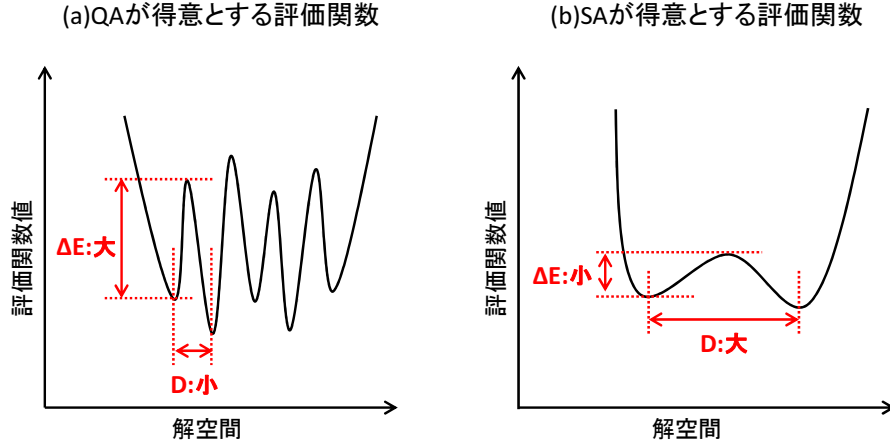


図 2.1: QA と SA のそれぞれが得意とする評価関数の形状

2.3 組合せ最適化問題の Ising 表現

D-Wave マシンを用いて組合せ最適化問題を解く場合は、Ising モデルの基底状態探索として定式化 (Ising 表現) する必要がある。Ising モデルの基底状態探索は一般的に以下のように定義される。

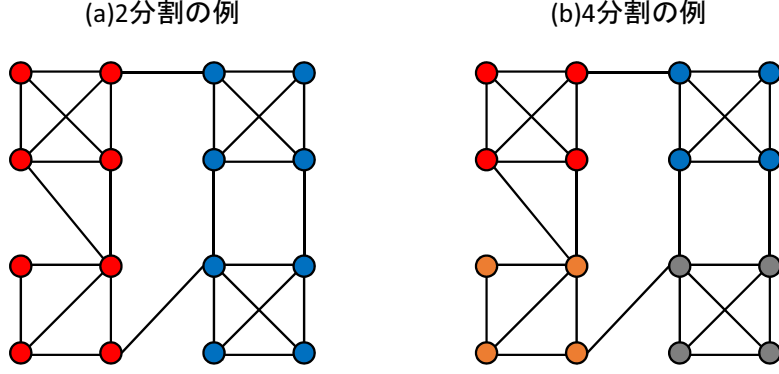
$$\min_{\sigma^z} \left[-\sum_i h_i \sigma_i^z - \sum_{i<j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_{i<j<k} J_{ijk} \sigma_i^z \sigma_j^z \sigma_k^z - \dots \right], \quad (2.8)$$

ここで、 $\sigma_i^z \in (+1, -1)$ はスピン変数を表し、 J_{ij}, J_{ijk}, \dots はスピン変数間の相互作用の強さを表す。つまり、組合せ最適化問題は一般的に評価関数と制約条件によって定義されるが、Ising 表現するためにはスピン変数で定義される制約なしの評価関数を求める必要がある。多くの組合せ最適化問題は Ising 表現できることが知られており、様々な NP 困難問題に対する定式化が先行研究 [23] にまとめられている。本節では、グラフ分割問題と巡回セールスマン問題を式 (2.8) の形に定式化する方法を説明する。

最初にグラフ分割問題を Ising 表現する方法を示す。最も基本的なグラフ分割問題は、グラフ $G = (V, E)$ が与えられたとき、頂点を 2 つのグループに半分ずつ分ける方法の中で、異なるグループに属する頂点を結ぶエッジの数が最小となる分割を求める問題である [図 2.2(a) 参照]。グラフ分割問題の評価関数は「異なるグループの頂点を結ぶエッジの数」であり、制約条件は「各グループの頂点数が等しい」ことである。各頂点にスピン変数 $\sigma_i^z \in (-1, +1)$ を割り当て、 σ_i^z の値によって各頂点のグループを指定すると、グラフ分割問題は

$$\min_{\sigma^z} \sum_{(ij) \in E} \frac{1 - \sigma_i^z \sigma_j^z}{2} \quad \text{s.t.} \quad \sum_{i \in V} \sigma_i^z = 0, \quad (2.9)$$

と定式化される。ここで、式 (2.9) の評価関数では、頂点 i と j が同じグループに属する場合に $\sigma_i^z \sigma_j^z = +1$ となり、異なるグループに属する場合に $\sigma_i^z \sigma_j^z = -1$ となることを利用した。次にやるべきことは式 (2.9) を制約条件を含まない形に変形することである。多くの場合、制約条件に対応する 2 次のペナルティ項 (罰金項) を評価関数に追加して以下の



各頂点の色がグループを表し、
異なる色の頂点を結ぶエッジの数を最小化する問題

図 2.2: グラフ分割問題の例

ように書き直される.

$$\min_{\sigma^z} \left[\sum_{(ij) \in E} \frac{1 - \sigma_i^z \sigma_j^z}{2} + \lambda \left(\sum_{i \in V} \sigma_i^z \right)^2 \right]. \quad (2.10)$$

ここで、 λ はペナルティ項の重みづけを決定する正の定数である. ペナルティ項 [式 (2.10) の第二項] によって制約条件を満たさない組合せの評価関数値が大きくなり、 λ を十分大きくすると式 (2.9) と式 (2.10) の最適解は一致する. 以上で、2 分割のグラフ分割問題を式 (2.8) の形に定式化することに成功した.

次に、再度グラフ分割問題において、頂点を複数個 ($Q > 2$) のグループに等しく分割する問題を考える [図 2.2(b) 参照]. 各頂点に整数変数 $S_i \in (1, 2, \dots, Q)$ を割り当て、 S_i の値によって各頂点のグループを指定すると、グラフ分割問題は

$$\min_{\mathbf{S}} \sum_{(ij) \in E} [1 - \delta(S_i, S_j)] \quad \text{s.t.} \quad \sum_{i \in V} \delta(S_i, q) = \frac{N}{Q}, \quad \forall q \in (1, 2, \dots, Q), \quad (2.11)$$

と定式化される. ここで、 N はグラフに含まれる頂点数を、 δ はクロネッカーのデルタを表す. 式 (2.11) を式 (2.8) の形に変形するためには、まず整数変数 S_i をスピン変数 $\sigma_i^z \in (-1, +1)$ で表現する必要がある. 整数変数の 2 値化は Binary encoding を含め様々な方法が検討されているが [33], D-Wave マシンの利用を念頭に置いた場合は one-hot 表示が最も広く採用されている. one-hot 表示を説明する上ではブール変数 (Boolean variable) $x_i \in (0, 1)$ を用いた方が式の見通しが良いため、以降ではスピン変数 $\sigma_i^z \in (-1, +1)$ ではなくブール変数 $x_i \in (0, 1)$ を用いて話を進める ($\{x_i\}$ を用いて表した評価関数は、 $x_i = (1 - \sigma_i^z)/2$ を用いて容易に Ising モデルのハミルトニアンに書き換えることが可能). one-hot 表示では $S_i \in (1, 2, \dots, Q)$ に対して Q 個のブール変数 $\{x_{qi}\}_{q=1,2,\dots,Q}$ を割り当てた上で、以下の制約条件 (本論文では one-hot 制約と呼ぶ):

$$\sum_{q=1}^Q x_{qi} = 1, \quad (2.12)$$

を課す．そのうえで， $x_{qi} = 1, x_{q'i} = 0 (q' \neq q)$ の時に $S_i = q$ であると定義する．one-hot 制約を満たす組合せに限れば，式 (2.11) の評価関数に含まれるクロネッカーのデルタは

$$\delta(S_i, S_j) = \sum_{q=1}^Q x_{qi} x_{qj}, \quad (2.13)$$

と書き換えることができ，各グループの頂点数を等しくする制約条件は

$$\sum_{i \in V} x_{qi} = \frac{N}{Q}, \quad (2.14)$$

となるため，式 (2.11) は

$$\min_{\mathbf{x}} \sum_{(ij) \in E} \left[1 - \sum_{q=1}^Q x_{qi} x_{qj} \right] \quad \text{s.t.} \quad \sum_{i \in V} x_{qi} = \frac{N}{Q}, \quad \sum_{q=1}^Q x_{qi} = 1, \quad (2.15)$$

と変形できる．ここまでで整数変数の 2 値化が完了した．さらに，2 次のペナルティ項を用いると式 (2.15) は

$$\min_{\mathbf{x}} \left[\sum_{(ij) \in E} \left(1 - \sum_{q=1}^Q x_{qi} x_{qj} \right) + \lambda_1 \sum_{q=1}^Q \left(\sum_{i \in V} x_{qi} - \frac{N}{Q} \right)^2 + \lambda_2 \sum_{i \in V} \left(\sum_{q=1}^Q x_{qi} - 1 \right)^2 \right], \quad (2.16)$$

となり， $Q > 2$ 個のグループへのグラフ分割問題が式 (2.8) の形に定式化される．

最後に，巡回セールスマン問題を Ising 表現する方法を説明する．巡回セールスマン問題とは N 個の都市と都市間の距離が与えられた時，全ての都市を 1 度だけ訪問して最初の都市に戻ってくる巡回路の中で，移動距離が最小のものを求める問題である．この問題の評価関数は「巡回路の総距離」であり，制約条件は「巡回路であること」と「全ての都市を 1 度だけ訪問すること」である． i 番目に訪問する都市を $c_i \in (1, 2, \dots, N)$ とし，都市 q と q' の間の距離を $d(q, q')$ と置くと，巡回セールスマン問題は

$$\min_{\mathbf{c}} \sum_{i=1}^N d(c_i, c_{i+1}) \quad \text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^N \delta(c_i, q) = 1, \quad \forall q \in (1, 2, \dots, N), \quad (2.17)$$

と定式化される．ただし，巡回路の制約を満たすために $c_{N+1} = c_1$ とする．先程のグラフ分割問題と同様に，まずは整数変数 c_i を one-hot 表示を用いて 2 値化する． $c_i \in (1, 2, \dots, N)$ に N 個のブール変数 $\{x_{qi}\}_{q=1,2,\dots,N}$ を割り当て，one-hot 制約:

$$\sum_{q=1}^N x_{qi} = 1, \quad (2.18)$$

を課す．ここで， $x_{qi} = 1$ は都市 q を i 番目に訪問することを意味している．式 (2.17) の評価関数は

$$\sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^N \sum_{q'=1}^N d(q, q') x_{qi} x_{q', i+1}, \quad (2.19)$$

と変形でき、全ての都市を1度だけ訪問する制約条件は

$$\sum_{i=1}^N x_{qi} = 1, \forall q \in (1, 2, \dots, N), \quad (2.20)$$

となるため、式 (2.17) は

$$\min_{\mathbf{x}} \sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^N \sum_{q'=1}^N d(q, q') x_{qi} x_{q'i+1} \quad \text{s.t.} \quad \sum_{i=1}^N x_{qi} = 1, \sum_{q=1}^N x_{qi} = 1, \quad (2.21)$$

と変形できる。巡回セールスマン問題は x_{qi} の q 方向と i 方向の両方に one-hot 制約が課せられた形になっており、このような制約条件は組合せ最適化問題を Ising 表現した際によく現れる。2 次のペナルティ項を用いると、式 (2.21) を式 (2.8) の形に変形することができる。

$$\min_{\mathbf{x}} \left[\sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^N \sum_{q'=1}^N d(q, q') x_{qi} x_{q'i+1} + \lambda_1 \sum_{q=1}^N \left(\sum_{i=1}^N x_{qi} - 1 \right)^2 + \lambda_2 \sum_{q=1}^N \left(\sum_{i=1}^N x_{qi} - 1 \right)^2 \right]. \quad (2.22)$$

本節では整数変数で定義され、等式制約を含む組合せ最適化問題を式 (2.8) の形式で表現する方法を示したが、ナップサック問題等の不等式制約を含む問題も Ising 表現できる。不等式制約の取り扱い方については先行研究 [23] に詳しく述べられている。

2.4 Ising モデルの基底状態探索の難しさ

本節では Ising モデルの基底状態探索の難しさについて、スピングラス理論の観点から簡単に説明する。式 (2.8) に示したようにハミルトニアン的一般系はスピン変数の高次の相互作用を含むが、本節では2体相互作用のみを含むハミルトニアン:

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_i h_i \sigma_i^z, \quad (2.23)$$

を用いて話を進める。前節のグラフ分割問題と巡回セールスマン問題は2体相互作用のみで定式化されており、多体相互作用を含む場合でも基底状態を変えずに式 (2.23) に書き換え可能であることが知られている。以降では、特定の2変数間の相互作用に伴う局所的なエネルギー ($-J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z$) を局所エネルギーと呼ぶことにする。

まず、スピン間に相互作用が存在しない場合 ($J_{ij} = 0$) の基底状態探索は簡単に解くことができ、 $\sigma_i^z = \text{sgn}(h_i)$ が最適解となる。基底状態探索が難しくなり得るのはスピン間の相互作用が存在する場合であり、特に強磁性相互作用 ($J_{ij} > 0$) と反強磁性相互作用 ($J_{ij} < 0$) の競合があると非自明な基底状態をもつようになる。ここで言う自明な基底状態とは、全ての変数間の局所エネルギーの最小化によって得られる基底状態のことを指し、強磁性 (反強磁性) 相互作用では隣接スピンが同じ値 $\sigma_i^z = \sigma_j^z$ (異なる値 $\sigma_i^z \neq \sigma_j^z$) になったときに局所エネルギーが最小となる。 i 番目と j 番目のスピン変数間の局所エネルギーが最小化されているかを判断するには $A_{ij} \equiv \text{sgn}(J_{ij}) \sigma_i^z \sigma_j^z$ を調べれば良く、 $A_{ij} = +1(-1)$ のと

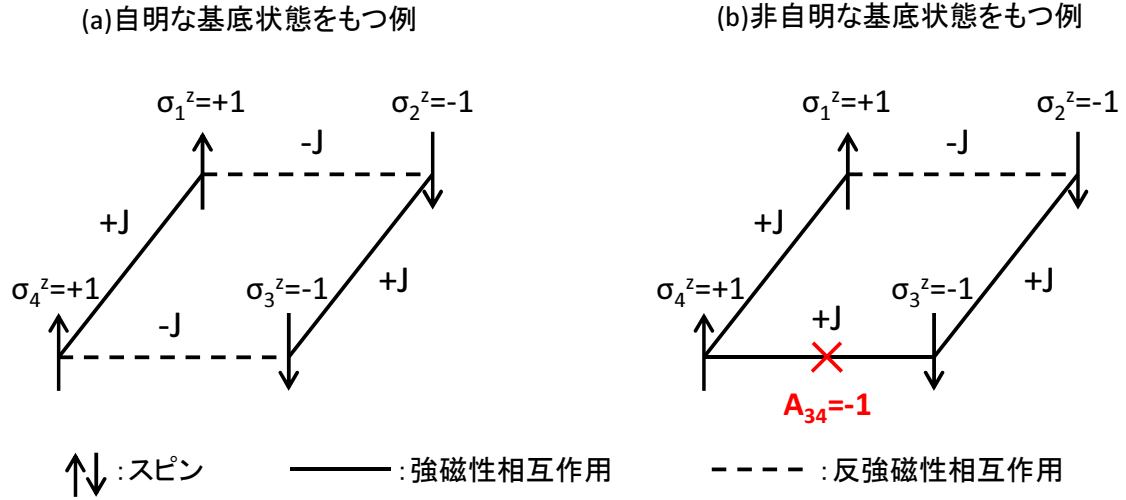
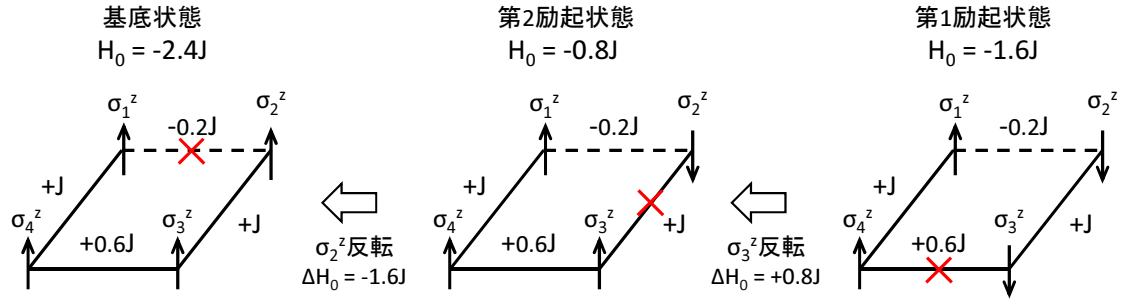


図 2.3: 自明な基底状態と非自明な基底状態の例

きに局所エネルギーが最小化（最大化）される．自明な基底状態と非自明な基底状態をもつ Ising モデルの簡単な例をそれぞれ図 2.3(a) と (b) に示す．図 2.3(a) では強磁性相互作用しているスピンペアは同じ値 ($\sigma_1^z = \sigma_4^z, \sigma_2^z = \sigma_3^z$) となっており，反強磁性相互作用しているペアは異なる値 ($\sigma_1^z = -\sigma_2^z, \sigma_3^z = -\sigma_4^z$) になっているため，全ての局所エネルギーで $A_{ij} = +1$ となる自明な基底状態である．一方で図 2.3(b) では全ての局所エネルギーを最小化することができず，基底状態であっても $A_{34} = -1$ となっている．一般的に，閉ループ内に奇数個の反強磁性相互作用を含む場合は全ての局所エネルギーを最小化することができず，フラストレーションが存在すると言われる [60]．フラストレーションは日常生活で言えば「あっちを立てればこっちが立たず」といった状況を指しており，全体最適の観点から誰に我慢してもらうかを決めなければならない．また，各スピンペアで $|J_{ij}|$ が異なる場合には，図 2.4 に示すように 4 スピンのような小規模系であっても局所最適解が発生することが知られている [61]．左側の状態は $|J_{ij}|$ が最小のスピンペアで $A_{12} = -1$ となる基底状態であり，右側の状態は $|J_{ij}|$ が 2 番目に大きい相互作用で $A_{34} = -1$ となる第 1 励起状態である．図 2.4 に示した第 1 励起状態はどのスピンを反転させてもエネルギーが上昇するので，1 スピンフリップの意味で局所最適解となっている．大規模な Ising モデルでは，多数のフラストレーションが複雑に絡み合うことで，ハミルトニアンが多数の局所最適解をもつ複雑な構造になると予想される．

スピングラスモデルの中で Sherrington-Kirkpatrick(SK) 模型 [62,63] についてはハミルトニアンの谷の構造が詳細に調べられている．SK 模型は全てのスピン変数間で相互作用する Ising モデルで，解析計算の容易性から J_{ij} の確率分布としてガウス分布が採用されることが多い．この模型は平均場理論によって解析的に調べることが可能で，基底状態探索を難しくする特徴的な構造として以下の 3 つが挙げられる．

- Ising スピンの数 N に対して局所最適解の数が指数関数的に増加
- 局所最適解の谷の深さ ΔE が N の増加と共に発散
- 局所最適解の間のハミング距離 D が N に比例して増加



1スピントリップによって第1励起状態から基底状態に到達するためには、エネルギーが増加する更新を経由しなければならない

図 2.4: 局所最適解が発生する例

式 (2.6) と (2.7) から分かるように、局所最適解から脱出するのに要する時間は、SA と QA で共に N に対して指数関数的に増加し、高精度な近似解を得ることが難しくなる。また、近傍探索をベースとして近傍範囲の拡張によって精度を改善するにしても、局所最適解の間の距離が N に比例して増加するため、 N の増加と共に近傍範囲を広げていかなければならない。近傍範囲を十分大きくとれば、その中でのハミルトニアンも上記 3 つの構造を引き継ぐため、近傍の中からエネルギーが最小の解を探すこと自体が難しくなる。一方で、複数スピンの同時更新による局所最適解からの脱出は、物理ではクラスタ更新として検討されてきた [64–68]。その中でも、スピングラスモデルで有効とされる方法として Houdayer の方法 [65–68] がある。Houdayer の方法 [66] では、同じハミルトニアンの Ising モデルを 2 つ用意し、それぞれの Ising モデルで独立に基底状態を探索していく操作と、特定の条件を満たすスピン変数を 2 つの Ising モデル間で入れ替える操作を交互に繰り返す。特定の条件とは「2 つの Ising モデルの間でスピン変数の値が異なること」であり、この方法は近傍探索と違って近傍範囲でエネルギーを最小化する解を探索する必要がない。しかしながら、 $O(N)$ 個のスピンを入れ替えた場合は、2 つの Ising モデルの単純な入れ替えと本質的に変わらなくなってしまうことが原論文で指摘されており、この方法を用いて遠く離れた局所最適解に移動するのは難しい。これまで提案されてきたどのような方法をもってしても SK 模型の基底状態を多項式時間で求めることは不可能であり、この事実は NP 困難問題を厳密に解くためには指数関数時間を要するという予想を支持している。

第3章 D-Wave マシンの概要

3.1 本章の概要

本章では D-Wave マシンの制約と D-Wave マシンを用いた最適化の流れについて説明した後、D-Wave マシンの今後の発展について簡単に示す。

3.2 D-Wave マシンの制約

D-Wave マシンが取り扱える Ising モデルのハミルトニアンを以下に示す。

$$\min_{\sigma^z} \left[- \sum_{(ij) \in \text{Chimera}} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \sum_{i=1}^{N_q} h_i \sigma_i^z \right]. \quad (3.1)$$

ここで、 $(ij) \in \text{Chimera}$ は相互作用を表現可能な qubit のペアを示し、 N_q は D-Wave マシンに実装された qubit 数を表す。現行のマシンでは $N_q = 2,048$ qubit が実装されており、qubit 間の相互作用は図 3.1 に示すキメラグラフ [69] に制限される。図 3.1 の頂点は qubit を表し、エッジは相互作用を表現可能な qubit 間を接続している。キメラグラフは完全 2 部グラフ $K_{4,4}$ をタイル状に並べた構造をしており、 $K_{4,4}$ の左側の qubit は上下の $K_{4,4}$ に接続され、右側の qubit は左右の $K_{4,4}$ と接続される。また、キメラグラフの最大次数は 6 であり、その内訳は $K_{4,4}$ セル内の 4 本の相互作用に加えて、異なる $K_{4,4}$ に属する qubit との 2 本の相互作用である。現在利用可能な D-Wave 2000Q は 16×16 個の $K_{4,4}$ が実装されており、先程述べたように $N_q = 16 \times 16 \times 8 = 2,048$ である。

当然ながら qubit 数以上の 2 値変数を一度に取り扱うことはできないが、D-Wave マシンを利用するにあたって最も厄介なのが相互作用の制約である。一般的に組合せ最適化問題は任意の変数間で相互作用する可能性があり、解きたい問題のグラフ表現がキメラグラフの部分グラフになっていない場合、キメラグラフに適合するように問題を書き換える必要がある。ここで、組合せ最適化問題のグラフ表現とは、Ising 表現した後のハミルトニアンに対して、スピン変数を頂点とし、相互作用する変数間をエッジで結んで得られるグラフのことである。また、qubit を頂点とし、相互作用を表現可能な qubit 間をエッジで結んで得られるグラフのことをハードウェアグラフと呼ぶことにする。D-Wave2000Q の利用を想定している場合、ハードウェアグラフはキメラグラフを指す。問題グラフをハードウェアグラフの部分グラフに変換する処理はマイナー埋め込みと呼ばれ、任意の問題グラフを任意のハードウェアグラフへ埋め込む最適な方法を探索するのは NP 困難であることが知られている [70]。マイナー埋め込みのイメージを掴むため、簡単な例を図 3.2 に示す。左側の図が解きたい問題のグラフを表しており、変数 1 はその他の 8 個の変数と相互作用している。しかしながら、キメラグラフの最大次数は 6 であるため、そのままの形で

完全2部グラフ: $K_{4,4}$

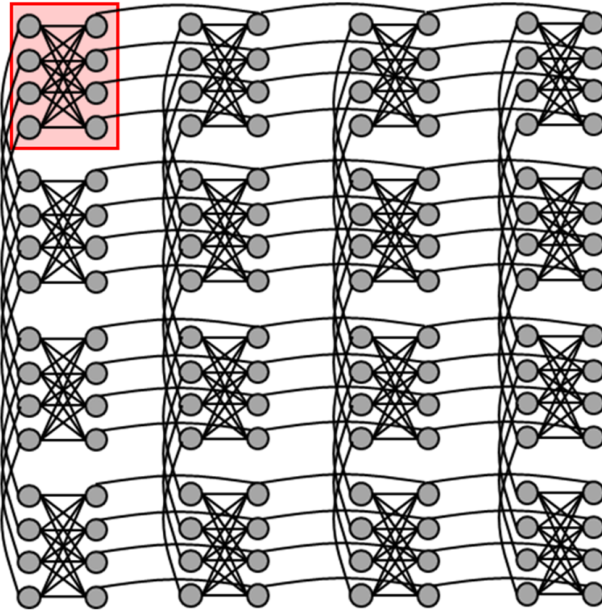


図 3.1: キメラグラフの構造

は取り扱うことができない．そこで，マイナー埋め込みでは1つの変数に複数の qubit を割り当て，1qubit あたりに必要とされる相互作用を分散させる．この問題の場合は，変数 1 に2つの qubit を割り当て，それぞれの qubit に変数 2～5 と変数 6～9 との相互作用を分担させることでキメラグラフの部分グラフに変換できる．変数 1 に割り当てられた2つの qubit は同じ値にならないといけないので，キメラグラフ上で相互作用するペアを選択し，qubit 間に十分強い強磁性相互作用をかける必要がある．同じ変数に割り当てられた qubit によって構成される連結グラフは *chain* と呼ばれる．この例から分かるように，各変数に対して如何に少ない qubit を割り当ててキメラグラフに埋め込むかが非常に重要であり，マイナー埋め込みの良し悪しによって1度に解ける問題のサイズは大きな影響を受ける．

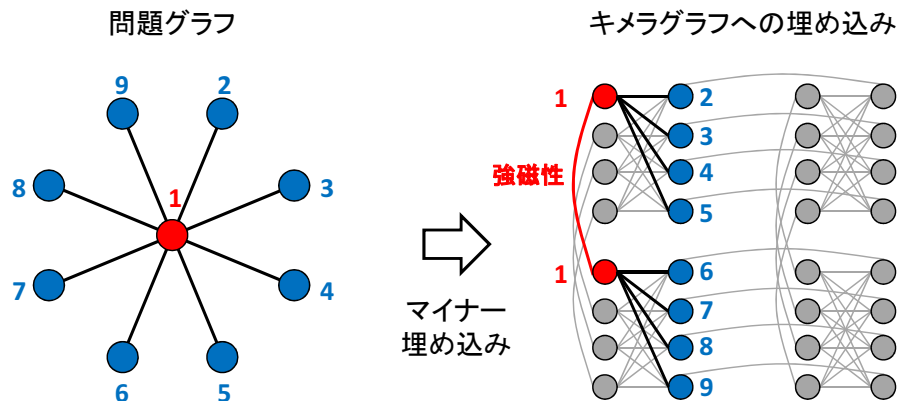


図 3.2: マイナー埋め込みの簡単な例

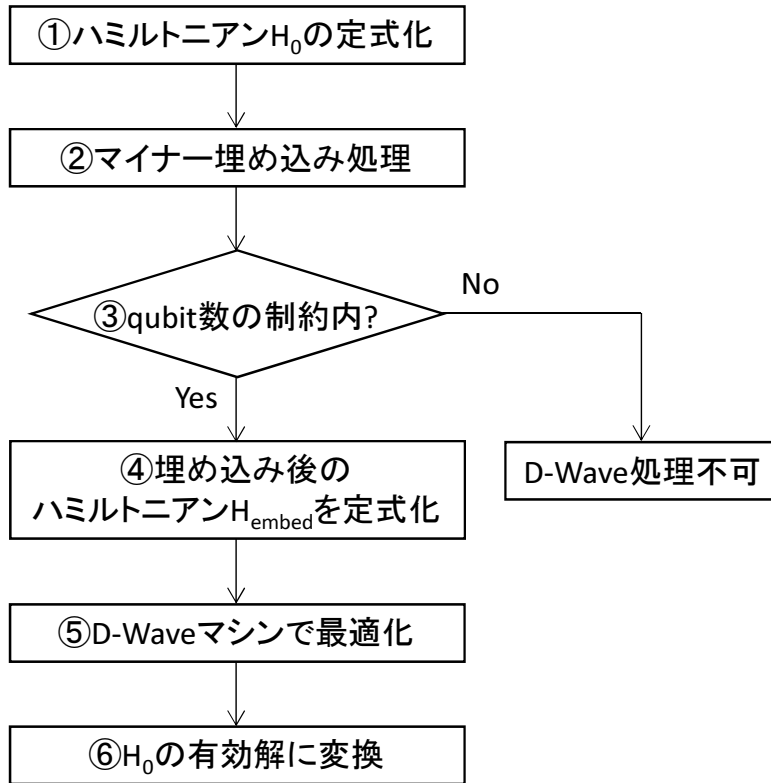


図 3.3: D-Wave マシンを用いた最適化処理の流れ

3.3 D-Wave マシンによる最適化の流れ

前節で示したように D-Wave マシンで解ける問題には制約があるため、D-Wave マシンを利用するに際しては事前処理と事後処理が必要になる。D-Wave マシンを用いて最適化する流れを図 3.3 に示し、各ステップの処理内容について以下で説明する。

1. ハミルトニアン H_0 の定式化

第 2.3 節で説明したように、解きたい組合せ最適化問題を Ising 表現し、対応する Ising モデルのハミルトニアン H_0 を求める。

2. マイナー埋め込み処理

前節で例を示したように、一つの変数に複数の qubit を割り当てることで問題グラフをキメラグラフの部分グラフとして表現し直す。

3. qubit 数の制約内か確認

マイナー埋め込みした後の利用 qubit 数を計算し、qubit 数の制約の範囲内であるか確認する。制約を超えている場合は D-Wave マシンによる最適化を実行できない。

4. 埋め込み後のハミルトニアン H_{embed} を定式化

マイナー埋め込みによって解きたい問題のグラフ表現が変わっているため、埋め込み後のハミルトニアン H_{embed} を求める必要がある。図 3.2 に示した例では、もとも

と解きたい問題のハミルトニアン \mathcal{H}_0 は

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{j=2}^9 J_{1j} \sigma_1^z \sigma_j^z, \quad (3.2)$$

であるが、マイナー埋め込み後のハミルトニアン $\mathcal{H}_{\text{embed}}$ は

$$\mathcal{H}_{\text{embed}} = - \sum_{j=2}^5 J_{1j} \sigma_{11}^z \sigma_j^z - \sum_{j=6}^9 J_{1j} \sigma_{12}^z \sigma_j^z - J_F \sigma_{11}^z \sigma_{12}^z, \quad (3.3)$$

となる．ここで、 σ_{11}^z と σ_{12}^z は変数 1 に割り当てられた 2 つの qubit を表しており、 $J_F > 0$ は *chain* の強磁性相互作用である．式 (3.3) の第一項は変数 1 と変数 2～5 との相互作用を、第二項は変数 1 と変数 6～9 との相互作用を表す．式 (3.2) と式 (3.3) の基底状態を一致させるためには J_F を十分大きな正の値に設定する必要があるが、大きくしすぎると本質的に最小化したい第一項と第二項が潰れてしまい良い解が得られなくなってしまう．現状では最適な J_F を事前に決定する一般的な方法は見つかっておらず、様々な値を試して適切な値を見つけるのが基本となる．*chain* が長くなるほど J_F を大きい値に設定しなければならず [71]、マイナー埋め込みの良し悪しはこの意味でも D-Wave マシンが出力する解精度に大きな影響を与える．

5. D-Wave マシンで最適化

D-Wave マシンを用いて $\mathcal{H}_{\text{embed}}$ の基底状態探索を実行する．通常のコンピュータを用いて QA を実行しようとするれば、シュレーディンガー方程式を解いて系の時間発展を計算しなければならないが、D-Wave マシンでは QA のハミルトニアン $\mathcal{H}_{\text{QA}}(t)$ の変化に伴って系が自然に時間発展していく．ミクロな世界における時間スケールは非常に短く、D-Wave マシンで実行される QA のアニーリング時間はマイクロ秒オーダーである．QA はメタヒューリスティクスであり解精度が保証されていないため、アニーリング時間の短さを活かして QA による最適化を繰り返し、1 個の問題に対して 1,000 個程度の解を出力させることが多い．短時間で多数の解候補を出力（解のサンプリングを実行）できるのは D-Wave マシンの強みの 1 つと考えられており、この特徴を活かした最適化手法 [52,53] や実応用への検証例 [72–79] も多く報告されている．

6. \mathcal{H}_0 の有効解に変換

最後にやらなければならないのは、D-Wave が出力した解を \mathcal{H}_0 の解に戻すことである．QA はメタヒューリスティクスであり、D-Wave マシンには熱等のノイズが存在するため、常に最適解を得られるわけではない．これに起因して、D-Wave マシンの出力した解が one-hot 制約や *chain* の制約 [式 (3.3) で $\sigma_{11}^z = \sigma_{12}^z$] 等を破っている場合がある．このような場合は、制約条件を満たす近傍解を探索する等の事後処理が必要となる．*chain* の破れへの対応方法やパラメータ調整に関しては先行研究 [80,81] で議論されている．

以上が、D-Wave マシンを用いて組合せ最適化問題を解く際の基本的なフローであり、事前処理と事後処理は最終的に得られる解の精度に大きな影響を及ぼす．

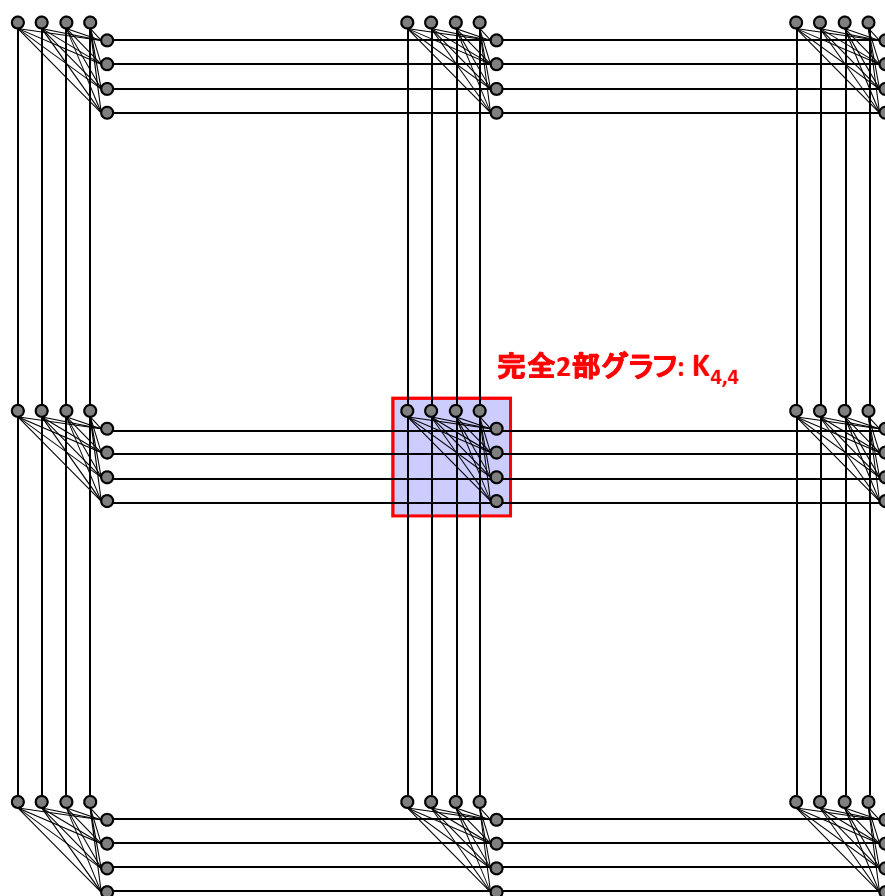


図 3.4: キメラグラフの別の表現

3.4 今後の D-Wave マシンの発展

D-Wave マシンは発展途上の技術であり、第 3.2 節で説明した qubit 数と相互作用の制約は将来的に緩和される可能性が非常に高い。実際に、qubit 数に関しては、2011 年に 128qubit を実装した D-Wave One が発表されて以来、約 2 年毎に qubit 数が倍増しており、現行の D-Wave2000Q では 2,048qubit が実装されている。また、qubit 間の相互作用も現行のキメラグラフからペガサスグラフ [82,83] への改良が検討されている。ここでは、ペガサスグラフの構造を簡単に説明する。まず、ペガサスグラフとの対応が取りやすいように図 3.1 のキメラグラフを図 3.4 に示すように書き換える。ペガサスグラフでは、図 3.4 のキメラグラフを 3 枚用意し、それらを図 3.5 に示すように右斜め上に平行移動させて配置する。その上で、赤線で示した完全 2 部グラフ $K_{4,4}$ 間の相互作用が追加される。図 3.5 では中心の完全 2 部グラフに関連して追加される相互作用のみを示したが、その他の完全 2 部グラフに対しても同様に相互作用が追加される。ペガサスグラフが実装されれば、同じ qubit 数が実装されていたとしても、キメラグラフに対して大きな問題を埋め込めるようになる。ただし、全結合グラフを実装するのは現段階では困難だと考えられており、近い将来にマイナー埋め込み処理が不要になるわけではない。

本節で示したように、D-Wave マシンの qubit 数や qubit 間相互作用に対する制約は将

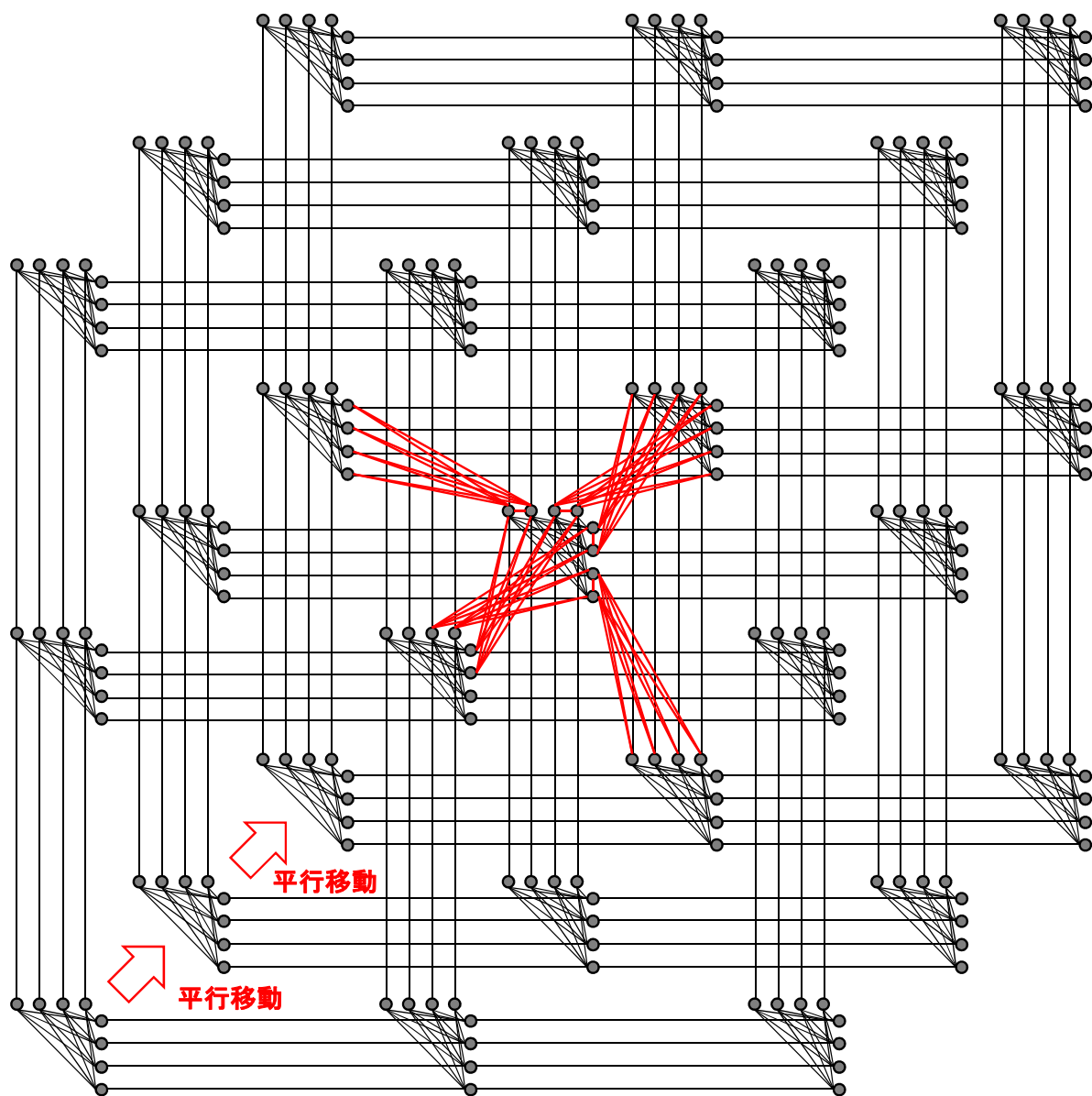


図 3.5: ペガサスグラフ

来的に緩和される可能性が高い．このため，D-Wave マシンを使いこなすためのアルゴリズムは，将来的な D-Wave マシンの発展も考慮して検討していく必要がある．

第4章 大規模問題への量子アニーリングマシンの適用

4.1 本章の概要

D-Wave マシンは第3章で説明した制約をもつため、大規模な組合せ最適化問題を直接解くことは難しい。また、第2章で説明したように、QA を用いればどのような問題の高精度解も効率的に得られるわけではなく、QA を用いるべき場合もあれば、他の方法に頼った方が良い状況もある。そこで、現在活発に研究されているのが、従来の最適化手法の枠組みの中で D-Wave マシンを利用するハイブリッド手法である。ハイブリッド手法では D-Wave マシンを用いて直接問題を解くことを諦め、従来の最適化手法と組合わせた処理をする中で D-Wave マシンの特徴を活かすことを考える。D-Wave マシンが任意の組合せ最適化問題を最速で解けるわけではない以上、D-Wave マシンのみに固執した方法よりもハイブリッド手法を展開していく方が建設的だと言える。本章の第4.2節ではハイブリッド手法の先行研究を示し、ハイブリッド手法を効率的に実行するためには部分問題を高速に埋め込むアルゴリズムが不可欠であることを示す。第4.3節ではマイナー埋め込みアルゴリズムの先行研究を示し、第4.4節で部分問題を高速に埋め込むための新しいアルゴリズムを提案する。また、第4.5節では提案したアルゴリズムの埋め込み性能を評価し、第4.6節では提案アルゴリズムを用いることで従来より高精度な解が得られることを示す。

4.2 ハイブリッド手法の先行研究と課題

従来の最適化手法と組合せて D-Wave マシンを利用するハイブリッド手法は、これまでに様々なものが提案されている [44–57]。その中で最も代表的なものが、山登り法の性能改善のために D-Wave マシンを利用する方法である [44, 45]。この方法では、大規模な組合せ最適化問題から D-Wave マシンが解けるサイズの部分問題を抜き出し、D-Wave マシンによる部分問題の最適化を繰り返して暫定解を更新していく（図4.1参照）。D-Wave マシンは1度に探索する近傍範囲を広げるために利用されている。近傍範囲の拡張による高精度化はオペレーションズリサーチの分野で *large-neighborhood local search* [1, 2] として研究されており、このような形で D-Wave マシンを利用するのは自然な流れと言える。その他のハイブリッド手法としては、D-Wave マシンから出力される多数の候補解の統計的な偏りを用いて解を絞り込んでいく方法 [52, 53] や、D-Wave マシンのサンプリング性能を活かして部分問題ベースの Belief propagation を実行する方法 [55]、遺伝的アルゴリズムの突然変異過程で複数変数を同時更新する際に D-Wave マシンを利用する方法 [56] 等がある。これらのハイブリッド手法の中でどの方法を利用すべきかは解きたい問題に応じ

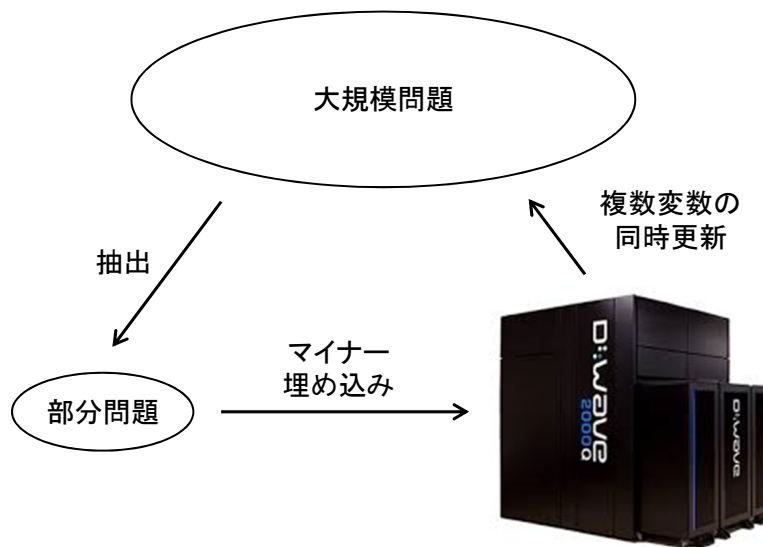


図 4.1: 山登り法をベースとしたハイブリッド手法

て変わってくるが、様々な考え方に基づいた方法が提案されることで D-Wave マシンを活用する幅が広がっていくと期待される。

一方で、大規模な組合せ最適化問題を解くことを考えると、D-Wave マシンが取扱い可能な部分問題を抜き出して最適化するという処理に関しては、ほぼ全てのハイブリッド手法で共通すると考えられる。当然ながら、1 度に取り扱う部分問題が大きい方が高い精度の解が得られると期待される。そこで問題となるのが、qubit 間の相互作用に対する制約がある中で、如何にして大きな部分問題を取り扱うかということである。第 3.2 節で説明したように、D-Wave マシンが扱える部分問題のサイズに大きな影響を与えるのはマイナー埋め込み処理である。D-Wave マシンで取扱い可能な最大の問題サイズは、問題グラフのエッジの数に依存して大きく異なる。図 4.2 は、様々な問題グラフに対して、現行のキメラグラフで取扱い可能な問題サイズを示している。この図から分かるように、可能な限り大きな問題を埋め込むためには、与えられた問題グラフに対して適切な埋め込み方法を探す必要がある。また、図 4.1 から分かるように、多くのハイブリッド手法では部分問題を繰り返し埋め込むことが要求されるので、計算時間と部分問題サイズを両立したマイナー埋め込みアルゴリズムが必要である。さらにもう 1 つ重要なことは、D-Wave マシンは発展途上の技術であって、将来的に qubit 数や相互作用に関する制約はほぼ確実に緩和されるということである（第 3.4 節参照）。以上のことを考慮すると、ハイブリッド手法の枠組みで D-Wave マシンのポテンシャルを最大限に引き出すためには、以下の要件を満たす部分問題の埋め込みアルゴリズムが要求される。

- 計算時間の qubit 数依存性が小さい
- 最大限埋め込み可能な問題サイズと同等の部分問題を埋め込める
- アルゴリズムの中身が相互作用の詳細に依存しない

マイナー埋め込みアルゴリズムの先行研究に関しては次節で述べるが、現状では上記の要

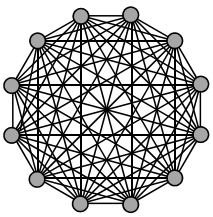
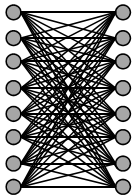
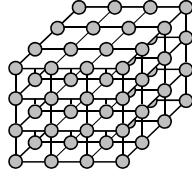
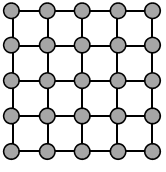
	完全グラフ	完全2部グラフ	立方格子	正方格子
グラフ構造				
埋め込み可能な問題サイズ	64	128	512	1024

図 4.2: 問題グラフと埋め込み可能な最大の問題サイズの例

件を満たすアルゴリズムは存在しない。本章の主要なテーマは、上記の要件を満たす部分問題埋め込みアルゴリズムを提案することである。

本節の最後に、部分問題のグラフ構造に関する注意点を簡単に述べておく。部分問題の最適化を繰り返す方法の中で、部分問題のグラフを木構造に限定したものは D-Wave マシンの登場以前から研究されてきた [84–87]。問題グラフが木構造の場合は Belief propagation や動的計画法によって多項式時間で解けるため、大きな部分問題の最適解を効率的に計算できることに着目した方法である。しかしながら、Ising モデルの基底状態探索の難しさがフラストレーションに起因している（第 2.4 節参照）ことを考慮すると、部分問題は閉ループを含む問題グラフを抜き出してくるべきだと考えられる。D-Wave マシンは閉ループを含む部分問題も取り扱うことができるため、従来の木構造に限定した方法に対して高精度な解が得られると期待される。

4.3 マイナー埋め込みアルゴリズムの先行研究

本節では、マイナー埋め込みアルゴリズムの先行研究を概観した後、マイナー埋め込みの定義について説明し、新たなアルゴリズムを検討していく上でベースとなった先行研究について詳しく述べる。

4.3.1 先行研究の概観

マイナー埋め込みは D-Wave マシンを用いて最適化する際に必須の処理であるため、これまでに多くのアルゴリズムが提案されてきた [88–95]。これらの中で最も汎用的なものが Cai らによって提案されたアルゴリズム [90] である。Cai のアルゴリズムは任意の問題グラフを任意のハードウェアグラフに埋め込む方法をヒューリスティックに探索し、ハードウェアグラフが qubit や相互作用の製造欠陥を含む場合でもアルゴリズムの変更が必要ないという強みをもつ。このアルゴリズムは、問題グラフに合わせた埋め込みを探索するため大きな部分問題を埋め込むことができ、またハードウェアグラフに対する柔軟性に関しても申し分ない。しかしながら、問題グラフのエッジが少ない場合に計算時間が非常に

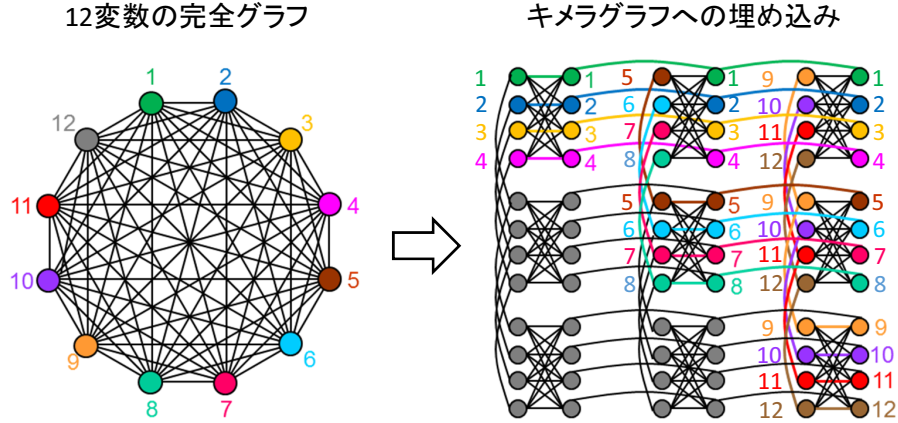


図 4.3: 完全グラフのマイナー埋め込み

長くなるという欠点をもつ．一方で，計算時間を最も短くするためには，問題グラフが完全グラフであった場合の埋め込み方法 [89,91,92] を用いればよい．ハイブリッド手法の中で一般的に用いられているのがこの方法である．先行研究 [92] で提案された埋め込み方法を図 4.3 に示す．完全グラフの埋め込み方法は，64 変数以下の任意の問題グラフに対して適用できるため，64 変数の部分問題を繰り返し最適化することにすれば埋め込み方法を毎回検討する必要はなくなる．このため，マイナー埋め込み処理の計算時間を大幅に低減できるが，問題グラフのエッジ数が少ない場合には必要以上に小さい部分問題を扱っていることになる（図 4.2 参照）．その他にも，キメラグラフの特徴を生かしたアルゴリズム [93,95] や，頻出する問題グラフに狙いを絞ったアルゴリズム [94] も提案されているが，ハイブリッド手法で求められる要件を満たすアルゴリズムは存在しないのが現状である．そこで，本章ではハイブリッド手法に適した部分問題の埋め込みアルゴリズムを提案することを目指す．また，ハイブリッド手法に適したアルゴリズムの要件を既に 2 つ満たしている Cai のアルゴリズムをベースに検討していくことにする．

4.3.2 マイナー埋め込みの定義

Cai のアルゴリズムについて詳しく示す前に，ここでマイナー埋め込みの定義を先行研究 [91] に沿って示しておく．問題グラフ $G_p = G(V_p, E_p)$ のハードウェアグラフ $G_q = G(V_q, E_q)$ へのマイナー埋め込みは以下のように定義される．

1. G_p に含まれる各頂点 v は G_q の 1 つ以上の頂点集合 T_v に割当てられ，且つ T_v に属する頂点は G_q 上で連結グラフを構成する．
2. $(u, v) \in E_p$ ならば， G_q の頂点 $i_u \in T_u, i_v \in T_v$ で $(i_u, i_v) \in E_q$ となるものが存在する．

1 番目の項目は同じ変数を割当てられた qubit が G_q 上で *chain* を形成することを意味し，2 番目の項目は変数間の相互作用を G_q 上で表現するために必要である．ここで，1 つの変数に複数の qubit を割当てることは問題ないが，1 つの qubit に複数の変数を割当てること（本論文では重複割当てと呼ぶ）は許されないことに注意が必要である．

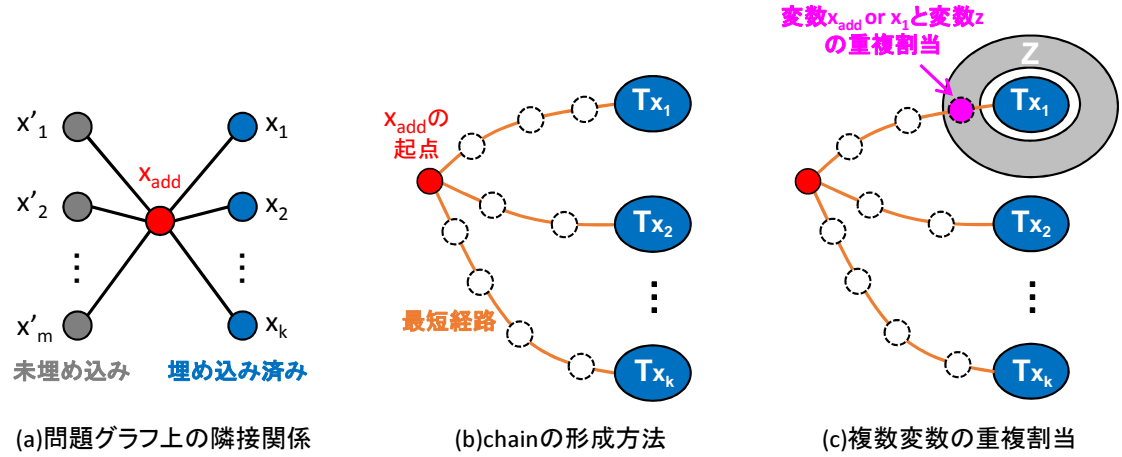


図 4.4: Cai のアルゴリズムにおける変数の埋め込み方法

4.3.3 Cai のアルゴリズムの詳細

Cai のアルゴリズムは前半と後半に分けることができる．前半では重複割当を許容しながら暫定的に全変数を埋め込み，後半で重複割当を解消するように暫定的な埋め込みを改善する．ここでは新たなアルゴリズムを提案する上で重要となる前半の処理について詳しく説明する．

暫定的な埋め込みを求めるにしても，全ての変数の埋め込みを同時に考えるのは難しいので，変数を 1 つずつハードウェアグラフに埋め込んでいくことを考える．次に埋め込む変数を x_{add} とし，既にハードウェアグラフ上に埋め込まれた変数 x_1, \dots, x_k と x_{add} が問題グラフ上で相互作用している場合を考える [図 4.4(a) 参照]．埋め込み済みの隣接変数 x_1, \dots, x_k が qubit の集合 T_{x_1}, \dots, T_{x_k} に割当てられているとすると，変数間の相互作用をハードウェアグラフ上で正しく表現するためには， x_{add} は T_{x_1}, \dots, T_{x_k} に隣接する qubit に割当てられなければならない．また， x_{add} が割当てられた qubit はハードウェアグラフ上で *chain* を形成する必要がある．これらの条件を最小限の qubit 数で満足させるため，Cai のアルゴリズムでは未使用の qubit を起点として選択し，その起点から T_{x_1}, \dots, T_{x_k} へのハードウェアグラフ上の最短経路をダイクストラ法で求める [図 4.4(b) 参照]．その後，最短経路上の qubit に x_{add} か x_1, \dots, x_k を適切に割当てることによって変数間の相互作用をハードウェアグラフ上で表現できるようになる．しかしながら，この方法では後から埋め込まれる変数を考慮せずに貪欲的に割当てを決定しているので，未使用 qubit のみを用いて経路を構成できないことがしばしば発生する．例えば，図 4.4(c) では T_{x_1} の隣接 qubit が変数 z によって全て利用された状況を示している．このような場合，Cai のアルゴリズムでは暫定的に変数 x_{add} か x_1 のどちらか一方と変数 z が重複して qubit に割当てられる．前半では図 4.4 に示した処理を繰り返すことで全変数の埋め込みを暫定的に求める．後半では重複割当てが解消されるまで暫定的な埋め込みを改善するが，本論文において後半の処理内容は重要ではないのでここでは説明しない．Cai のアルゴリズムは変数間の相互作用に合わせて埋め込みを探索するので，問題グラフがスパースなほど大きな問題を埋め込むことができる．

次にアルゴリズムの計算時間について説明する．計算時間の大部分がダイクストラ法に

よる最短経路の探索で占められているので、要求される最短経路の探索回数に焦点をあてる．ダイクストラ法の計算時間は、ハードウェアグラフの頂点数 $|V_q|$ とエッジの数 $|E_q|$ を用いて

$$T_{\text{Dijkstra}} \sim O(|E_q| + |V_q| \log |V_q|), \quad (4.1)$$

で与えられる．キメラグラフでは

$$|E_q| \sim O(|V_q|^1), \quad (4.2)$$

である．前半処理では問題グラフに含まれる相互作用の数 $|E_p|$ だけ最短経路を探索する必要があるので、最短経路の探索回数 $N_{\text{Dijkstra}}^{(1)}$ は、

$$N_{\text{Dijkstra}}^{(1)} \sim O(|E_p|), \quad (4.3)$$

となる．後半処理における最短経路の探索回数 $N_{\text{Dijkstra}}^{(2)}$ は

$$N_{\text{Dijkstra}}^{(2)} \sim O(|V_p||V_q||E_p|), \quad (4.4)$$

であることが先行研究 [90] の中で示されている．ここで、 $|V_p|$ は問題グラフに含まれる変数の数を表す．計算時間は明らかに後半処理が支配的となっている．このことから、前半における重複割当てを上手く避ける方法を見つけ出せば、後半の処理が不要となり、計算時間を大幅に低減できると期待される．

4.4 部分問題の埋込アルゴリズムの提案

本節では、Cai のアルゴリズムをベースとして重複割当てを必要としない部分問題の埋込みアルゴリズムを検討する．Cai のアルゴリズムとの大きな違いは以下の 3 つ:

- 重複割当ての拒否
- 予約制度の導入
- 最短経路探索の計算時間低減

である．

Cai のアルゴリズムを改良していくにあたって、最初に注目しなければならないのは、従来の埋め込みアルゴリズムの問題設定と部分問題の埋め込みアルゴリズムの問題設定の違いである．それぞれのアルゴリズムの問題設定を以下に比較する．

- 従来の埋め込みアルゴリズムの問題設定
問題グラフが与えられたとき、そのグラフに含まれている全ての変数を埋め込む方法を求める．
- 部分問題の埋め込みアルゴリズムの問題設定
大規模問題の問題グラフが与えられたとき、そこに含まれる変数の一部を可能な限り多く埋め込む方法を求める．

この問題設定から分かるように、従来の埋め込みアルゴリズムは D-Wave マシンを用いて直接問題を解くことを前提として考えられてきた。一方で、部分問題の埋め込みアルゴリズムでは、一部の変数で構成される部分問題を埋め込めば良い。この違いを考慮すると、部分問題の埋め込みに限って言えば、Cai のアルゴリズムから重複割当てを取り除くことは容易である。つまり、重複割当てが不要な埋め込み易い変数で部分問題を構成し、重複割当てを利用しないと埋め込めない変数の埋め込みは諦めれば良い。

しかしながら、単純に重複割当てを拒否するだけでは埋め込み可能な変数がすぐになくなり、qubit を使い切る前に埋め込みが終了するという問題が発生する。簡単な例として、図 4.5(a) に示す問題グラフにおいて、変数 1 から順番にキメラグラフに埋め込むことを考える。変数 1 が図 4.5(b) に示すように左上の qubit に割当てられたとすると、変数 2~6 は最短経路に基づいて図 4.5(c) に示すように埋め込まれる。この時点で変数 1 が割当てられた qubit の隣接は全て使い切っているため、未使用 qubit が多く残っているにも関わらず変数 7~9 が埋め込まれずに終了してしまう。この問題は変数 1 の *chain* を伸ばす余地が残されていないことに起因しており、解決策として提案アルゴリズムでは qubit の予約という概念を導入する。最短経路探索の結果として重複割当てをせずに変数 x_{add} を埋め込めると分かった場合、 x_{add} は最短経路の起点 qubit に関連付けて *chain* を伸ばすために必要な qubit を予約する。起点 qubit がキメラグラフ内の完全 2 部グラフの左側と右側のどちらに位置するかによって予約される qubit は異なる。起点が左側に位置する場合は図 4.6(a) に示すようにキメラグラフ上で縦方向に *chain* を伸ばすための qubit が予約され、右側に位置する場合は図 4.6(b) に示すようにキメラグラフ上で横方向に *chain* を伸ばすための qubit が予約される。 x_{add} が予約した qubit に対して x_{add} 以外の変数を割当ててことは禁止され、 x_{add} の全ての隣接変数の埋め込みが完了した時点で x_{add} による予約が解消される。予約制度の導入によって図 4.5(a) の問題グラフの全ての変数が埋め込めるようになることを図 4.7 を用いて示す。図 4.7(a) に示すように、変数 1 がキメラグラフの左上の qubit に割当てられると、その下の完全 2 部グラフにある qubit が変数 1 によって予約される。変数 2~5 が追加で埋め込まれた状態が図 4.7(b) であり、変数 2~5 は *chain* を横方向に伸ばすための qubit を予約する。図 4.7(c) に示すように、変数 6~9 が埋め込まれる時点で変数 1 の予約 qubit に対して変数 1 が実際に割当てられ、新たに変数 1 が割当てられた qubit に隣接するように変数 6~9 が割当てられる。以上のように、予約制度の導入によって多くの変数と相互作用する変数が存在する場合でも、*chain* を伸ばしながら埋め込んでいくことが可能となる。起点に関連させて予約する qubit の選び方は、問題グラフの中で最も相互作用の数が多い完全グラフの埋め込み方法を参考にすればよい。図 4.3 を見ると分かるように、完全グラフの埋め込みでは変数間の相互作用を表現するために完全 2 部グラフ内の濃い相互作用を利用し、相互作用する変数の種類を増やすために異なる完全 2 部グラフを跨ぐように *chain* を伸ばしている。予約制度ではこれを参考に、起点 qubit から異なる完全 2 部グラフに向けて *chain* を伸ばせるように予約 qubit を決めている。予約制度はキメラグラフの構造を利用したものであり、第 4.2 節で挙げた「アルゴリズムの中身が相互作用の詳細に依存しない」という要件を満たしていないように思えるが、ハードウェアグラフが変更されたときでも完全グラフの埋め込みを参考にするという方針の下で柔軟にアルゴリズムを修正することができる。

最後に、重複割当ての拒否による最短経路探索の計算時間低減について説明する。Cai

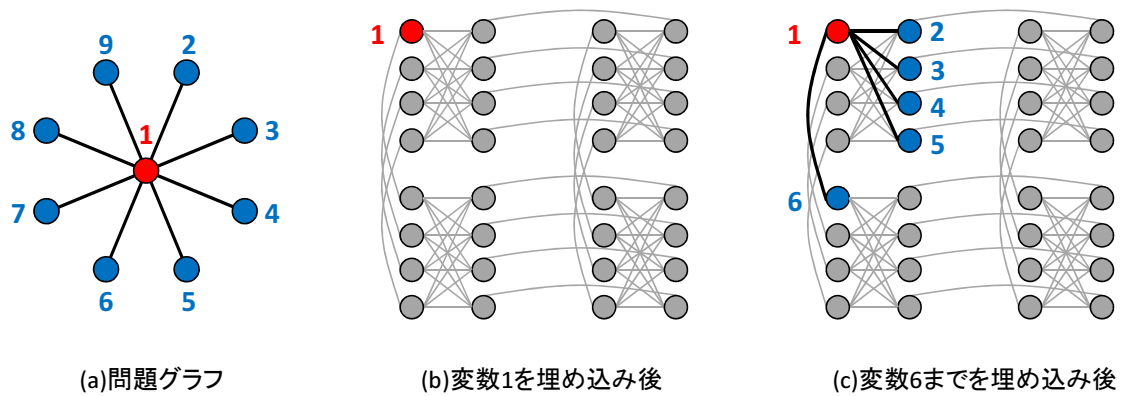


図 4.5: 重複割当ての拒否により問題が発生する例

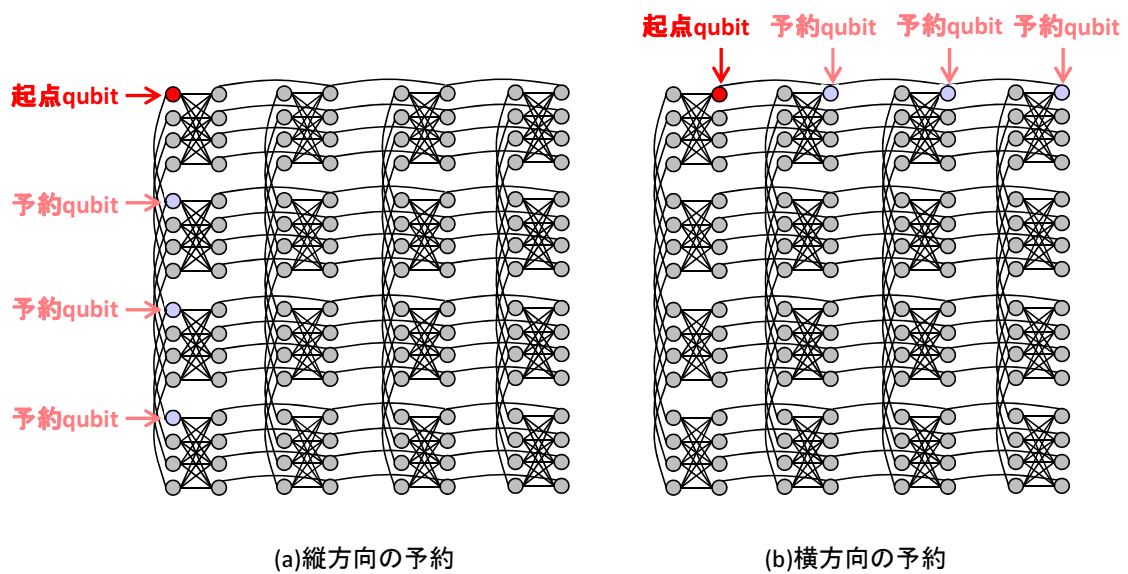


図 4.6: 基点 qubit に関連して予約される qubit

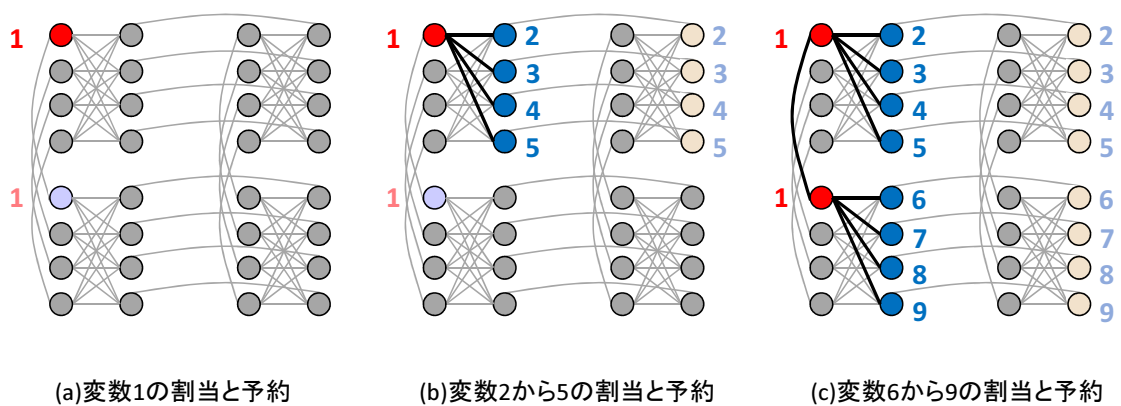


図 4.7: 予約制度の導入による埋め込みの改善

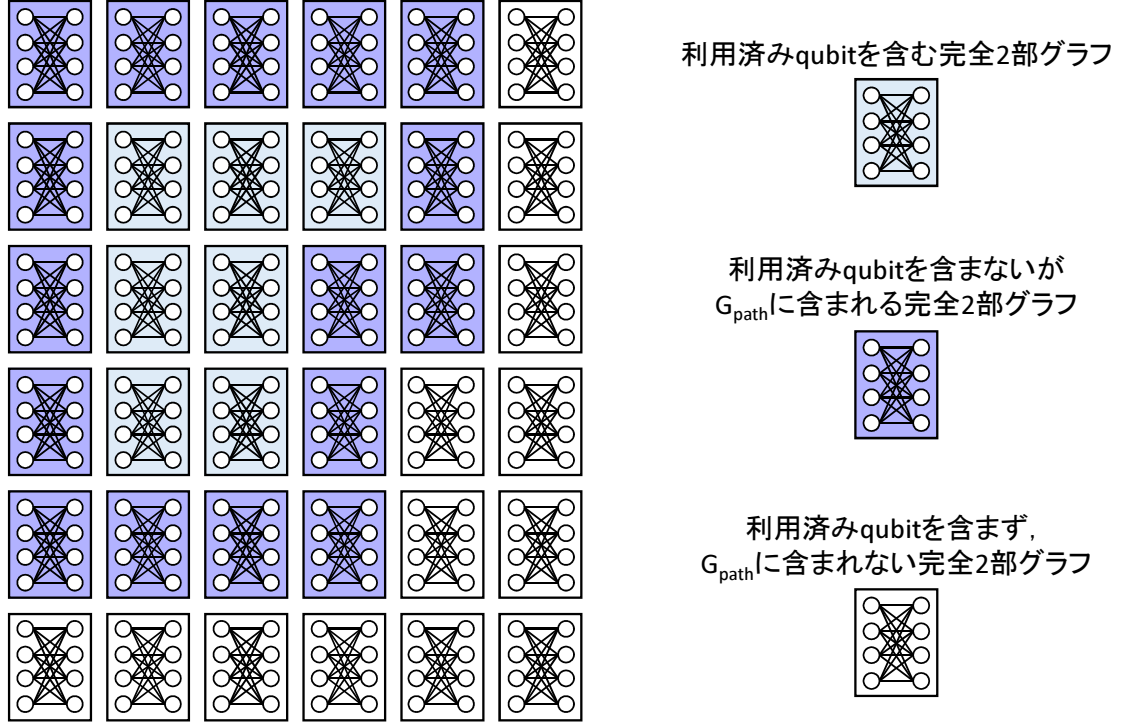


図 4.8: G_{path} に含まれる完全 2 部グラフの例

のアルゴリズムでは重複割当てを許容しているため、変数が割当てられた qubit も含めてハードウェアグラフ全体で最短経路を探索する必要がある。一方で、提案したアルゴリズムでは重複割当てを拒否するため、最短経路を探索するグラフ G_{path} は未使用 qubit のみで構成すれば十分である。図 4.8 に示すように、 G_{path} は利用済みの qubit を含む完全 2 部グラフ (青色) と、それらに隣接する完全 2 部グラフ (赤色) のみで構成すれば良い。利用済みの qubit が G_{path} から除かれることを考慮すると、 G_{path} の頂点数 $|V_{\text{path}}|$ とエッジの数 $|E_{\text{path}}|$ は赤色のセルに含まれるものが支配的であり、

$$|V_{\text{path}}| \sim O(|V_{\text{q}}|^{1/2}), \quad (4.5)$$

$$|E_{\text{path}}| \sim O(|V_{\text{path}}|), \quad (4.6)$$

となる。ダイクストラ法の計算時間が式 (4.1) で与えられ、キメラグラフのエッジ数が式 (4.2) で与えられることを考慮すると、最短経路の計算時間だけを見ても Cai のアルゴリズムに対して約 $1/\sqrt{|V_{\text{q}}|}$ に減少する。

4.5 埋め込み性能の評価

本節では提案した埋め込みアルゴリズムの性能を評価する。

まず、処理時間に関連する最短経路の探索回数 N_{path} と部分問題サイズ N_{sub} の qubit 数依存性を評価する。ここでは、図 4.9 に示すように相互作用が薄い正方格子と、相互作用が濃い完全グラフを問題グラフとして用意し、100 から 10 万 qubit のキメラグラフに部分

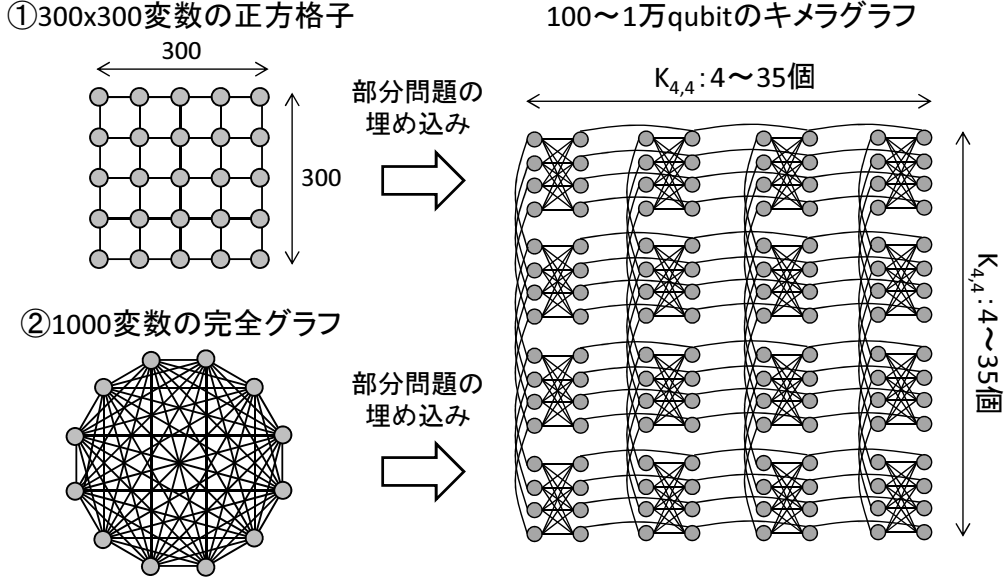


図 4.9: 最短経路の探索回数と部分問題サイズの qubit 数依存性の評価方法

問題を埋め込む。また、各 qubit 数のキメラグラフに対して 100 回部分問題の埋め込みを実施し、平均と分散を評価した上で平均 \pm 標準偏差をエラーバー付きでプロットする。最短経路の探索回数 N_{path} の評価結果が図 4.10 に示してある。問題グラフが正方格子と完全グラフの場合の N_{path} の qubit 依存性を線形近似により求めると

$$N_{\text{path}}^{(\text{grid})} \sim O(N_q^{1.27}), \quad (4.7)$$

$$N_{\text{path}}^{(\text{complete})} \sim O(N_q^{0.84}), \quad (4.8)$$

が得られる。ここで、 N_q は qubit 数を表す。一般的に実時間アルゴリズムは N_q^3 以下が望ましいと言われることを考えると、提案アルゴリズムにおける経路探索回数の qubit 数依存性は十分小さいと言える。図 4.11 には N_{sub} の qubit 数依存性を示す。問題グラフが正方格子と完全グラフの場合の N_{sub} の qubit 数依存性を線形近似により求めると

$$N_{\text{sub}}^{(\text{grid})} \sim O(N_q^{0.90}), \quad (4.9)$$

$$N_{\text{sub}}^{(\text{complete})} \sim O(N_q^{0.50}), \quad (4.10)$$

が得られる。完全グラフに対しては、理論的に埋め込み可能な最大の部分問題サイズを埋め込んでいる。正方格子では、理論的に埋め込み可能な部分問題サイズは $O(N_q^{1.0})$ であるのに対して、評価結果では $O(N_q^{0.9})$ と近い依存性を示している。ここで重要なのは、完全グラフの埋め込み方法 [92] を用いた場合は、問題グラフが正方格子であっても $O(N_q^{0.5})$ の部分問題しか埋め込めないのに対して、提案アルゴリズムを用いることで $O(N_q^{0.9})$ の大きな部分問題を埋め込めるということである。以上の評価結果から、最短経路の探索回数と部分問題サイズの qubit 数依存性は問題ないと言える。

次に、任意の 2 変数間に対してランダムに相互作用を発生させたグラフ (Erdős-Rényi graph) を問題グラフとしたときに、2048qubit のキメラグラフに埋め込まれる部分問題のサイズを確認する。ここでは、問題グラフ上で相互作用を発生させる確率 P_{bond} を変化さ

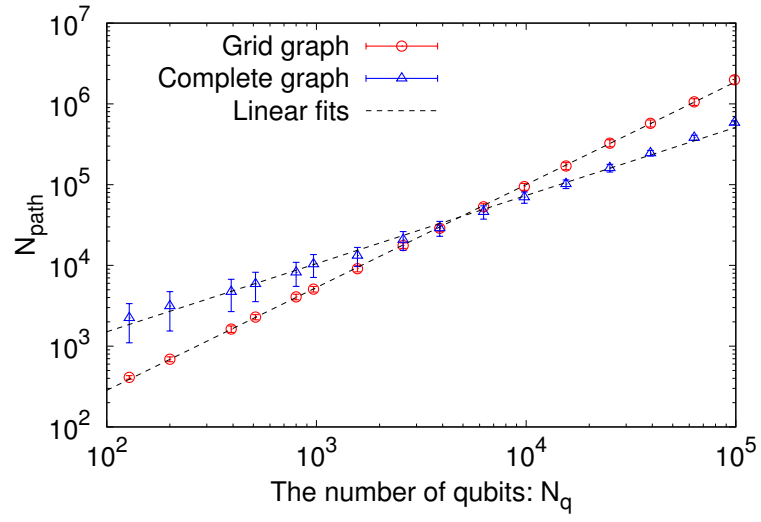


図 4.10: 最短経路の探索回数 N_{path} の qubit 数依存性

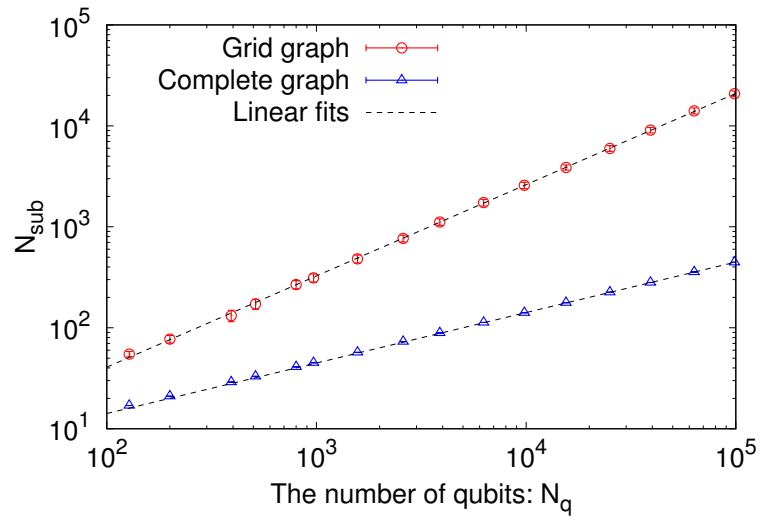


図 4.11: 部分問題サイズ N_{sub} の qubit 数依存性

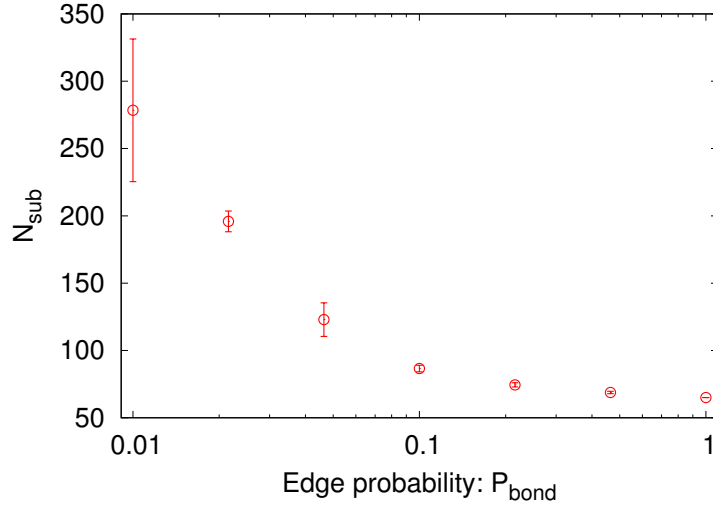


図 4.12: 部分問題サイズ N_{sub} の qubit 数依存性

せて、キメラグラフに埋め込まれる部分問題サイズ N_{sub} を評価する．各 P_{bond} に対して 1 個の問題グラフを生成し，部分問題を 100 回埋め込んだときの平均と分散を評価した上で，平均 \pm 標準偏差をエラーバー付きでプロットする．問題グラフの相互作用密度 P_{bond} の減少に伴って部分問題サイズ N_{sub} は大きくなっており，問題グラフの相互作用をランダムに発生させた場合でも，問題グラフに合わせて大きな部分問題を埋め込めていることが分かる．

最後に， 100×100 変数の正方格子の問題グラフに提案アルゴリズムを適用したときに，2,048qubit のキメラグラフ上に埋め込まれた部分問題の例を図 4.13 と 4.14 に示す． 100×100 の各グリッドが 2 値変数を表しており，部分問題としてキメラグラフ上に埋め込まれた変数を黒く塗りつぶしてある．本章の第 4.2 節で説明したように，部分問題のグラフは木構造になっていないことが好ましいが，提案アルゴリズムによって埋め込まれた部分問題は閉ループを多く含む構造になっていることが分かる．

以上の評価結果によって，提案アルゴリズムが期待通りの動作をしていることを確認できたと言える．

4.6 近傍範囲の拡大による解精度の改善

次に，大きな部分問題を解くことによる解精度への影響を，実際に D-Wave マシンを用いて評価する．ここでは， $10 \times 10 \times 10$ 変数の 3 次元 Ising モデルの基底状態探索に対して解精度を評価する．ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (4.11)$$

$$P(J_{ij}) = P_F \delta(J_{ij} - J) + (1 - P_F) \delta(J_{ij} + J), \quad (4.12)$$

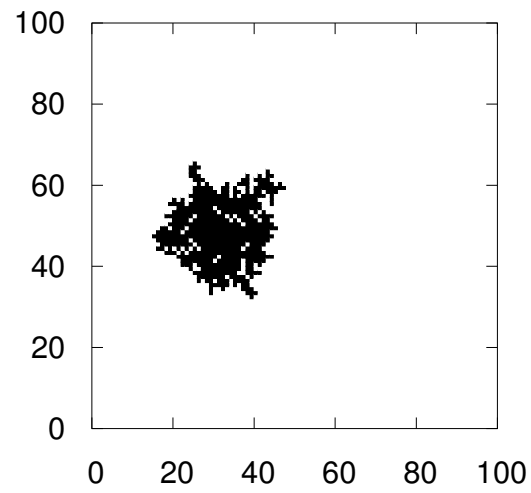


図 4.13: 正方格子の問題グラフからキメラグラフに埋め込まれた部分問題の例 1

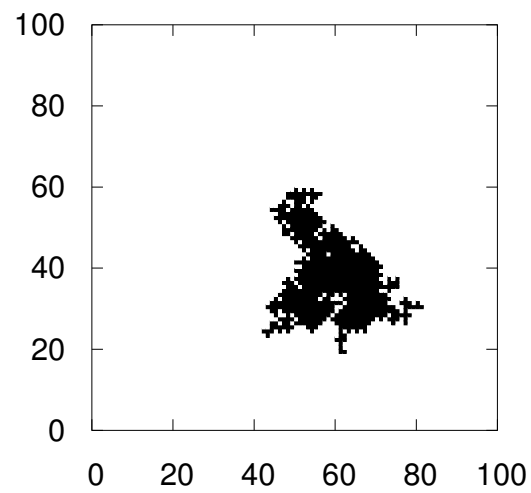


図 4.14: 正方格子の問題グラフからキメラグラフに埋め込まれた部分問題の例 2

表 4.1: ハミルトニアンのパラメータ設定

モデル	P_F	インスタンスの数 (N_J)	初期条件の数 (N_{init})
強磁性	1.0	1	32
スピングラス	0.5	8	8

で与えられる．ここで、 $\langle i, j \rangle$ は 3 次元格子上的最近接スピン対を、 $P(J_{ij})$ は相互作用 J_{ij} の確率分布を、 P_F は強磁性相互作用となる確率を、 δ はディラックのデルタ関数を表し、 J_{ij} は $+J$ と $-J$ の 2 種類の値をとる． P_F は 1.0(強磁性相) と 0.5(スピングラス相) に設定し、 $P_F = 0.5$ に関しては $\{J_{ij}\}$ の実現値が異なる 8 個のインスタンスに対する平均エネルギーを評価する．また、各インスタンスに対して強磁性モデルでは 32 個の異なる初期条件に対して、スピングラスモデルでは 8 個の異なる初期条件に対してエネルギーを評価する (表 4.1 参照)．

今回実施した最適化処理を図 4.15 に示す．近傍範囲の拡大による山登り法の性能変化を確認するため、部分問題を完全グラフの埋め込み [92] を用いて埋め込んだ場合と、提案アルゴリズムを用いて埋め込んだ場合の 2 パターンで解精度を評価する．完全グラフの埋め込みを用いた場合、D-Wave マシンの qubit と相互作用の欠損を考慮すると 63 変数しか埋め込むことができないため、 $4 \times 4 \times 4$ 変数の部分問題を抽出した後、1 つの変数をランダムに部分問題から除く．一方で、提案アルゴリズムを用いた場合は、部分問題サイズの平均値は 380 まで増加する．部分問題を埋め込んだ後に、D-Wave マシンによる最適化を実行して 1,000 個の解候補を出力させる．次に、1,000 個の解候補の中から最もエネルギーが低い解を選び、部分問題の変数の値を更新する．さらに、D-Wave マシンは熱ノイズ等の影響によって極小からズレた解を出力している可能性があるので、デジタルコンピュータで 1 スピンフリップによる山登り法を実行して極小値に到達させる．ここで実施した山登り法は、1 つのスピン変数をランダムに選択し、スピン変数の符号反転によってエネルギーが下がる場合に限って符号を変更する．山登り法による解の改善は、全ての変数に対して符号反転によるエネルギー変化が 0 以上になった時点で終了する．その後、全体のエネルギーを計算し、これまでに得られた中で最小のエネルギーをもつ解を記録した後、再度部分問題の埋め込みに戻って上記の処理を繰り返す．

今回評価する強磁性モデルとスピングラスモデルは、山登り法を含む近傍探索を用いて基底状態を探索する場合に、近傍範囲の拡大が高精度化のための有効な手段になると期待されるモデルである．近傍探索が苦手とする評価関数の形状は主に 2 つあり、平坦な構造をもつ評価関数と局所最適解を多く含む評価関数である．スピングラスモデルでは、強磁性と反強磁性相互作用が同じ確率でランダムに配置されるので多数のフラストレーションをもち、それらが複雑に絡み合うことで多くの局所最適解が発生すると考えられる (第 2.4 節参照)．このような評価関数では、近傍範囲を広げることで現状の暫定解より精度の高い解に更新できる可能性が高まる (図 4.16)．一方で、強磁性モデルは全てのスピン変数が同じ値となる自明な基底状態をもつにも関わらず、評価関数が平坦な構造をもつため、近傍探索によって基底状態を見つけ出すことが難しくなる．ここで、評価関数が平坦な構造をもつというのは、ある解の近傍範囲の中でエネルギーを最小化する解が多数存在することを指す．評価関数が平坦な構造をもつ場合、どのように解を更新していけばエネルギー

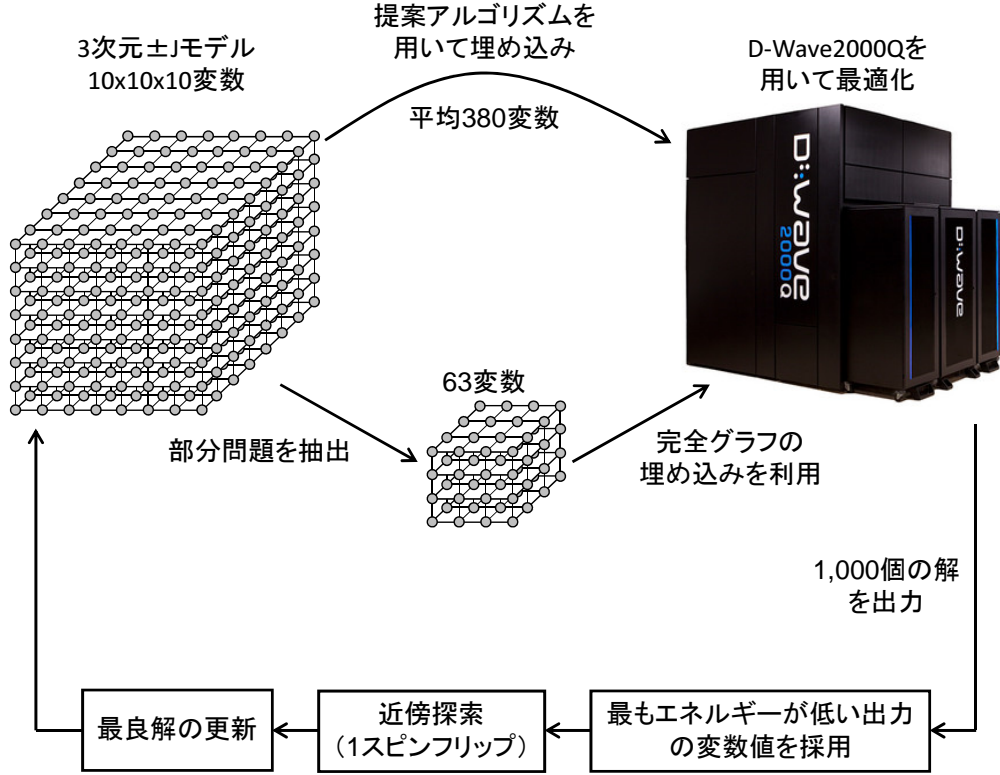


図 4.15: 解精度の評価方法

を下げられるかが分からないため、近傍探索による解の改善が難しくなる（図 4.17 参照）。強磁性モデルで頻繁に発生するドメインウォールは、暫定解が平坦な構造に捕まっていることを表す特徴的な現象である。図 4.18(a) にドメインウォールが発生した状況を示す。スピン変数は $\sigma = +1$ の領域と $\sigma = -1$ の領域に分かれており、 $\sigma = +1$ と $\sigma = -1$ の領域の境目がドメインウォールと呼ばれる。基底状態を得るためには 2 つのドメインウォールを一致させたいのであるが、ドメインウォールを左右に動かしてもエネルギーは変化しないため、片側のドメインウォールに関する局所的な情報を頼りにしてもエネルギーを下げるための更新方法を知ることはできない。しかしながら、図 4.18(b) のように 2 つのドメインウォールを含む部分問題を考えた場合は、部分問題の中で少数派のスピンを多数派に揃えた方がエネルギーが低くなるため、図 4.18(c) に示す最適解に近い状態に更新される。以上のことから、フラストレーションとドメインウォールの両方に対して、部分問題を大きくすることは有効な手段だと言える。

最後に、強磁性モデルとスピングラスモデルに対する解精度の評価結果を示す。各インスタンス $\{J_{ij}\}$ と初期条件 σ_{init} に対して、D-Wave マシンによる部分問題の最適化が N_{opt} 回終了した時点でのエネルギーを $E(N_{\text{opt}}, \{J_{ij}\}, \sigma_{\text{init}})$ とおき、

$$E_{\text{ave}}(N_{\text{opt}}) \equiv \frac{1}{N_J N_{\text{init}}} \sum_{\{J_{ij}\}} \sum_{\{\sigma_{\text{init}}\}} E(N_{\text{opt}}, \{J_{ij}\}, \sigma_{\text{init}}), \quad (4.13)$$

$$E_{\text{min}}(N_{\text{opt}}) \equiv \frac{1}{N_J} \sum_{\{J_{ij}\}} \left[\min_{\sigma_{\text{init}}} E(N_{\text{opt}}, \{J_{ij}\}, \sigma_{\text{init}}) \right], \quad (4.14)$$

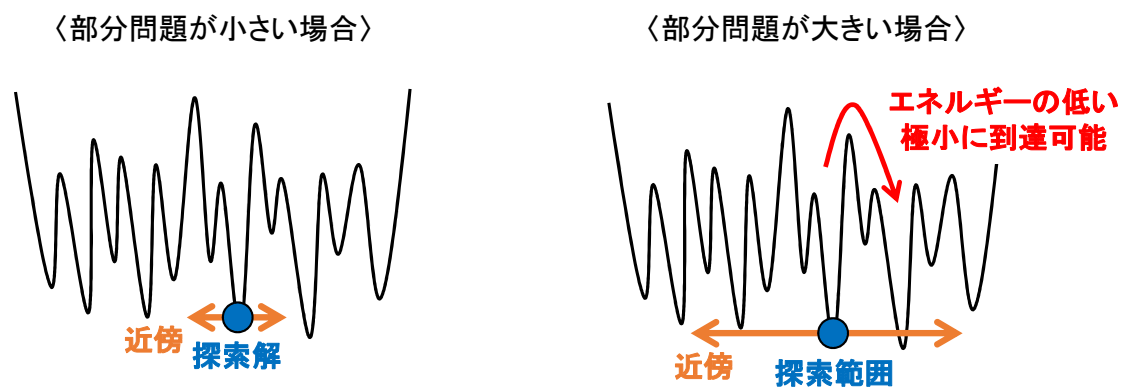


図 4.16: 多数の局所最適解をもつ評価関数で近傍範囲を拡大する効果

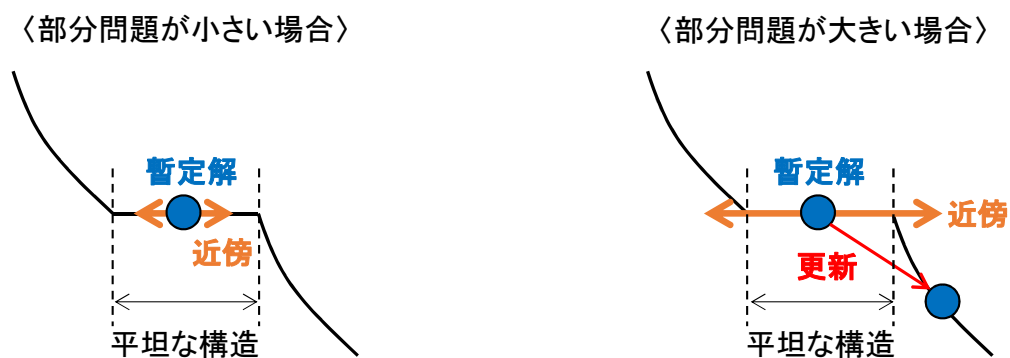


図 4.17: 平坦な構造をもつ評価関数で近傍範囲を拡大する効果

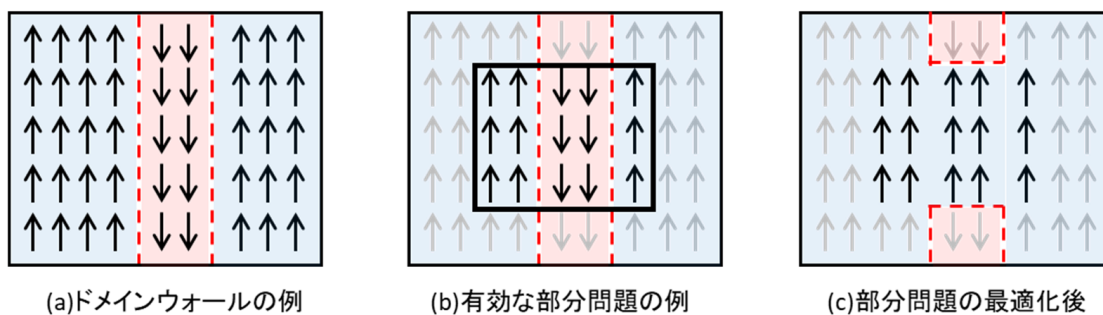


図 4.18: ドメインウォールと近傍範囲を拡大する効果

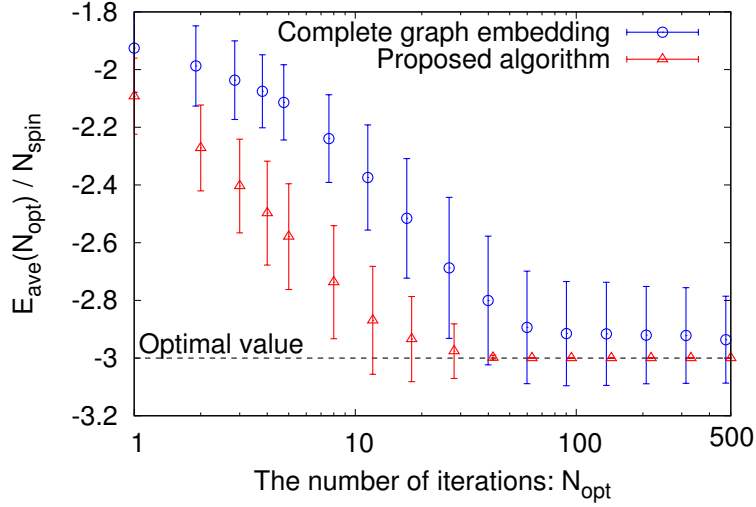


図 4.19: 強磁性モデルに対する $E_{\text{ave}}(N_{\text{opt}})/N_{\text{spin}}$ の評価結果

と定義する．ここで， N_J はインスタンスの数を， N_{init} は初期条件の数を表す（表 4.1 参照）．また，インスタンス $\{J_{ij}\}$ に対する平均は配位平均と呼ばれる．強磁性モデルとスピニングラスモデルに対して，完全グラフの埋め込みを用いた場合と提案アルゴリズムを用いた場合で E_{ave} を比較したのが図 4.19 と 4.20 である．ここで， $N_{\text{spin}} = 1,000$ はスピン変数の数を表し，エラーバーは標準偏差を表す．両方のモデルで提案アルゴリズムを用いた方が高精度な解が得られており，部分問題埋め込みアルゴリズムの工夫による近傍範囲の拡大が重要な意味をもつことを示している．強磁性モデルに関しては基底状態が自明であり，3次元格子の基底エネルギーは -3 となる．提案アルゴリズムを用いた場合は， $N_{\text{opt}} = 43$ の時点で初期条件 σ_{init} に依存せずに基底状態が得られているのに対して，完全グラフの埋め込みを用いた場合は $N_{\text{opt}} = 500$ の段階でも初期状態に依存して基底状態に到達できていないものが存在する．スピニングラスモデルに関しては，今回の評価と同じ Ising モデルの基底エネルギーの配位平均が先行研究 [10] で評価されている．図 4.21 は，完全グラフの埋め込みと提案アルゴリズムを用いた場合の $E_{\text{min}}(N_{\text{opt}})$ を示しており，点線は先行研究 [10] で求められた値を示している．今回の評価によって高精度な解が得られているならば， $E_{\text{min}}(N_{\text{opt}})$ の評価値と先行研究 [10] の値は近い値となっているはずである．提案アルゴリズムを用いた場合，先行研究 [10] の値は $E_{\text{min}}(N_{\text{opt}})$ の標準偏差の範囲内に位置しており，山登り法の拡張のような単純な方法であっても近傍範囲の拡大によって高精度な解が得られることを示している．

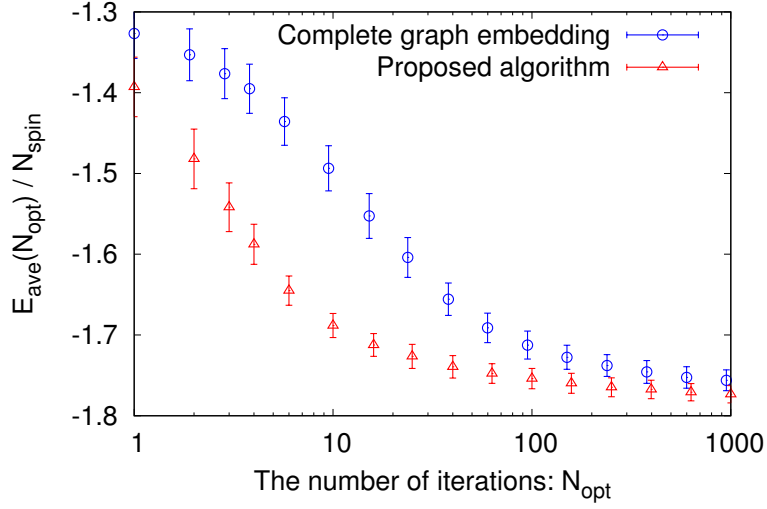


図 4.20: スピングラスモデルに対する $E_{\text{ave}}(N_{\text{opt}})/N_{\text{spin}}$ の評価結果

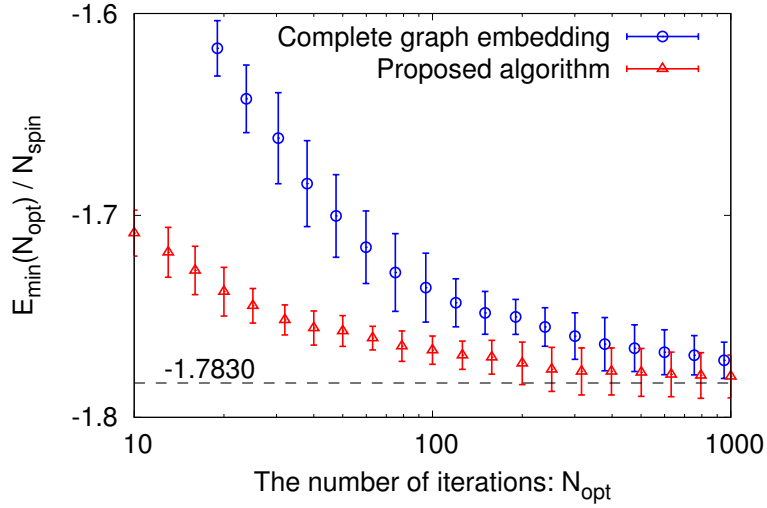


図 4.21: スピングラスモデルに対する $E_{\text{min}}(N_{\text{opt}})/N_{\text{spin}}$ の評価結果

4.7 本章のまとめ

本章では従来の最適化手法と D-Wave マシンのハイブリッド手法について紹介した後、ハイブリッド手法における部分問題の埋め込みアルゴリズムの重要性を説明した。D-Wave マシンの将来的な発展も考慮すると、以下の要件を満たすアルゴリズムが必要となる。

- 計算時間の qubit 数依存性が小さい
- 最大限埋め込み可能な問題サイズと同等の部分問題を埋め込む

- アルゴリズムの中身が相互作用の詳細に依存しない

マイナー埋め込みアルゴリズムはこれまでに多くの方法が提案されているが、上記の要件を満たす方法は存在しない。このため、本章では Cai のアルゴリズムをベースに部分問題の埋め込みアルゴリズムを検討した。提案アルゴリズムは部分問題の埋め込みに照準を絞ることで Cai のアルゴリズムを高速化しており、予約制度の導入によってエッジ数が多い問題グラフにも対応できるようになっている。予約制度はキメラグラフの特徴を利用したものではあるが、「完全グラフの埋め込みを参考にする」という方針に従えば、ハードウェアグラフの変更に対して柔軟に対応できる。また、計算時間に直結する最短経路の探索回数の qubit 数依存性は $O(N_q^{1.27})$ と小さく、部分問題サイズも埋め込み可能な最大サイズと近い qubit 数依存性を示すことを確認できた。さらに、近傍探索が苦手とする評価関数に対して、提案アルゴリズムを用いて大きな部分問題を埋め込むことで、完全グラフの埋め込みを用いた場合に比べて高精度な解が得られることも確認した。これらの結果は、提案アルゴリズムがハイブリッド手法の枠組みで重要なツールとなり得ることを示しており、且つ将来的に D-Wave マシンの制約が変化した場合でも有望なアルゴリズムであることを示している。

近い将来、D-Wave マシンが大規模な組合せ最適化問題を直接解けるようになる可能性は低く、しばらくの間は部分問題に分割する等のハイブリッド手法が主流になると予想される。本章で提案したような部分問題の埋め込みに特化したアルゴリズムの高速化は、これまでにない全く新しい考え方である。この研究成果を契機として、今後ハイブリッド手法の効率的な実行に照準を絞った埋め込みアルゴリズムが活発に研究されることが期待される。

第5章 整数変数で定義された最適化問題の分割方法

5.1 本章の概要

本章では、前章で提案した埋め込みアルゴリズムを発展させて、整数変数で定義された最適化問題（本論文では整数最適化問題と呼ぶ）の効率的な分割方法を検討する。第2.3節で説明したように、D-Wave マシンを用いる場合は整数変数を one-hot 表示によって2値化して、Ising 表現するのが基本となる。本章の第5.2節では one-hot 表示についておさらいし、one-hot 表示した整数最適化問題を部分問題に分割する際の課題を示す。第5.3節では先行研究とその課題を説明し、第5.4節でそれらの課題に対応した分割方法を提案する。第5.5節では提案した方法によって効率的に高精度な解が得られることを示し、第5.6節は得られた結果に対する考察にあてられる。

5.2 one-hot 表示と部分問題分割における課題

本節では one-hot 表示についておさらいし、大規模問題を部分問題に分割する際の課題を示す。ここでは簡単のため、1つの整数変数に絞って話を進めていく。

評価関数が整数変数 $S_i \in (1, 2, \dots, Q)$ で定義されている場合、one-hot 表示では Q 個のブール変数 $\{x_{qi}\}_{q=1,2,\dots,Q}$ を割当てた上で、以下の制約条件（本論文では one-hot 制約と呼ぶ）：

$$\sum_{q=1}^Q x_{qi} = 1, \quad (5.1)$$

を課す。そして、one-hot 制約下で $x_{qi} = 1$ となっている場合に $S_i = q$ とする。或いは、one-hot 制約を満たしているという前提のもとで

$$S_i = \sum_{q=1}^Q qx_{qi}, \quad (5.2)$$

と書くこともできる。 $Q = 4$ の場合に、 S_i を one-hot 表示した様子を図5.1に示す。ここで注意しなければならないのは、D-Wave マシンでは制約条件付きの組合せ最適化問題をそのままの形で取り扱えないため、one-hot 制約はペナルティ項:

$$\lambda \left(\sum_{q=1}^Q x_{qi} - 1 \right)^2, \quad (5.3)$$

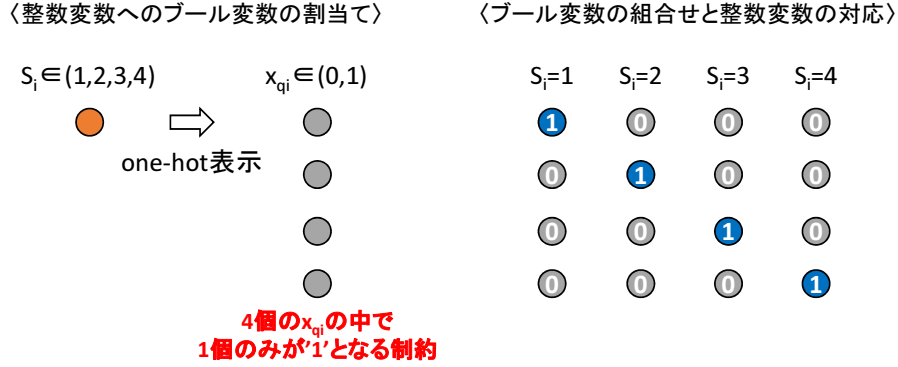


図 5.1: $Q = 4$ の場合の整数変数の one-hot 表示

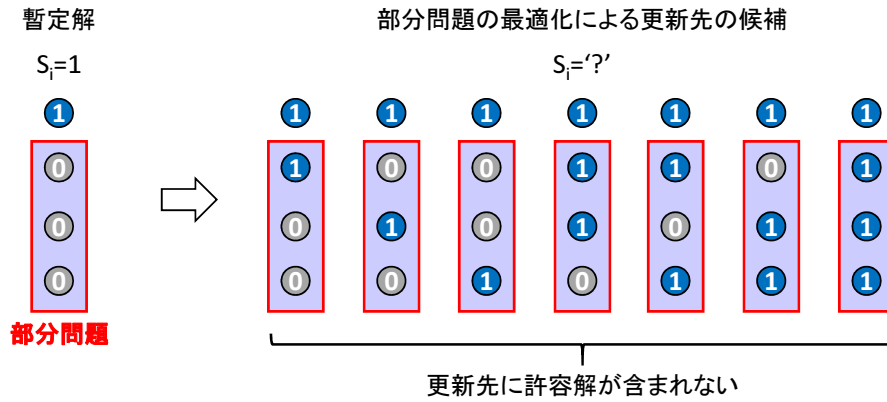


図 5.2: 非効率的な部分問題の例

として評価関数に取り込まれるということである。つまり、D-Wave マシンを用いて整数最適化問題を解く場合には、 2^Q 個の組合せの中から one-hot 制約を満たし、且つ評価関数を最小化する組合せを探索することになる。one-hot 制約を満たす組合せ（本論文では許容解と呼ぶ）は Q 個しか存在しないので、 Q が増えるほど全体の組合せに占める許容解の割合が減少する。このような one-hot 表示の冗長性に起因して、one-hot 表示した大規模な整数最適化問題を部分問題に分割する際には、部分問題の解空間に許容解が可能な限り多く含まれるように工夫する必要がある。例えば、 $Q = 4$ の整数変数の暫定解が $S_i = 1$ の場合に、非効率的な部分問題への分割方法を図 5.2 に示す。このような部分問題を抜き出してしまった場合、部分問題の最適化による更新先の候補に許容解が含まれないため、暫定解より評価関数値が小さい許容解を探索することはできない。本章の目的は、前章で提案したアルゴリズムを発展させて、one-hot 表示した整数最適化問題の効率的な分割方法を提案することである。

5.3 one-hot 制約下の分割に関する先行研究

ハイブリッド手法に特化したマイナー埋め込みの先行研究が存在しなかったのと同様に、one-hot 制約下の効率的な分割方法に関する先行研究も非常に少なく、調査した範囲で見つかったのは 1 件だけである。先行研究 [38] では広告配信の最適化を 2 次割り当て問題

として表現して D-Wave マシンを適用しており、ハミルトニアンは第 2.3 節で示した巡回セールスマンと同様の形となる。ここでは、巡回セールスマン問題のハミルトニアン:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^N \sum_{q'=1}^N d(q, q') x_{qi} x_{q', i+1} + \lambda_1 \sum_{q=1}^N \left(\sum_{i=1}^N x_{qi} - 1 \right)^2 + \lambda_2 \sum_{q=1}^N \left(\sum_{i=1}^N x_{qi} - 1 \right)^2, \quad (5.4)$$

を用いて先行研究の分割方法を説明する。前節の整数変数の one-hot 表示では q 方向にのみ one-hot 制約が課せられていた [式 (5.3)] が、巡回セールスマン問題では q 方向と i 方向の両方に one-hot 制約が課せられる [式 (5.4) の第 2 項と第 3 項] ので、単純な整数最適化問題よりも複雑な状況である。先行研究では、最初に q 方向と i 方向の one-hot 制約を満たす許容解を暫定解として設定する。図 5.3(a) に許容解の例を示してあり、それぞれの行と列で $x_{qi} = 1$ が 1 個ずつ配置されている。この暫定解を部分問題の最適化によって改善していくにあたって、先行研究では図 5.3(b) に示すように $x_{qi} = 1$ となっているブール変数を複数選択して赤枠で囲む。その上で、図 5.3(c) に示すようにそれぞれの赤枠を行方向と列方向に伸ばした後、複数の赤枠に共通して含まれるブール変数を部分問題として抜き出す [図 5.3(d) 参照]。このようにして部分問題を抜き出すことで、部分問題の解空間に許容解が必ず含まれることになり、この例では図 5.3(e) に示す許容解への遷移が可能となる。図 5.3 で示した方法で部分問題を抜き出した後、先行研究では完全グラフの埋め込みを用いて部分問題をキメラグラフに埋め込んでいる。

ここで説明した方法には以下の 2 つの課題がある。

- 完全グラフの埋め込みを用いているため部分問題のサイズが小さい
- 部分問題の解空間に one-hot 制約を満たさな組合せが含まれる

次節では、one-hot 制約が q 方向にのみ課せられた整数最適化問題に対して、上記の課題に対応する方法を検討していく。

5.4 効率的な分割方法の提案

大規模な整数最適化問題を分割する方法として、整数分割と 2 値分割の 2 つの方法を提案する。整数分割は先行研究 [38] と同様の分割方法であるが、前章で提案したアルゴリズムを発展させて大きな部分問題を埋め込めるように改良する。2 値分割は部分問題の解空間が許容解のみで構成される分割方法で、整数分割と比較して多くの許容解を解空間に含む部分問題を抜き出すことができる。

5.4.1 整数分割の方法

整数分割では先行研究 [38] と同様の考え方によって部分問題を抜き出す。この方法では、暫定解で $S_i = q$ となっている整数変数に対して、 $x_{qi} = 1$ のブール変数に加えて、 $x_{q'i} = 0 (q' \neq q)$ のブール変数の少なくとも 1 つ以上を部分問題として抜き出す。整数分割の簡単な例を図 5.4 に示す。この例では、部分問題の最適化によって $S_i = 2$ や $S_i = 3$ に

	i=1	2	3	4	5
q=1	1	0	0	0	0
2	0	0	0	0	1
3	0	0	1	0	0
4	0	1	0	0	0
5	0	0	0	1	0

縦方向と横方向のone-hot制約

(a)one-hot制約を満たす解

	i=1	2	3	4	5
q=1	1	0	0	0	0
2	0	0	0	0	1
3	0	0	1	0	0
4	0	1	0	0	0
5	0	0	0	1	0

(b)'1'となっている2値変数を選択

	i=1	2	3	4	5
q=1	1	0	0	0	0
2	0	0	0	0	1
3	0	0	1	0	0
4	0	1	0	0	0
5	0	0	0	1	0

(c)赤枠を縦と横に伸ばす

	i=1	2	3	4	5
q=1	1	0	0	0	0
2	0	0	0	0	1
3	0	0	1	0	0
4	0	1	0	0	0
5	0	0	0	1	0

(d)部分問題として抽出される変数

	i=1	2	3	4	5
q=1	0	0	1	0	0
2	0	0	0	0	1
3	1	0	0	0	0
4	0	1	0	0	0
5	0	0	0	1	0

(e)更新可能な許容解

図 5.3: 先行研究 [38] の分割方法

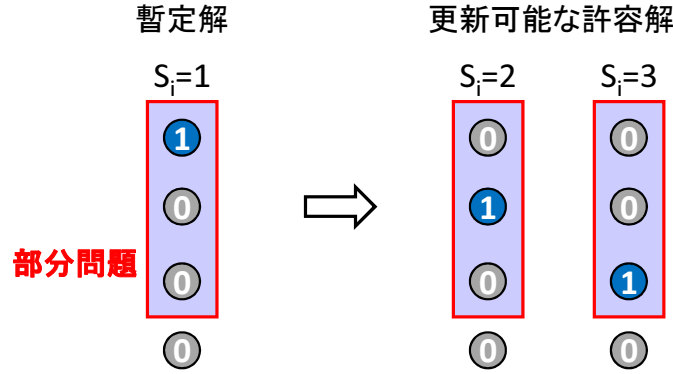


図 5.4: 整数分割の例

更新される可能性がある．図 5.4 では簡単のため 1 つの整数変数を用いて説明したが，実際の整数最適化問題は複数の整数変数によって定義されるので，それぞれの整数変数に対して同様の処理をして部分問題を抜き出す．また，整数変数が多い場合には部分問題に含まれない整数変数も発生する．

整数分割を実際に利用する際には，整数分割の条件を満たす大きな部分問題をどのようにして埋め込むかが課題となる．前章で提案した部分問題の埋め込みアルゴリズムは埋め込み易い変数のみで部分問題を構成していた．一方で，整数分割では one-hot 制約に起因して埋め込まれるべき変数が決められる．このため，整数分割で前章のアルゴリズムを利用するためには，「埋め込み易い変数」と「埋め込まれるべき変数」という 2 つの要素を両立するように修正を加える必要がある．ここでは，「埋め込むべき変数」の存在を考慮してブール変数の埋め込み順序を工夫することにした．具体的には，最初に整数変数 S_{init} をランダムに 1 つ選択し， S_{init} に割当てられたブール変数を埋め込んだ後，以下の手続きに沿って次に埋め込まれるブール変数を選択する．ここで，以下の文章に出てくる「埋め込み済みの整数変数」とは，整数変数に割当てられたブール変数が既にハードウェアグラフ上に埋め込まれた整数変数を指す．

1. 埋め込み済みの整数変数 S_{ctr} を埋め込んだ順番に選択する．
2. S_{ctr} に隣接する未埋め込みの整数変数 $\{S_i\}$ を取得する．
3. 隣接変数 $\{S_i\}$ の中から整数変数 S_i をランダムに 1 つ選択する．
4. 整数変数 S_i に割当てられたブール変数 $\{x_{qi}\}_{q=1,2,\dots,Q}$ を取得する．
5. $\{x_{qi}\}$ の中から，暫定解において $x_{qi} = 1$ となっているブール変数を選択してハードウェアグラフに埋め込む．
6. $\{x_{qi}\}$ の中から，暫定解において $x_{qi} = 0$ となっているブール変数をランダムな順番でハードウェアグラフに埋め込む．

提案アルゴリズムでは重複割当てが必要な場合に埋め込みを諦めるため， S_i に割当てられたブール変数 $\{x_{qi}\}_{q=1,2,\dots,Q}$ の埋め込みが終了した時点で，以下の要件を満たしているかを確認する必要がある．

〈 $x_{qi}=1$ のブール変数が含まれていない〉

〈ブール変数が1個しか含まれていない〉



図 5.5: 部分問題から除外すべき例

- $x_{qi} = 1$ のブール変数を含めて 2 つ以上のブール変数の埋め込みに成功している。

図 5.5 に示すように、もしこの要件を満たしていない場合は S_i を部分問題として含めるべきではなく、埋め込みに成功したブール変数をハードウェアグラフ上から取り除かなければならない。前章のアルゴリズムに埋め込み順序の修正を加えることで、整数分割の要件を満たす部分問題を埋め込めることは第 5.5 節で示す。

5.4.2 2 値分割の方法

2 値分割の方法では、部分問題の解空間が許容解のみで構成されるように分割する。2 値分割では以下の手順に沿って部分問題をハードウェアグラフに埋め込む（図 5.6 参照）。

1. 全ての整数変数に対して、 $x_{qi} = 1$ のブール変数に加えて、 $x_{q'i} = 0 (q' \neq q)$ のブール変数を 1 つランダムに選択して部分問題として抜き出す。このように部分問題を抜き出した場合、各整数変数で探索可能な許容解は 1 つに絞られるため、「暫定解を維持する」か「探索可能な許容解に遷移する」かの 2 択問題に落とし込むことができる。
2. 上記の 2 択を表す新たな 2 値変数 $\{y_i\}_{i=1,2,\dots,N}$ ($y_i = 0$: 維持, $y_i = 1$: 遷移) をそれぞれの整数変数に対して導入し、2 値の部分問題を生成する。
3. 2 値の部分問題に対して部分問題の埋め込みアルゴリズムを適用して、 $\{y_i\}$ の一部をキメラグラフに埋め込む。

次に、 $\{y_i\}_{i=1,2,\dots,N}$ で定義される 2 値の部分問題のハミルトニアンを示す。もともとの問題のハミルトニアンが $x_{qi} \in (0, 1)$ を用いて

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{(ij) \in E_p} \sum_{q=1}^Q \sum_{q'=1}^Q Q_{ij}^{qq'} x_{qi} x_{q'j} + \sum_{i \in V_p} \sum_q Q_{ii}^{qq} x_{qi} + \lambda \sum_{i \in V_p} \left(\sum_{q=1}^Q x_{qi} - 1 \right)^2, \quad (5.5)$$

で与えられているとする。ここで、 $Q_{ij}^{qq'}$ は x_{qi} と $x_{q'j}$ の相互作用を、 $\sum_{i \in V_p}$ は全ての整数変数に対する和を、 $\sum_{(ij) \in E_p}$ は相互作用する整数変数のペアに対する和を表す。この場合

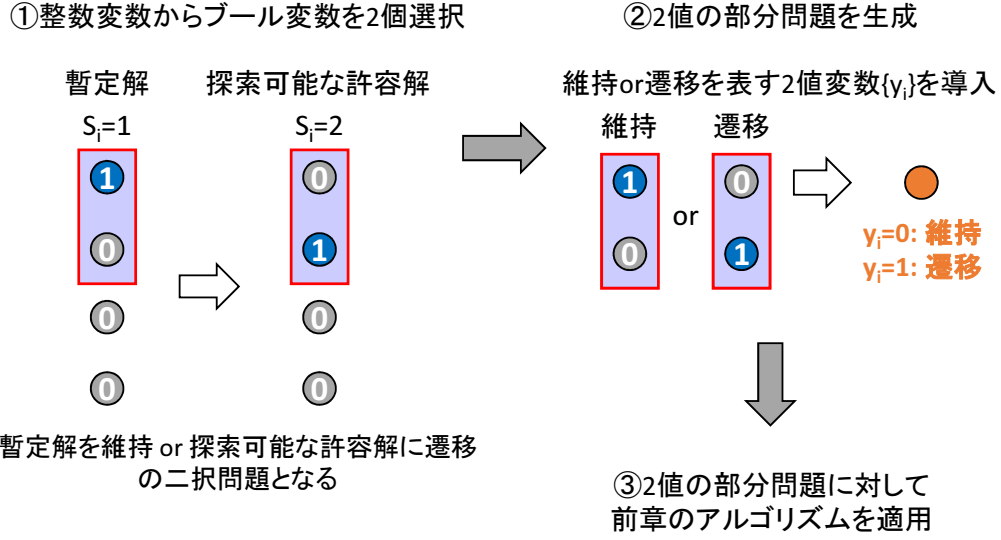


図 5.6: 2 値分割の方法の説明図

の 2 値の部分問題のハミルトニアン $\mathcal{H}_{\text{Binary}}$ は

$$\mathcal{H}_{\text{Binary}} = \sum_{(ij) \in E_p} R_{ij} y_i y_j + \sum_{i \in V_p} R_{ii} y_i, \quad (5.6)$$

$$R_{ij} = Q_{ij}^{\alpha_i \alpha_j} - Q_{ij}^{\alpha_i \beta_j} - Q_{ij}^{\beta_i \alpha_j} + Q_{ij}^{\beta_i \beta_j}, \quad (5.7)$$

$$R_{ii} = \sum_{k \in \partial i} (Q_{ik}^{\beta_i \alpha_k} - Q_{ik}^{\alpha_i \alpha_k}) - Q_{ii}^{\alpha_i \alpha_i} + Q_{ii}^{\beta_i \beta_i}, \quad (5.8)$$

となることが容易に示せる．ここで，暫定解において $S_i = \alpha_i$ であり， β_i は S_i の遷移先の候補を表す．2 値の部分問題を定義する 2 値変数 $\{y_i\}$ は許容解の間の遷移を表しているの
で，2 値の部分問題に含まれる全ての状態は one-hot 制約を満たしている．このため，式
(5.6) にはペナルティ項が含まれていない．ペナルティ項が x_{qi} と $x_{q'i}$ の間で全結合相互
作用を発生させることも考慮すると，2 値分割の長所として以下の 3 つを挙げることがで
きる．

- 部分問題の解空間が許容解のみで構成される．
- 2 値の部分問題では相互作用が少なくなっており，多くのブール変数を埋め込める．
- ペナルティ項の強さを決めるパラメータ λ を調整する手間が省ける．

特に 1 番目と 2 番目の長所によって，2 値分割で抽出した部分問題の解空間には，整数分
割で抽出した場合に比べて多くの許容解が含まれるようになる．一方で，各整数変数に対
して 2 つの状態しか考慮していないことに起因して，次節で示すように強磁性 Potts モデ
ルにおける性能が著しく悪化する．

表 5.1: ハミルトニアンのパラメータ設定

モデル	J_{ij}	Δ_{ij}
強磁性 Potts モデル	+1	0
反強磁性 Potts モデル	-1	0
Potts グラスモデル	+1(50%) or -1(50%)	0
Potts ゲージグラスモデル	-1	0(50%) or +1(25%) or -1(25%)

5.5 評価結果

本節では、部分問題の分割方法を工夫することで高精度な解を効率的に得られることを示した後、部分問題の解空間に含まれる許容解の数を整数分割と 2 値分割で比較する。また、整数分割によって想定通りの部分問題が埋め込めていることも確認する。

5.5.1 解精度の比較

まず、前章の部分問題埋め込みアルゴリズムを整数最適化問題に直接適用した場合に比べて、整数分割と 2 値分割を用いた方が高精度な解を少ない繰り返し回数で得られることを示す。問題設定は、 $10 \times 10 \times 10$ 変数の 3 次元 Potts モデル [96] の基底状態探索とする。Potts モデルとは Ising モデルを一般化したモデルで、ハミルトニアンが整数変数によって定義される。今回の評価では以下のハミルトニアンで与えられる Potts モデルを用いる。

$$\mathcal{H}_{\text{potts}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \delta(S_i, S_j + \Delta_{ij}). \quad (5.9)$$

ここで、 $S_i \in (1, 2, 3, 4)$, $\Delta_{ij} \in (-1, 0, +1)$, $J_{ij} \in (-1, +1)$ であり、 δ はクロネッカーのデルタを表す。また、 $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は 3 次元格子上で隣接する整数変数のペアに対する和を表す。ハミルトニアンに含まれるパラメータは表 5.1 に示すように設定され、以下の 4 種類のモデルに対して解精度を評価する。

- 強磁性 Potts モデル
- 反強磁性 Potts モデル
- Potts グラスモデル
- Potts ゲージグラスモデル

強磁性と反強磁性 Potts モデルは全ての局所エネルギーを最小化する自明な基底状態をもつ。一方で、Potts グラスモデルと Potts ゲージグラスモデルにはフラストレーションが存在し、ハミルトニアンが多く局所最適解をもつことが予想される [97–99]。

Potts モデルのハミルトニアン [式 (5.9)] を one-hot 表示すると

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sum_{q=1}^4 x_{qi} x_{q-\Delta_{ij},j} + \lambda \sum_{i=1}^{1000} \left(\sum_{q=1}^4 x_{qi} - 1 \right)^2, \quad (5.10)$$

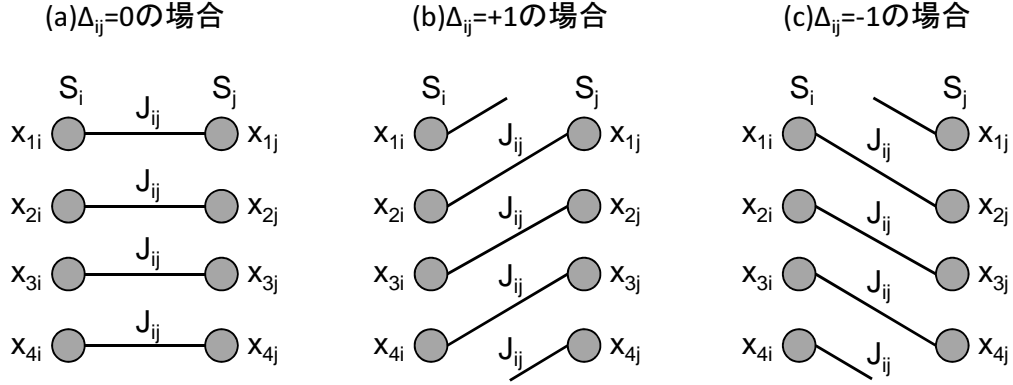


図 5.7: 隣接する整数変数に割当てられたブール変数間の相互作用

となる．ここで，第二項は one-hot 制約に起因するペナルティ項であり，式 (5.9) と式 (5.10) の基底状態を一致させるためには λ を十分大きな正の値に設定しなければならない．隣接する整数変数間の相互作用が，one-hot 表示でどのように表現されるかを示したのが図 5.7 である．ブール変数間の相互作用の強さは全て J_{ij} で与えられるが， Δ_{ij} の値に依存して相互作用するブール変数のペアが異なる．

今回の評価で実行した最適化処理を図 5.8 に示す．部分問題への分割方法の違いによる解精度への影響を確認するため，部分問題をランダム分割，整数分割，2 値分割の 3 つの方法で抜き出して比較する．ここで，ランダム分割では one-hot 制約の構造を無視して，前章の部分問題埋め込みアルゴリズムを直接適用する．部分問題は D-Wave マシンを用いて最適化する．D-Wave マシンに 1000 個の近似解を出力させ，部分問題の変数は最もエネルギーの低い解の値に更新される．ここで，D-Wave マシンの出力は近似解であり，マシン内部の熱ノイズ等の影響も受けて one-hot 制約を満たさない解や，局所最適解からズレた解が出力される可能性があることに注意が必要である．そこで，本評価では古典コンピュータによる事後処理として制約の修復と山登り法による極小化を行う．制約の修復では，one-hot 制約を破っているブール変数 $\{x_{qi}\}_{q=1,2,3,4}$ を整数変数単位で抜き出し，one-hot 制約を満たす組合せの中でエネルギーを最も小さくするものに更新する．この処理を one-hot 制約を破っている全てのブール変数 $\{x_{qi}\}_{q=1,2,3,4}$ に対して実行し，D-Wave 出力の近傍にある許容解を作り出す．その後，山登り法による極小化では整数変数 S_i をランダムに 1 つ選択し，エネルギーを最も小さくする値に S_i を更新する．全ての整数変数に対して， S_i の更新によるエネルギー変化が 0 以上になった時点で山登り法による改良が終了する．最後に，最適化処理の中で得られた最もエネルギーの低い解を記憶して，上記の処理を繰り返す．

評価条件は表 5.2 に示した通りである（ λ の設定理由に関しては付録 A を参照）．Potts グラスモデルと Potts ゲージグラスモデルに関しては，それぞれ表 5.1 に示した確率に従って $\{J_{ij}\}$ と $\{\Delta_{ij}\}$ の実現値が異なる 8 個の問題を生成して平均を取る．各インスタンス $\{J_{ij}\}, \{\Delta_{ij}\}$ と初期条件 σ_{init} に対して，D-Wave マシンによる部分問題の最適化が N_{opt} 回終了した時点でのエネルギーを $E(N_{\text{opt}}, \{J_{ij}\}, \{\Delta_{ij}\}, \sigma_{\text{init}})$ とおいたとき，各モデルに対

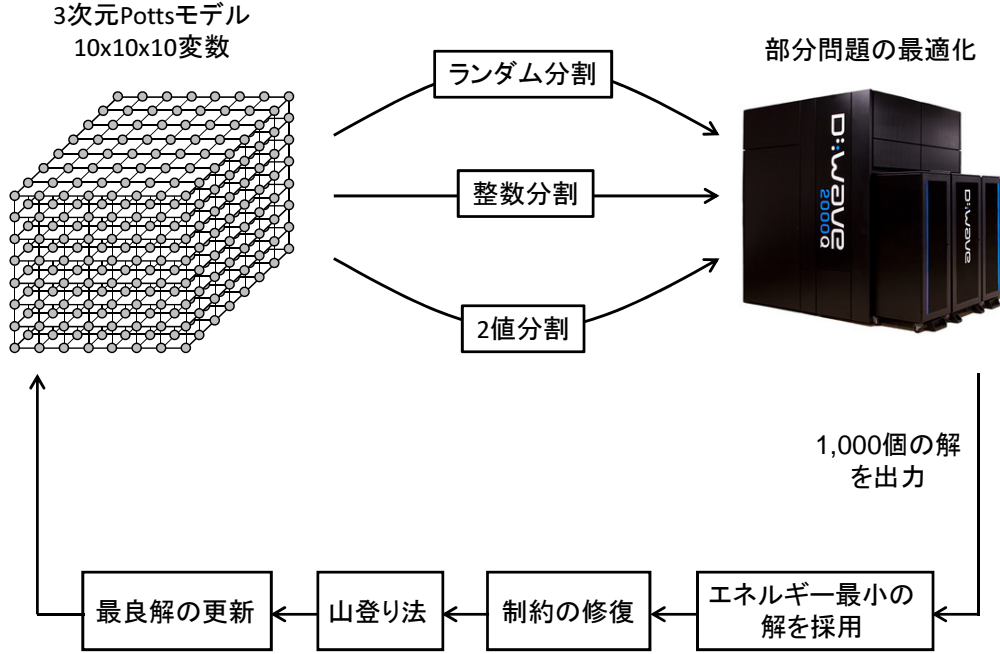


図 5.8: 解精度の評価方法

表 5.2: 評価条件

モデル	インスタンスの数 (N_{problem})	初期条件の数 (N_{init})	λ
強磁性 Potts モデル	1	16	3.3
反強磁性 Potts モデル	1	16	1.0
Potts グラスモデル	8	8	3.3
Potts ゲージグラスモデル	8	8	3.3

して

$$E_{\text{ave}}(N_{\text{opt}}) \equiv \frac{1}{N_{\text{problem}} N_{\text{init}}} \sum_{\{J_{ij}\}} \sum_{\{\Delta_{ij}\}} \sum_{\sigma_{\text{init}}} E(N_{\text{opt}}, \{J_{ij}\}, \{\Delta_{ij}\}, \sigma_{\text{init}}), \quad (5.11)$$

を評価する．ここで，2 値分割を用いた場合には，部分問題が one-hot 制約のペナルティ項を含まないので λ を決める必要はない．表 5.2 の λ はランダム分割と整数分割を用いた場合に利用する．

強磁性 Potts モデルと反強磁性 Potts モデルに対する評価結果を図 5.9 と 5.10 に示す．横軸は D-Wave マシンによる部分問題の最適化を繰り返した回数を表し， N_{integer} は整数変数の数 ($N_{\text{integer}} = 1,000$) を表す．強磁性 Potts モデルの基底エネルギーは -3 であり，反強磁性 Potts モデルの基底エネルギーは 0 である．これらのモデルでは予想に反して，ランダム分割と整数分割の解精度がほぼ同等となっている．また，2 値分割に関しては，反強磁性 Potts モデルではランダム分割に対して少ない繰り返し回数で最適解が得られているが，強磁性 Potts モデルではランダム分割に対して解精度が悪化している．図 5.11 と 5.12 は Potts グラスモデルと Potts ゲージグラスモデルに対する評価結果である．これら

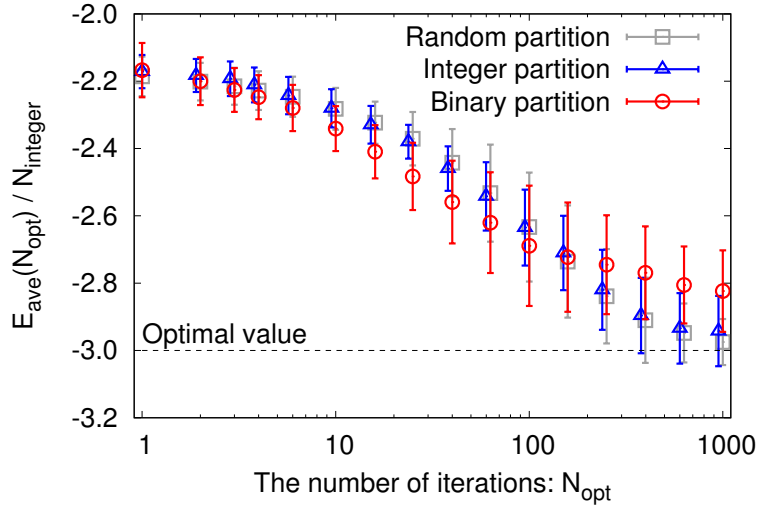


図 5.9: 強磁性 Potts モデルに対する解精度の評価結果

のモデルでは、ランダム分割に対して整数分割と2値分割の解精度が良くなるという期待通りの結果が得られている。また、その中でも2値分割の解精度が最も良い。ここでの評価結果に対しては、以下の3つの疑問が湧く。

1. 強磁性と反強磁性 Potts モデルで、ランダム分割の解精度が改善しないのは何故か。
2. 強磁性 Potts モデルで2値分割の解精度が著しく悪化するのでは何故か。
3. 強磁性 Potts モデル以外で2値分割の解精度が最も良いのは何故か。

これらの疑問に関しては次節で考察する。ここでの評価結果で注目すべきことは、フラストレーションが存在し、基底状態を探索するのが難しいと考えられる Potts グラスモデルと Potts ゲージグラスモデルに対して、分割方法の工夫によって高精度な解が得られているということである。

5.5.2 部分問題に含まれる許容解の数

次に、整数分割と2値分割を用いて抜き出した部分問題に含まれる許容解の数を比較する。ここでは、Potts ゲージグラスモデルに対して1,000回部分問題を埋め込んだ時の平均性能を示す。3つの分割方法に対して、前章で提案した部分問題埋め込みアルゴリズムを用いた場合と完全グラフの埋め込みを用いた場合で、部分問題の解空間に含まれる許容解の数 N_{feasible} を比較したのが表 5.3 である。ただし、完全グラフの埋め込みを用いた場合は埋め込む変数を自由に選べるので、敢えてランダム分割との組合せを考える意味はない。提案アルゴリズムを用いた場合の許容解の数は、全ての分割方法で完全グラフの埋め込みを用いた場合より多くなっていることが分かる。また、整数分割と2値分割を用いることで、部分問題の解空間に含まれる許容解の数がランダム分割に対して増加している。整数分割に対して、2値分割の方が許容解の数が増える理由としては以下の2つが考えられる。

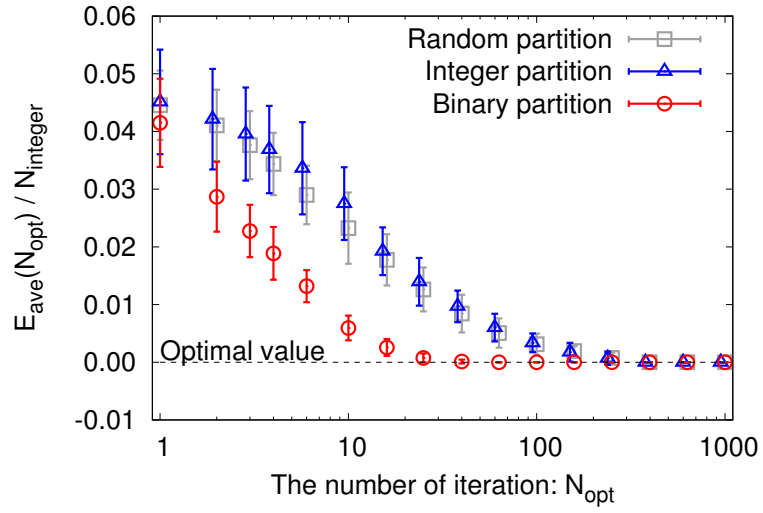


図 5.10: 反強磁性 Potts モデルに対する解精度の評価結果

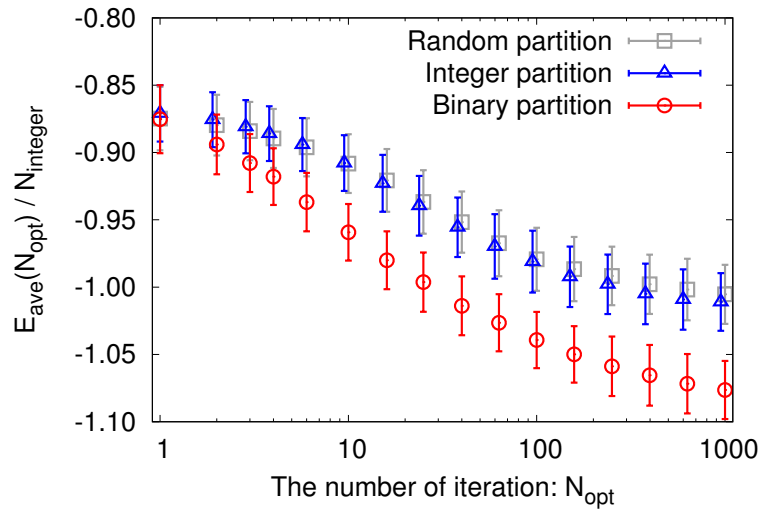


図 5.11: Potts グラスモデルに対する解精度の評価結果

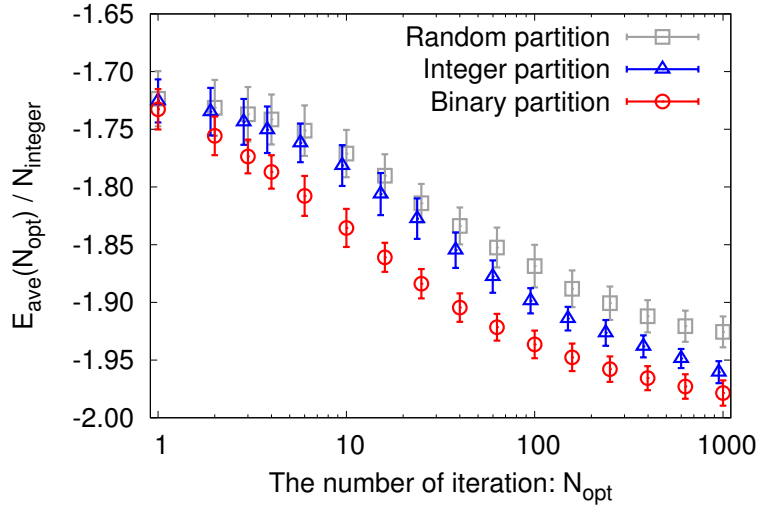


図 5.12: Potts ゲージグラスモデルに対する解精度の評価結果

表 5.3: 部分問題の解空間に含まれる許容解の数: $\log N_{\text{feasible}}$

	前章で提案した埋め込みアルゴリズム	完全グラフの埋め込み
ランダム分割	25.3	-
整数分割	33.9	9.6
2 値分割	122.8	19.3

- 2 値分割によって抜き出した部分問題の解空間は許容解のみを含む
- 2 値分割の部分問題の方が多くのブール変数をキメラグラフ上に埋め込める

2 番目の理由は、2 値分割の部分問題のハミルトニアンが one-hot 制約のペナルティ項を含まないことが重要な寄与をしている。つまり、ペナルティ項は同じ整数変数に割当てられたブール変数間に全結合相互作用を発生させるが、2 値分割で抜き出した部分問題のハミルトニアンはペナルティ項を含まない。この結果として、部分問題の相互作用の数が整数分割に対して減少し、多くのブール変数を埋め込めるようになる。部分問題埋め込みアルゴリズムを用いてキメラグラフ上に埋め込まれたブール変数の数を、それぞれの分割方法で比較したのが表 5.4 である。

表 5.4: 各分割方法でキメラグラフ上に埋め込まれたブール変数の数

分割方法	ブール変数の数
ランダム分割	354.1
整数分割	225.6
2 値分割	408.1

表 5.5: 各整数変数で埋め込まれたブール変数の数の内訳

ブール変数の数	割合 [%]
2	22.1
3	12.2
4	65.7

また、前章の部分問題の埋め込みアルゴリズムを用いて整数分割の部分問題が想定通り埋め込まれていることも確認する必要がある。2 値分割では 2 値の部分問題を抜き出すため、整数分割では各整数変数に割当てられた 4 つのブール変数の中で 3 つ以上が埋め込まれていることが望ましい。部分問題に含まれる各整数変数に対して、埋め込まれたブール変数の数の内訳を示したのが表 5.5 である。部分問題に含まれる整数変数の中で 65.7% は 4 つのブール変数が全て埋め込まれており、3 つ以上のブール変数が埋め込まれる割合は 77.9% となっている。この結果から、整数分割では 2 値分割とは異なる部分問題を埋め込めていると言える。

5.6 考察

本節では、解精度の評価において得られた以下の 3 つの疑問に対する考察にあてられる。

1. 強磁性と反強磁性 Potts モデルで、ランダム分割の解精度が改善しないのは何故か。
2. 強磁性 Potts モデルで 2 値分割の解精度が著しく悪化するのでは何故か。
3. 強磁性 Potts モデル以外で 2 値分割の解精度が最も良いのは何故か。

最初の疑問に対する答えとして考えられるのは、強磁性や反強磁性 Potts モデルでは one-hot 制約を破る組合せを経由して現状の暫定解を改善していけることが挙げられる。つまり、one-hot 制約を破る組合せであるにも関わらず、現状の暫定解よりもエネルギーが低い組合せが近傍に存在し、この組合せを経由してさらにエネルギーの低い許容解に到達できる（図 5.13 参照）。ここでは、簡単のため 1 次元強磁性 Potts モデルを例にとって説明する。1 次元 Potts モデルでは各整数変数が隣接する 2 つの整数変数と相互作用しており、図 5.14(a) は one-hot 表示した場合の問題グラフを示している。整数変数 S_i と S_{i+1} の間の局所エネルギー $-J\delta(S_i, S_j)$ ($S_i = S_j$ のときに局所エネルギーが小さくなる) はブール変数を用いて

$$-J \sum_{q=1}^Q x_{qi} x_{q,i+1}, \quad (5.12)$$

と表され、 $x_{qi} = x_{q,i+1} = 1 (S_i = S_{i+1} = q)$ の場合に $-J$ となり、 $x_{qi} = x_{q',i+1} = 1 (S_i = q, S_{i+1} = q' \neq q)$ の場合に 0 となる。ここで、現状の暫定解が図 5.14(a) となっている状態で、これを改善するために x_{1i} が部分問題として選択されたとする。当然ながら、この



図 5.13: one-hot 制約を破る状態を経由した暫定解の改善

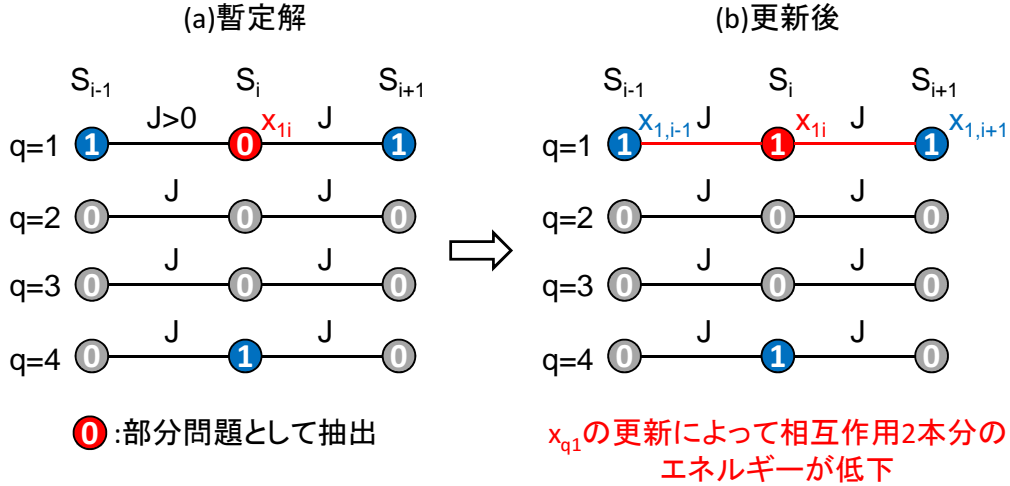


図 5.14: 1次元強磁性 Potts モデルにおける暫定解の改善例

部分問題は更新先の候補に許容解を含まない．部分問題の変数を $x_{1i} = 0$ から $x_{1i} = 1$ に更新した場合のエネルギー変化 ΔE は

$$\Delta E = -2J + \lambda, \quad (5.13)$$

となる．ここで，第一項は $x_{1,i-1} = x_{1i} = x_{1,i+1} = 1$ となることで得するエネルギーを表しており，第二項は one-hot 制約を破ることによるペナルティを表している [図 5.14(b) 参照]．1次元強磁性 Potts モデルの基底状態を正しく表現するためには $\lambda > J$ で十分であることは簡単に示すことができ， $J < \lambda < 2J$ と設定されている場合は one-hot 制約を破るにも関わらずエネルギーが減少 ($\Delta E < 0$) する．つまり，わざわざ整数分割のような方法を用いるまでもなく，one-hot 制約を破る組合せを経由して暫定解を改善していける．ここで重要なことは， x_{1i} の更新によって複数のブール変数間の局所エネルギーが同時に最小化されていることであり，その結果として制約を破ることによるペナルティを打ち消してエネルギーが下がっていることである．複数の局所エネルギーを同時に最小化できるか否かは問題に依存して決まり，フラストレーションが存在する Potts グラスモデルや Potts ゲージグラスモデルではこのような状況は発生しにくい．一方で，強磁性や反強磁性 Potts モデルの基底状態では全ての整数変数間の局所エネルギーを最小化できるため，ランダム分割を用いても暫定解を改善していけると考えられる．

2 番目の疑問に対する答えとして，2 値分割を用いた場合はドメインウォールを解消できる部分問題が選択されにくいことが挙げられる．ここでも，簡単のため 1次元強磁性 Potts モデルを例にとって説明する．10 個の整数変数をもつ 1次元強磁性 Potts モデル

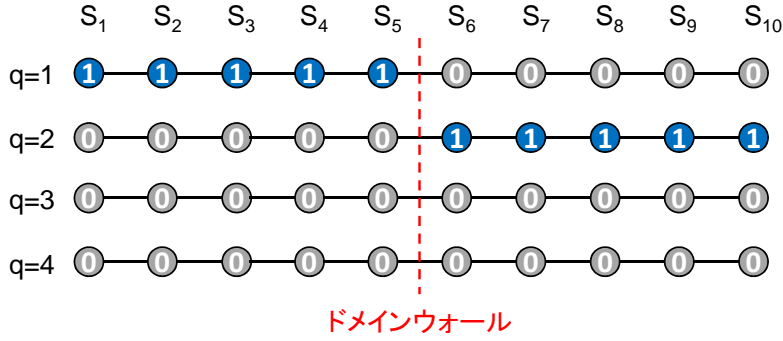


図 5.15: 1 次元強磁性 Potts モデルにおけるドメインウォールの例

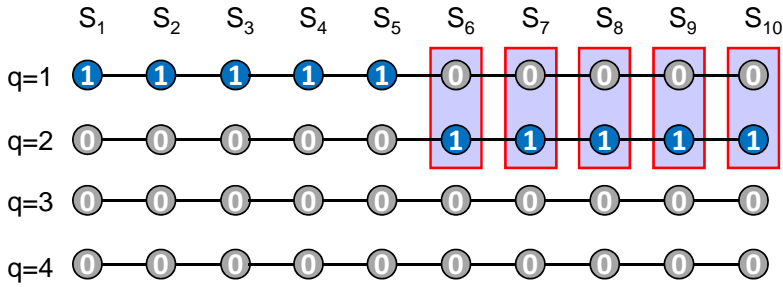


図 5.16: $S_i = 1$ の最適解に更新可能な部分問題

でドメインウォールが発生した状況を図 5.15 に示してあり, $\{S_i = 1 | i = 1, 2, \dots, 5\}$ と $\{S_i = 2 | i = 6, 7, \dots, 10\}$ の 2 つの領域に別れている. この暫定解に対して 2 値分割を用いてドメインウォールを解消するためには, 以下に示す 2 値の部分問題のいずれかを抜き出さなければならない.

- S_6 から S_{10} に関する 2 値の部分問題として, $q = 1$ に割当てられたブール変数を選択
- S_1 から S_5 に関する 2 値の部分問題として, $q = 2$ に割当てられたブール変数を選択
- 全ての整数変数で, $q = 3$ に割当てられたブール変数を 2 値の部分問題として選択
- 全ての整数変数で, $q = 4$ に割当てられたブール変数を 2 値の部分問題として選択

1 番目と 3 番目の部分問題で抜き出されるブール変数を図 5.16 と 5.17 に示す. 2 値分割では $x_{qi} = 0$ となっているブール変数をランダムに選択するため, 1 番目と 2 番目の部分問題が選択される確率は $(1/3)^5$ であり, 3 番目と 4 番目の部分問題が選択される確率は $(1/3)^{10}$ となる. この確率は整数変数の数に対して指数関数的に減少するため, ドメインウォールを 2 値分割を用いて解消するのは難しい.

3 番目の疑問に対する答えとして, 暫定解を改善可能な更新先が複数存在することが挙げられる. ここでは, 1 次元反強磁性 Potts モデルを例にとって説明する. 反強磁性 Potts モデルにおける整数変数間の局所エネルギーは $J\delta(S_i, S_j)$ ($S_i \neq S_j$ のときに局所エネルギーが小さくなる) であり, 図 5.18(a) に示した暫定解では S_{i-1} と S_i の間の局所エネルギーが最大化されている. この暫定解を改善するため, S_i を更新することを考える. この場合は, $S_i = 1$ または $S_i = 3$ に更新することで暫定解を改善できるため, 暫定解を改善

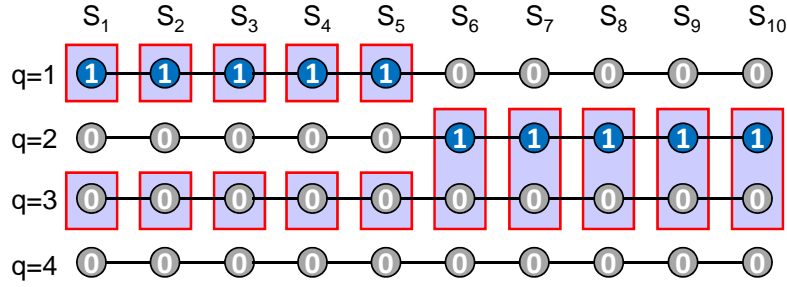


図 5.17: $S_i = 3$ の最適解に更新可能な部分問題

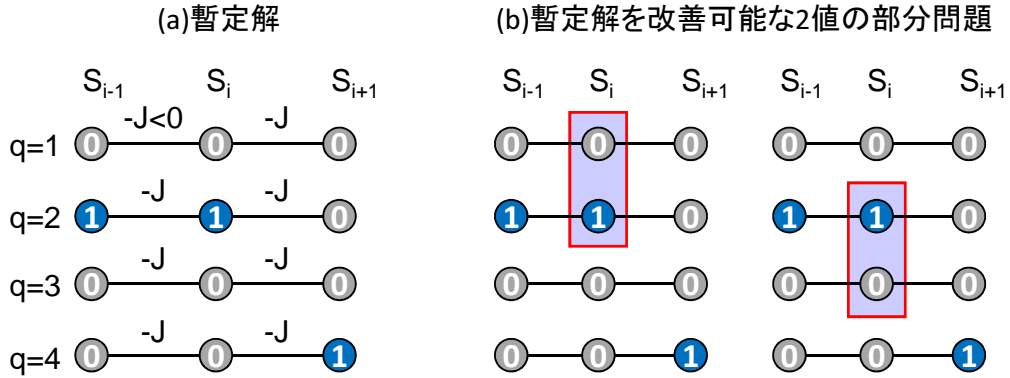


図 5.18: 1次元反強磁性 Potts モデルにおける暫定解の改善例

可能な 2 値の部分問題が複数存在することが分かる [図 5.18(b) 参照]. 結果として, 反強磁性 Potts モデルでは 2 値問題に落とし込んでも暫定解の改善を続けていける可能性が高い. このように, 2 値問題に限定しても特段の問題が発生しない状況であれば, 部分問題の解空間に許容解を多く含む 2 値分割を用いるのが最も効率的と考えられる. 同様のことは Potts グラスモデルや Potts ゲージグラスモデルに対しても言える. ここでは, Potts ゲージグラスモデルを例に図 5.19 を用いて説明する. このモデルにはフラストレーションが存在し, 全ての整数変数間の局所エネルギー $-J\delta(S_i, S_j + \Delta_{ij})$ を最小化することはできない. 基底状態では 1 つの整数変数間の局所エネルギーが最大化されており, 図 5.19(a) に示した例では S_1 と S_4 の間の相互作用が最大化されている. 図 5.19(b) には 2 つの整数変数間の局所エネルギーが最大化された第一励起状態が示されている. ここで, 図 5.19(b) の第一励起状態を改善するために, S_4 を更新することを考える. この場合は, $S_4 = 1$ または $S_4 = 2$ に更新することで基底状態に到達することができ, Potts ゲージグラスモデルでも第一励起状態を改善可能な 2 値の部分問題が複数存在することが分かる [図 5.19(c) 参照]. Potts ゲージグラスモデルのようなフラストレーションが存在するモデルでは, 局所エネルギーを最大化させたまま残しておく整数変数ペアの選び方が複数存在することに対応して, 第一励起状態を改善できる部分問題の数が増加する. 以上の理由から, 強磁性 Potts モデルを除くすべてのモデルに対して, 2 値分割を用いた場合の性能が最も高くなったと考えられる.

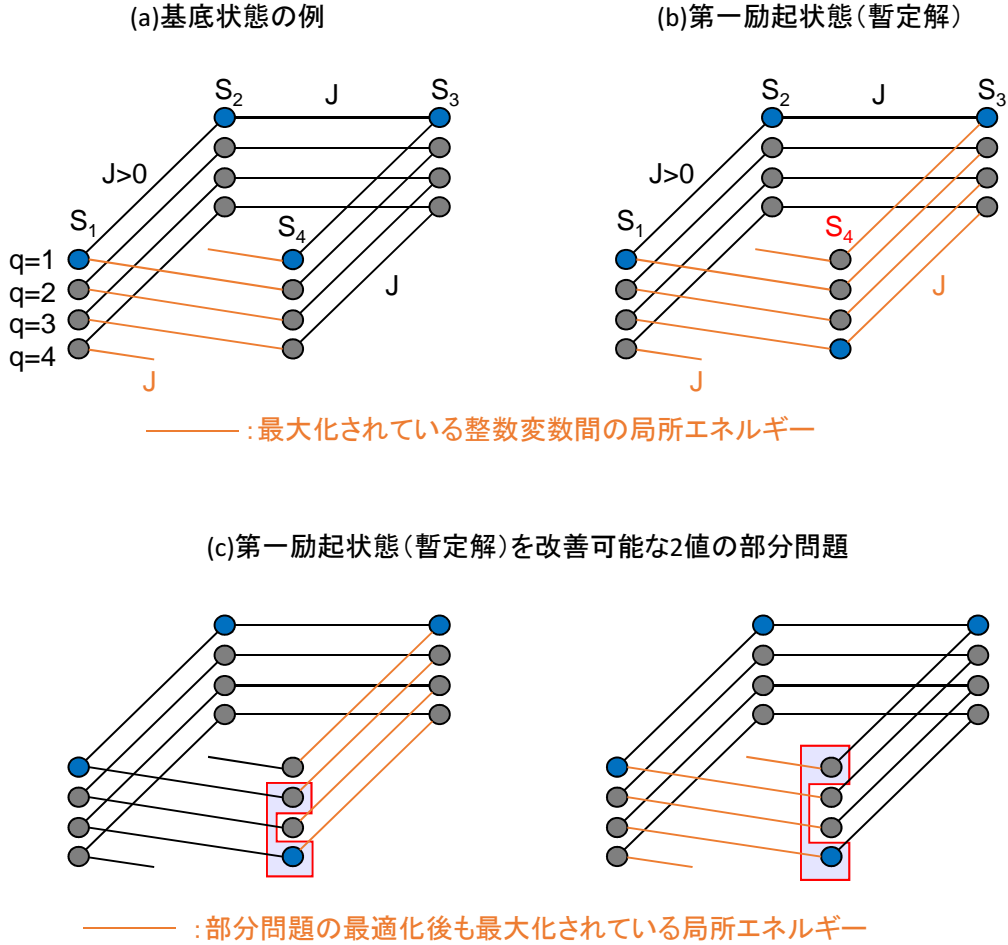


図 5.19: 1次元反強磁性 Potts モデルにおける暫定解の改善例

5.7 本章のまとめ

本章では one-hot 表示した整数最適化問題を効率的に分割する方法を検討した．特に，先行研究 [38] の以下の2つの課題:

- 完全グラフの埋め込みを用いているため部分問題のサイズが小さい
- 部分問題の解空間に one-hot 制約を満たさな組合せが含まれる

に対応する方法として，整数分割と2値分割を提案した．整数分割では，前章で提案した埋め込みアルゴリズムを用いて先行研究 [38] の分割方法を実現することで，完全グラフを用いた場合に比べて部分問題の解空間に含まれる許容解の数を増やすことができる．2値分割では部分問題の解空間が許容解のみで構成される分割方法を検討し，許容解の数が整数分割に対して増加することを確認した（表 5.3 参照）．また，基底状態探索が難しくなるフラストレーションが存在するモデル（Potts グラスモデル，Potts ゲージグラスモデル）に対して，ランダム分割よりも整数分割や2値分割を適用した方が高精度な解を少ない繰り返し回数で得られるという結果が得られた．2値分割では2値問題に落とし込むこ

とが原因で性能が悪化する場合もあるが、部分問題の解空間に許容解が最も多く含まれているため、状況に応じて上手く使い分ければ強力な方法になり得ると期待される。当然ながら、部分問題を埋め込む際に毎回同じ分割方法を使い続ける必要はなく、2値分割と整数分割を組み合わせることでより汎用的な方法になる可能性もある。また、現状ではランダムに選択している2値の部分問題の抜き出し方に工夫を加えられれば、それは有効な改善になり得る。ここで提案した分割方法には未だ改善の余地が残されていると考えられ、それを検討していくのは今後の課題である。

実応用で表れる多くの組合せ最適化問題は整数変数で定義されるため、大規模な問題を効率的に分割する方法は必須の技術である。また、one-hot 制約下の分割方法は D-Wave マシンの適用に限った話ではなく、デジタルアニーラー [100] 等の Ising マシンを用いて整数最適化問題を解く場合に共通して必要となる基盤技術である。今後、Ising モデルベースの最適化が発展していくためには、整数最適化問題の取り扱い方を充実させていくことが重要と考えられる。

第6章 量子揺らぎのスケジューリングによる高速化

ここからが本論文の後半部分であり、第6章から第8章ではQAの高速化に関する理論的な研究の結果がまとめられている。

6.1 本章の概要

本章では、短いアニーリング時間で基底状態を得ることを目指して、QAのハミルトニアン $\hat{H}_{QA}(t)$ の時間依存性を工夫することを考える。また、後半ではSAのダイナミクスを記述するマスター方程式と虚時間シュレーディンガー方程式の対応関係に着目し、SAにおける効率的なスケジューリングについて検討する。本論文では、 $\hat{H}_{QA}(t)$ の時間依存性をスケジューリングと呼ぶことにする。第6.2節ではスケジューリングを効率化するためにあたって重要な指針となる断熱定理を導出する。第6.3節では断熱定理に基づいてQAの効率的なスケジューリングを検討し、高い成功確率を得るために必要なアニーリング時間のスケジューリング依存性を調べる。ここで、本論文では基底状態が得られる確率を成功確率と呼び、励起状態が得られる確率を失敗確率と呼ぶ。第6.4節では、十分長いアニーリング時間をかけたときの失敗確率のスケジューリング依存性を調べる。第6.5節と6.6節では、グローバー問題と数分割問題に対して第6.3節で検討したスケジューリングを適用し、短いアニーリング時間で高い成功確率が得られるようになることを示す。第6.7節以降が本章の後半部分であり、第6.7節でマスター方程式と虚時間シュレーディンガー方程式の対応関係を示し、虚時間シュレーディンガー方程式に基づいたQA (QA-IT) の効率的なスケジューリングは、SAの温度揺らぎのスケジューリングの効率化に役立つことを説明する。第6.8節では虚時間シュレーディンガー方程式の断熱定理を導出し、第6.2節で導出した断熱定理と比較する。第6.9節では、QA-ITを用いてグローバー問題を解いたときの失敗確率を解析計算と数値計算によって評価し、第6.8節の断熱定理から予想されるものとは異なる結果が得られることを示す。第6.10節はQA-ITの効率的なスケジューリングに対する考察にあてられる。

6.2 断熱定理の導出

QAではハミルトニアン $\hat{H}_{QA}(t)$ を十分ゆっくり変化させ、各時刻の基底状態を辿ることで解きたい問題の最適解を得る。QAの過程で励起状態への遷移を防ぎ、基底状態を維持するための条件を表すのが断熱定理である [59]。本節では断熱定理を導出する。

量子系の時間発展はシュレーディンガー方程式:

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(t) |\psi(t)\rangle, \quad (6.1)$$

で記述される。ここで、 $|\psi(t)\rangle$ は系の状態ベクトルを表し、簡単のため $\hbar = 1$ とした。第 2.2 節で説明したように、アニーリング時間を τ とおくと、 $\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(t = 0) = \hat{\mathcal{H}}_{\text{q}}$, $\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(t = \tau) = \hat{\mathcal{H}}_0$ となるように制御される。 $\hat{\mathcal{H}}_0$ は解きたい問題の評価関数を表し、 $\hat{\mathcal{H}}_{\text{q}}$ は量子揺らぎを導入するためのハミルトニアンである。まず、以降の計算でアニーリング時間 τ の次数を分かり易くするため、時間 t をアニーリング時間 τ で規格化する。

$$u \equiv \frac{t}{\tau}. \quad (6.2)$$

また、QA のハミルトニアンと状態ベクトルも u の関数とみなし、関数形は変わるが同じ文字を用いて $\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(u), |\psi(u)\rangle$ と書くことにする。式 (6.1) のシュレーディンガー方程式を u を用いて書き換えると

$$\frac{i}{\tau} \frac{\partial}{\partial u} |\psi(u)\rangle = \hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(u) |\psi(u)\rangle, \quad (6.3)$$

となる。次に、各時刻 u での基底状態との重なりを調べるため、 $|\psi(u)\rangle$ を $\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(u)$ の固有ベクトル $|k(u)\rangle$ を用いて展開する。

$$|\psi(u)\rangle = \sum_k C_k(u) e^{-i\tau\phi_k(u)} |k(u)\rangle, \quad (6.4)$$

$$\phi_k(u) \equiv \int_0^u \varepsilon_k(u') du', \quad (6.5)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(u) |k(u)\rangle \equiv \varepsilon_k(u) |k(u)\rangle. \quad (6.6)$$

これを式 (6.3) に代入し、左から $\langle j(u)|$ を掛けると

$$\frac{dC_j(u)}{du} e^{-i\tau\phi_j(u)} + \sum_k C_k(u) e^{-i\tau\phi_k(u)} \left\langle j(u) \left| \frac{d}{du} \right| k(u) \right\rangle = 0, \quad (6.7)$$

となる。 $j \neq k$ の場合は、式 (6.6) の両辺を u で微分し、左から $|j(u)\rangle$ をかけると

$$\left\langle j(u) \left| \frac{d}{du} \right| k(u) \right\rangle = -\frac{1}{\varepsilon_j(u) - \varepsilon_k(u)} \left\langle j(u) \left| \frac{d\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(u)}{du} \right| k(u) \right\rangle, \quad (6.8)$$

と変形できる。一方で、 $j = k$ の場合は以下に示すように位相の設定を工夫することで

$$\left\langle k(u) \left| \frac{d}{du} \right| k(u) \right\rangle = 0, \quad (6.9)$$

と設定することができる。まず、 $|k'(u)\rangle \equiv e^{i\theta(u)} |k(u)\rangle$ と定義して両辺を u で微分し、左から $\langle k(u)|$ を掛けると

$$\left\langle k'(u) \left| \frac{d}{du} \right| k'(u) \right\rangle = i \frac{d\theta(u)}{du} + \left\langle k(u) \left| \frac{d}{du} \right| k(u) \right\rangle, \quad (6.10)$$

が得られる．また，シュレーディンガー方程式ではノルムが保存することから，

$$0 = \frac{d}{du} \langle k(u) | k(u) \rangle = \left\langle k(u) \left| \frac{d}{du} \right| k(u) \right\rangle + \left\langle k(u) \left| \frac{d}{du} \right| k(u) \right\rangle^* \quad (6.11)$$

が成り立つため，右辺の第一項が純虚数であることが分かる．このことから， $j = k$ の場合は位相を適切に選ぶことで，常に式 (6.9) を満たすことができる．式 (6.8) と (6.9) を式 (6.7) に代入すると

$$\frac{dC_j(u)}{du} = \sum_{k \neq j} C_k(u) \frac{1}{\Delta_{jk}(u)} \left\langle j(u) \left| \frac{d\hat{\mathcal{H}}_{QA}(u)}{du} \right| k(u) \right\rangle e^{i\tau\Delta\phi_{jk}(u)}, \quad (6.12)$$

$$\Delta\varepsilon_{jk}(u) \equiv \varepsilon_j(u) - \varepsilon_k(u), \quad (6.13)$$

$$\Delta\phi_{jk}(u) \equiv \int_0^u \Delta\varepsilon_{jk}(u') du', \quad (6.14)$$

が得られる． $\Delta\varepsilon_{jk}(u)$ は第 j 励起状態と第 k 励起状態のエネルギーギャップと呼ばれる．式 (6.12) の両辺を積分すると，各時刻の展開係数は

$$C_j(u) = C_j(0) + \sum_{k \neq j} \int_0^u du' C_k(u') \frac{1}{\Delta\varepsilon_{jk}(u')} \left\langle j(u') \left| \frac{d\hat{\mathcal{H}}_{QA}(u')}{du'} \right| k(u') \right\rangle e^{i\tau\Delta\phi_{jk}(u')}, \quad (6.15)$$

となる．次に，アニーリング時間 τ は十分長く，QA の過程で励起状態の展開係数が小さく保たれると仮定して，式 (6.15) の右辺の被積分関数に含まれる展開係数を

$$C_j(u) \simeq \begin{cases} 1 & j = 0, \\ 0 & j \neq 0, \end{cases} \quad (6.16)$$

と近似する． $C_0(u)$ は基底状態の展開係数を， $C_{j \neq 0}(u)$ は励起状態の展開係数を表している．式 (6.16) を式 (6.15) に代入すると，長時間極限での励起状態の展開係数として

$$C_{j \neq 0}(u) \simeq \int_0^u du' \frac{1}{\Delta\varepsilon_{j0}(u')} \left\langle j(u') \left| \frac{d\hat{\mathcal{H}}_{QA}(u')}{du'} \right| 0(u') \right\rangle e^{i\tau\Delta\phi_{j0}(u')}, \quad (6.17)$$

が得られる．ここで，この式では基底状態から励起状態への遷移しか考慮されておらず，励起状態から励起状態への遷移等は無視されていることに注意が必要である．さらに，

$$\frac{d}{du} e^{i\tau\Delta\phi_{j0}(u)} = i\tau\Delta\varepsilon_{j0}(u) e^{i\tau\Delta\phi_{j0}(u)}, \quad (6.18)$$

を用いて式 (6.17) を部分積分すると

$$C_j(u) = \frac{i}{\tau} \left[A_{j0}(0) - A_{j0}(u) e^{i\tau\Delta\phi_{j0}(u)} \right] + O(\tau^{-2}), \quad (6.19)$$

$$A_{j0}(u) \equiv \frac{1}{\Delta\varepsilon_{j0}(u)^2} \left\langle j(u) \left| \frac{d\hat{\mathcal{H}}_{QA}(u)}{du} \right| 0(u) \right\rangle, \quad (6.20)$$

となる．この結果から，長時間極限において j 番目の励起状態が得られる確率 $|C_j(u)|^2$ は

$$|C_j(u)|^2 \propto O(\tau^{-2}), \quad (6.21)$$

となることが分かる．また，任意の時刻で全ての励起状態に対して

$$\frac{1}{\tau}|A_{j0}(u)| \ll 1, \quad (6.22)$$

を満たす場合に，QA の過程で励起状態への遷移を発生させずに基底状態を辿ることができるとも示された．ここで，QA の特徴的な時間 $\tau_c(\delta)$ として

$$\max_{u,j} \left[\frac{1}{\tau_c(\delta)} |A_{j0}(u)| \right] = \delta, \quad (6.23)$$

を導入する． $\tau_c(\delta = 1)$ は断熱的な時間発展が実現され始めるアニーリング時間の目安になっていると考えられる．QA の性能を図る指標として基底状態と励起状態のエネルギーギャップ $\Delta\varepsilon_{j0}(u)$ が用いられることが多いが，これは $A_{j0}(u)$ の分母がエネルギーギャップの 2 乗を含んでいることに由来する．例えば，エネルギーギャップがスピン変数の数に依存して多項式的に減少する場合は $\tau_c(\delta)$ は多項式的な増加に抑えられるが，エネルギーギャップが N に依存して指数関数的に閉じる場合は $\tau_c(\delta)$ は指数関数的に増加する．このことから，エネルギーギャップが指数関数的に閉じる場合は QA を用いて基底状態を得るのは難しいということになる．

6.3 アニーリング時間のスケジューリング依存性

本節では，QA のハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(u)$ の時間依存性を工夫することで， $\tau_c(\delta)$ を小さくすることを考える．スケジューリングの工夫による QA の高速化は先行研究 [101–103] で既に検討されており，特に先行研究 [102] では

$$\frac{d|A_{10}(u)|}{du} = 0, \quad (6.24)$$

に基づいてスケジューリングを決定することで性能が向上することを確認している．しかしながら，式 (6.24) では第一励起状態しか考慮されておらず，式 (6.23) の定義によると

$$\frac{d}{du} \left(\max_j |A_{j0}(u)| \right) = 0, \quad (6.25)$$

に基づいてスケジューリングした方がよいように思える．また，スケジューリングの工夫によってどの程度の高速化が期待されるかを一般的な数式として示した例はない．そこで，本節では様々なスケジューリングに対して $\tau_c(\delta)$ を計算する一般式を導出し，第 6.5 節と 6.6 節でグローバール問題と数分割問題に対して本節の結果を適用する．

QA のハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(u)$ を

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(u) = s(u)\hat{\mathcal{H}}_0 + [1 - s(u)]\hat{\mathcal{H}}_q, \quad (6.26)$$

とし, $s(u)$ を用いて $\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(u)$ の時間依存性を制御することを考える. ここで, $s(0) = 0, s(1) = 1$ であり, $\hat{\mathcal{H}}_0$ は解きたい問題の評価関数を, $\hat{\mathcal{H}}_q$ は量子揺らぎを導入するハミルトニアンを表す. また, $s(u)$ のスケジューリングを決定する一般的な微分方程式として

$$\frac{ds}{du}f(s) = 1, \quad (6.27)$$

$$f(s) > 0, \quad (6.28)$$

を導入する. $s(u)$ のスケジューリングは s の関数である $f(s)$ によって決定されるとしており, $f(s)$ は $s(0) = 0, s(1) = 1$ の制約条件を満たすように定める必要がある. 式 (6.26) の両辺に du/ds を掛けて s に関する積分を実行すると, $f(s)$ に対する条件として

$$\int_0^1 f(s)ds = 1, \quad (6.29)$$

が得られる. ここで, $s(u)$ のスケジューリングを s の関数 $f(s)$ によって決定することにした理由は, QA のハミルトニアン [式 (6.26)] の形を直接的に決定するのは s だからである (各時刻 u における QA のハミルトニアンは, $s(u)$ のスケジューリングに依存して変わってしまう). 以降では QA のハミルトニアンを s の関数とみなし, 関数形は変わるが同じ文字を用いて

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(s) = s\hat{\mathcal{H}}_0 + (1-s)\hat{\mathcal{H}}_q. \quad (6.30)$$

と書くことにする. 式 (6.30) を式 (6.20) に代入し, $A_{j0}(u), \Delta\epsilon_{j0}(u), |j(u)\rangle$ を全て s の関数とみなし, $\tilde{\cdot}$ によって関数形の変化を表すと

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{j0}(s) &= \frac{1}{\Delta\tilde{\epsilon}_{j0}(s)^2} \left\langle \tilde{j}(s) \left| \frac{d\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(s)}{ds} \frac{ds}{du} \right| \tilde{0}(s) \right\rangle, \\ &\equiv \frac{1}{f(s)} AT_{j0}(s), \end{aligned} \quad (6.31)$$

となる. ここで, 2 番目の等号では式 (6.27) を利用し,

$$AT_{j0}(s) \equiv \frac{1}{\Delta\tilde{\epsilon}_{j0}(s)^2} \left\langle \tilde{j}(s) \left| \hat{\mathcal{H}}_0 - \hat{\mathcal{H}}_q \right| \tilde{0}(s) \right\rangle, \quad (6.32)$$

と定義した. さらに,

$$|AT_{\max}(s)| \equiv \max_j |AT_{j0}(s)|, \quad (6.33)$$

と定義すると,

$$\max_j |\tilde{A}_{j0}(s)| = \frac{1}{f(s)} |AT_{\max}(s)|, \quad (6.34)$$

が得られる. $f(s)$ はスケジューリングを決定する関数であり, $|AT_{\max}(s)|$ は各 s におけるハミルトニアンを特徴づける量となっている. 様々な物理量を u の関数から s の関数と解釈し直すことで, 式 (6.34) ではスケジューリングとハミルトニアンの特徴を分離して書くことに成功した. 式 (6.34) を式 (6.23) に代入すると, $\tau_c(\delta)$ を計算する一般式として

$$\tau_c(\delta) = \frac{1}{\delta} \max_s \left[\frac{1}{f(s)} |AT_{\max}(s)| \right], \quad (6.35)$$

が得られる.

次に, 3 種類のスケジューリングに対して $\tau_c(\delta)$ を計算する式を導出する.

- 線形スケジューリング

スケジューリングを決定する関数 $f(s)$ を

$$f(s) = 1, \quad (6.36)$$

と設定する. これを式 (6.35) に代入すると

$$\tau_c(\delta) = \frac{1}{\delta} \max_s |AT_{\max}(s)|, \quad (6.37)$$

を得る.

- 断熱定理に基づくスケジューリング

式 (6.25) を満足するためには,

$$f(s) \propto |AT_{\max}(s)|, \quad (6.38)$$

と設定すれば良い. 比例定数は式 (6.29) から導くことができ,

$$f(s) = \frac{|AT_{\max}(s)|}{\int_0^1 |AT_{\max}(s')| ds'}, \quad (6.39)$$

が得られる. 式 (6.39) を式 (6.34) に代入すると, 断熱定理に基づくスケジューリングでは

$$\max_j |\tilde{A}_{j0}(s)| = \int_0^1 |AT_{\max}(s')| ds', \quad (6.40)$$

となる. $\max_j |\tilde{A}_{j0}(s)|$ は s に依存しない定数であり, 式 (6.25) が満たされることが分かる. また, 式 (6.39) を式 (6.35) に代入すると,

$$\tau_c(\delta) = \frac{1}{\delta} \int_0^1 |AT_{\max}(s)| ds, \quad (6.41)$$

が得られる.

- 第一励起状態に基づくスケジューリング

スケジューリングを決定する関数 $f(s)$ を

$$f(s) \propto |AT_{10}(s)|, \quad (6.42)$$

と設定する. 比例定数は式 (6.29) から導くことができ,

$$f(s) = \frac{|AT_{10}(s)|}{\int_0^1 |AT_{10}(s')| ds'}, \quad (6.43)$$

となる．このスケジューリングは先行研究 [102] で用いられたものであり，式 (6.24) が満たされる．式 (6.43) を式 (6.35) に代入すると

$$\tau_c(\delta) = \frac{1}{\delta} \max_s \left[\frac{|AT_{\max}(s)|}{|AT_{10}(s)|} \right] \int_0^1 |AT_{10}(s)| ds, \quad (6.44)$$

が得られる．

線形スケジューリングにおける $\tau_c(\delta)$ は $|AT_{\max}(s)|$ の最大値で決まるのに対して，断熱定理に基づくスケジューリングでは $|AT_{\max}(s)|$ の平均値で決まる [式 (6.37) と (6.41) 参照]．この結果は，断熱定理に基づくスケジューリングを用いることで，線形スケジューリングを用いた場合に比べて $\tau_c(\delta)$ を小さくできることを示している．しかしながら， $\Delta\tilde{\varepsilon}_{10}(s)$ がシステムサイズに対して指数関数的に減少する場合には，断熱定理に基づくスケジューリングを用いたとしても $\tau_c(\delta)$ を多項式的な増加に抑えるのは一般的に困難だと予想される．断熱定理に基づくスケジューリングの $\tau_c(\delta)$ が $|AT_{\max}(s)|$ の平均値で与えられることを考慮すると， $\Delta\tilde{\varepsilon}_{10}(s)$ が指数関数的に閉じ場合でも，その幅が指数関数的に狭まる場合に限って $\tau_c(\delta)$ は多項式的な増加に抑えられる． $\Delta\tilde{\varepsilon}_{10}(s)$ が指数関数的に閉じる場合は，QA の任意の時刻で基底状態を辿ることは一般的に難しく，このような状況で高い成功確率を達成するための方法として励起状態を経由する方法も検討されている [104]．また， $\hat{\mathcal{H}}_q$ の自由度を活かしてエネルギーギャップを広げる方法も検討されており，これについては次章で検討する．

6.4 長時間極限における失敗確率のスケジューリング依存性

ここでは，長時間極限における失敗確率のスケジューリング依存性を議論する．長時間極限において j 番目の励起状態を得る確率 $|C_j^\infty(\tau)|^2$ は，式 (6.19) より

$$\begin{aligned} |C_j^\infty(\tau)|^2 &= \frac{1}{\tau^2} \left| \tilde{A}_{j0}(s=0) - \tilde{A}_{j0}(s=1) e^{i\tau\Delta\tilde{\phi}_{j0}(s=1)} \right|^2, \\ &\leq \frac{1}{\tau^2} \left(|\tilde{A}_{j0}(0)| + |\tilde{A}_{j0}(1)| \right)^2, \end{aligned} \quad (6.45)$$

で与えられる． j 番目の励起状態を得る確率の上限を $P_j^\infty(\tau)$ とおき，式 (6.31) を代入すると

$$P_j^\infty(\tau) = \frac{1}{\tau^2} \left(\frac{1}{f(0)} |AT_{j0}(0)| + \frac{1}{f(1)} |AT_{j0}(1)| \right)^2, \quad (6.46)$$

と変形できる． $P_j^\infty(\tau)$ を全ての励起状態について足し合わせると，長時間極限における失敗確率の上限 $P_{\text{all}}^\infty(\tau)$ として

$$P_{\text{all}}^\infty(\tau) = \frac{1}{\tau^2} \sum_{j \geq 1} \left(\frac{1}{f(0)} |AT_{j0}(0)| + \frac{1}{f(1)} |AT_{j0}(1)| \right)^2, \quad (6.47)$$

が得られる．以降では， $P_{\text{all}}^\infty(\tau) = 1$ となるアニーリング時間を τ_∞ と書くことにする．

線形スケジューリングでは $f(s) = 1$ と設定するので，

$$P_{\text{all}}^\infty(\tau) = \frac{1}{\tau^2} \sum_{j \geq 1} (|AT_{j0}(0)| + |AT_{j0}(1)|)^2, \quad (6.48)$$

が得られ,

$$\tau_\infty = \sqrt{\sum_{j \geq 1} (|AT_{j0}(0)| + |AT_{j0}(1)|)^2}, \quad (6.49)$$

となる．一般的に証明することはできないが，第 6.5 節と 6.6 節の例では

$$|AT_{j0}(0)| \ll \max_s |AT_{\max}(s)| = \tau_c(1), \quad (6.50)$$

$$|AT_{j0}(1)| \ll \max_s |AT_{\max}(s)| = \tau_c(1), \quad (6.51)$$

が成り立っており，これを仮定すると

$$\tau_\infty \ll \tau_c(1), \quad (6.52)$$

となる．ここで，式 (6.50) と (6.51) の等号では式 (6.37) を用いた．失敗確率が下がり始めるアニーリング時間の目安として

$$\tau_{\text{th}} \equiv \max(\tau_c(1), \tau_\infty), \quad (6.53)$$

を導入すると，

$$\tau_{\text{th}} = \tau_c(1), \quad (6.54)$$

となる．線形スケジューリングにおける失敗確率の τ 依存性は，基本的に図 6.1 に示すような概形になる． $\tau \gtrsim \tau_{\text{th}}$ から長時間極限の失敗確率に収束するまでの間は Landau-Zener 遷移が発生していると考えられる [105]．Landau-Zener の公式では 2 準位系における励起状態への遷移確率が計算されており，励起状態への遷移確率がアニーリング時間 τ に対して指数関数的に減少するという結果が得られている．

断熱定理に基づくスケジューリングでは，式 (6.39) を式 (6.47) に代入して式 (6.41) を用いると

$$P_{\text{all}}^\infty(\tau) = \left(\frac{\tau_c(1)}{\tau} \right)^2 \sum_{j \geq 1} \left(\frac{|A_{j0}(0)|}{|A_{\max}(0)|} + \frac{|A_{j0}(1)|}{|A_{\max}(1)|} \right)^2, \quad (6.55)$$

$$\geq \left(\frac{2\tau_c(1)}{\tau} \right)^2, \quad (6.56)$$

が得られ，

$$\tau_\infty = \tau_c(1) \sqrt{\sum_{j \geq 1} \left(\frac{|A_{j0}(0)|}{|A_{\max}(0)|} + \frac{|A_{j0}(1)|}{|A_{\max}(1)|} \right)^2}, \quad (6.57)$$

$$\geq 2\tau_c(1), \quad (6.58)$$

となる．断熱定理に基づくスケジューリングでは

$$\tau_{\text{th}} = \tau_\infty, \quad (6.59)$$

であり，失敗確率の τ 依存性は図 6.2 に示すような概形になる．

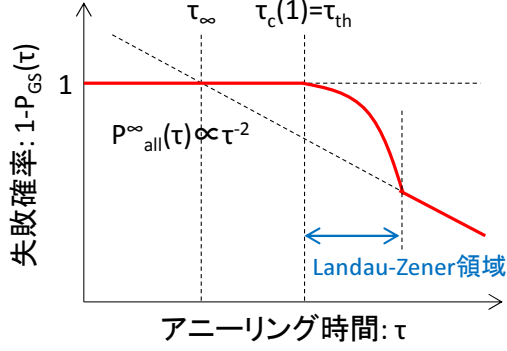


図 6.1: 線形スケジューリングにおける失敗確率

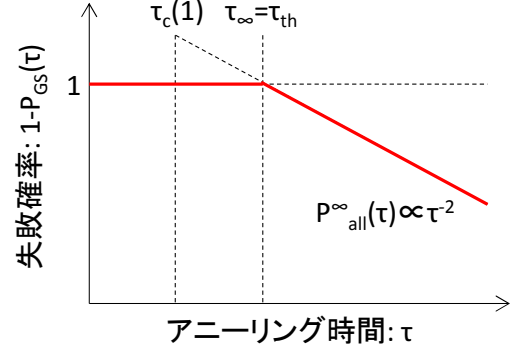


図 6.2: 断熱定理に基づくスケジューリングにおける失敗確率

最後に、第一励起状態に基づくスケジューリングでは、式 (6.43) を式 (6.47) に代入して式 (6.44) を用いると

$$P_{\text{all}}^{\infty}(\tau) = \left(\frac{\tau_c(1)}{\tau} \right)^2 \left(\max_s \left[\frac{|AT_{\text{max}}(s)|}{|AT_{10}(s)|} \right] \right)^{-2} \sum_{j \geq 1} \left(\frac{|A_{j0}(0)|}{|A_{10}(0)|} + \frac{|A_{j0}(1)|}{|A_{10}(1)|} \right)^2, \quad (6.60)$$

が得られ、

$$\tau_{\infty} = \tau_c(1) \left(\max_s \left[\frac{|AT_{\text{max}}(s)|}{|AT_{10}(s)|} \right] \right)^{-1} \sqrt{\sum_{j \geq 1} \left(\frac{|A_{j0}(0)|}{|A_{10}(0)|} + \frac{|A_{j0}(1)|}{|A_{10}(1)|} \right)^2}, \quad (6.61)$$

となる。 $\tau_c(1)$ と τ_{∞} の大小関係は解きたい問題に依存して変わると考えられ、失敗確率の概形が図 6.1 と 6.2 のどちらになるかを定めることはできない。

6.5 グローバー問題のスケジューリング

本節では、グローバー問題における $\tau_c(\delta)$ のスケジューリング依存性を計算し、結果の妥当性を数値計算により確認する。グローバー問題とは、与えられた N 個の項目の中から特定の 1 個を探す問題である [106]。各項目を $|i\rangle, i = 0, 1, \dots, N-1$ で表し、探したい項目を $|0\rangle$ とすると、グローバー問題のハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \hat{I}_N - |0\rangle\langle 0|, \quad (6.62)$$

と設定すればよい。ここで、 \hat{I}_N は恒等演算子を表す。量子揺らぎを導入するハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_q$ としては

$$\hat{\mathcal{H}}_q = \hat{I}_N - |\Psi_0\rangle\langle \Psi_0|, \quad (6.63)$$

$$|\Psi_0\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle, \quad (6.64)$$

を採用する [101]。QA のハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(s)$ は s の関数として

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(s) = s\hat{\mathcal{H}}_0 + (1-s)\hat{\mathcal{H}}_q, \quad (6.65)$$

と与えられ、 s は規格化された時間 $u \equiv t/\tau$ の関数とみなす。

6.5.1 ハミルトニアンに対角化

グローバー問題のハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(s)$ は容易に対角化でき、この結果を用いて各スケジューリングにおける $\tau_c(\delta)$ を計算できる。ここでは、 $\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(s)$ の対角化について説明する。

まず、ハミルトニアンの対称性を考慮して、ハミルトニアンを行列表示する際の基底を $|i\rangle$ から変更する。式 (6.62), (6.63), (6.64) から分かるように、グローバー問題では最適解以外の状態 $|i > 0\rangle$ に区別はない。このため、以下に示す2つの状態:

$$|0\rangle, \quad (6.66)$$

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{i=1}^{N-1} |i\rangle, \quad (6.67)$$

の重ね合わせとして表された状態が、ハミルトニアンの対称性を反映した低いエネルギー状態になると考えられる。そこで、 $|0\rangle$ と $|\Psi\rangle$ を基底として採用し、残りの $N-2$ 個の基底を

$$|\varphi_\alpha\rangle = \sum_{i=1}^{N-1} C_{\alpha,i} |i\rangle, \quad (6.68)$$

とおく。ここで、 $\alpha = 1, 2, \dots, N-2$ であり、 $C_{\alpha,i}$ は各基底における $|i > 0\rangle$ の重ね合わせ係数を表す。また、 $|\varphi_\alpha\rangle$ は規格化条件:

$$\langle \varphi_\alpha | \varphi_\alpha \rangle = \sum_{i=1}^{N-1} |C_{\alpha,i}|^2 = 1, \quad (6.69)$$

と直交条件:

$$\langle \varphi_\alpha | \varphi_{\beta \neq \alpha} \rangle = \sum_{i=1}^{N-1} C_{\beta,i}^* C_{\alpha,i} = 0, \quad (6.70)$$

$$\langle \Psi | \varphi_\alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{i=1}^{N-1} C_{\alpha,i} = 0, \quad (6.71)$$

を満たしているとする（その他の直交条件: $\langle 0 | \Psi \rangle = \langle 0 | \varphi_\alpha \rangle = 0$ は既に満たされている）。基底として $|0\rangle, |\Psi\rangle, |\varphi_\alpha\rangle$ を採用して $\hat{\mathcal{H}}_0$ を行列表示すると

$$\langle 0 | \hat{\mathcal{H}}_0 | 0 \rangle = 0, \quad (6.72)$$

$$\langle \Psi | \hat{\mathcal{H}}_0 | \Psi \rangle = 1, \quad (6.73)$$

$$\langle \varphi_\alpha | \hat{\mathcal{H}}_0 | \varphi_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}, \quad (6.74)$$

$$\langle 0 | \hat{\mathcal{H}}_0 | \Psi \rangle = 0, \quad (6.75)$$

$$\langle 0 | \hat{\mathcal{H}}_0 | \varphi_\alpha \rangle = 0, \quad (6.76)$$

$$\langle \Psi | \hat{\mathcal{H}}_0 | \varphi_\alpha \rangle = 0, \quad (6.77)$$

となり、 $\hat{\mathcal{H}}_q$ を行列表示すると

$$\langle 0 | \hat{\mathcal{H}}_q | 0 \rangle = 1 - \frac{1}{N}, \quad (6.78)$$

$$\langle \Psi | \hat{\mathcal{H}}_q | \Psi \rangle = \frac{1}{N}, \quad (6.79)$$

$$\langle \varphi_\alpha | \hat{\mathcal{H}}_q | \varphi_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}, \quad (6.80)$$

$$\langle 0 | \hat{\mathcal{H}}_q | \Psi \rangle = -\frac{\sqrt{N-1}}{N}, \quad (6.81)$$

$$\langle 0 | \hat{\mathcal{H}}_q | \varphi_\alpha \rangle = 0, \quad (6.82)$$

$$\langle \Psi | \hat{\mathcal{H}}_q | \varphi_\alpha \rangle = 0, \quad (6.83)$$

となる。これを用いると、 $\hat{\mathcal{H}}_{QA}(s)$ の行列表示はブロック対角化された形で

$$\hat{H}(s(t)) = \left[\begin{array}{cc|c} (1-s) \left(1 - \frac{1}{N} \right) & -(1-s) \frac{\sqrt{N-1}}{N} & \\ -(1-s) \frac{\sqrt{N-1}}{N} & s + (1-s) \frac{1}{N} & \\ \hline & & \hat{I}_{N-2} \end{array} \right]. \quad (6.84)$$

と求まる。QA の初期状態は全状態の等確率な重ね合わせとして

$$\frac{1}{\sqrt{N}} |0\rangle + \sqrt{\frac{N-1}{N}} |\Psi\rangle, \quad (6.85)$$

と設定されるので、QA の状態発展は $|0\rangle$ と $|\Psi\rangle$ に張られた部分空間内に限定される。以上より、グローバー問題の QA は 2 準位系となり、固有エネルギーは

$$\varepsilon_0(s) = \frac{1}{2} [1 - \Delta_{10}(s)], \quad (6.86)$$

$$\varepsilon_1(s) = \frac{1}{2} [1 + \Delta_{10}(s)], \quad (6.87)$$

$$\Delta\varepsilon_{10}(s) \equiv \sqrt{1 - 4 \left(1 - \frac{1}{N} \right) s(1-s)}, \quad (6.88)$$

と求まる。ここで、 $\varepsilon_0(s)$ と $\varepsilon_1(s)$ はそれぞれ基底状態と第一励起状態の固有エネルギーを表し、 $\Delta\varepsilon_{10}(s)$ はエネルギーギャップを表す。エネルギーギャップ $\Delta\varepsilon_{10}(s)$ は $s = 1/2$ で最小値:

$$\Delta\varepsilon_{10}^{(\min)} = \frac{1}{\sqrt{N}}, \quad (6.89)$$

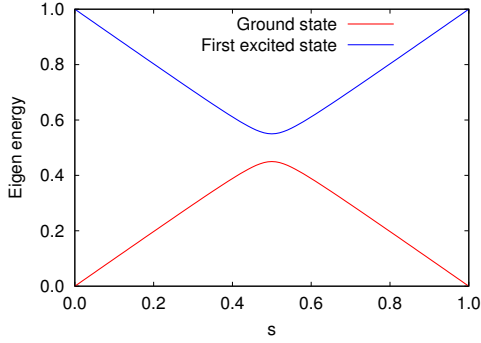


図 6.3: 固有エネルギーの s 依存性

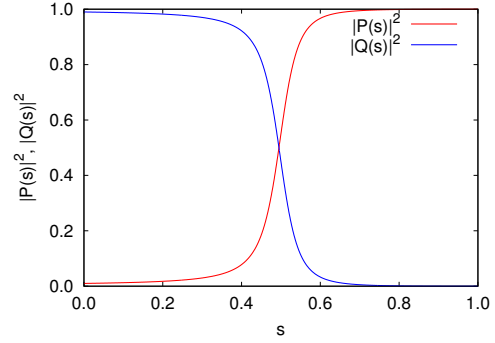


図 6.4: 展開係数の s 依存性

をとる．また，固有状態は

$$|0(s)\rangle = P(s)|0\rangle + Q(s)|\Psi\rangle, \quad (6.90)$$

$$|1(s)\rangle = -Q(s)|0\rangle + P(s)|\Psi\rangle, \quad (6.91)$$

$$P(s) \equiv \sqrt{\frac{1}{2} + \left[\frac{1}{2} - \left(1 - \frac{1}{N}\right)(1-s)\right] \frac{1}{\Delta\epsilon_{10}(s)}}, \quad (6.92)$$

$$Q(s) \equiv \sqrt{\frac{1}{2} - \left[\frac{1}{2} - \left(1 - \frac{1}{N}\right)(1-s)\right] \frac{1}{\Delta\epsilon_{10}(s)}}, \quad (6.93)$$

と求まる．ここで， $|0(s)\rangle$ と $|1(s)\rangle$ はそれぞれ基底状態と第一励起状態の固有状態を表し， $P(s)$ と $Q(s)$ は展開係数を表す． $N = 10^2$ における固有エネルギーと展開係数の s 依存性を図 6.3 と図 6.4 に示す． N が増加すると $s = 1/2$ 付近のエネルギーギャップが小さくなり， $|P(s)|$ と $|Q(s)|$ の変化も激しくなる．

QA に関連する 2 つの基底 $|0\rangle, |\Psi\rangle$ 以外の基底 $|\varphi_\alpha\rangle$ は，式 (6.69)，(6.70)，(6.71) の条件を満たすように係数を決めればよく，例えば

$$|\varphi_\alpha\rangle = \sqrt{\frac{1}{\alpha(\alpha+1)}} \left(\sum_{i=1}^{\alpha} |i\rangle - \alpha |\alpha+1\rangle \right), \quad (6.94)$$

とすれば良い．

6.5.2 アニール時間スケジューリング依存性

次に， $\tau_c(\delta)$ のスケジューリング依存性を計算する．グローバー問題の QA は 2 準位系に帰着するため，断熱定理に基づくスケジューリング [式 (6.39)] と第一励起状態に基づくスケジューリング [式 (6.43)] は一致する．このため，ここでは線形スケジューリングと断熱定理に基づくスケジューリングの 2 種類に対して τ_{th} を求めることにする．前節で導入したハミルトニアンを特徴づける量: $|AT_{\max}(s)| (= |AT_{10}(s)|)$ は，式 (6.88) から (6.93) を用いると

$$|AT_{\max}(s)| = \frac{\sqrt{N-1}}{N} \frac{1}{\Delta\epsilon_{10}(s)^3}, \quad (6.95)$$

と求まる． $N = 100$ における $|A_{\max}(s)|$ を図 6.5 に示す．

線形スケジューリングでは，式 (6.37) と (6.89)，(6.95) から

$$\tau_c(\delta) = \frac{\sqrt{N(N-1)}}{\delta} \sim O(N), \quad (6.96)$$

となる．また，式 (6.88) と (6.95) を式 (6.49) に代入すると

$$\tau_\infty = 2 \frac{\sqrt{N-1}}{N} \sim O(N^{-1/2}), \quad (6.97)$$

と求まり，

$$\begin{aligned} \tau_{\text{th}} &= \max(\tau_c(1), \tau_\infty), \\ &= \tau_c(1) \propto O(N), \end{aligned} \quad (6.98)$$

が得られる．長時間極限における失敗確率の上限 $P_{\text{all}}^\infty(\tau)$ は

$$\begin{aligned} P_{\text{all}}^\infty(\tau) &= \left(\frac{\tau_\infty}{\tau} \right)^2, \\ &= \frac{4}{\tau^2} \frac{N-1}{N^2} \sim O\left(\frac{1}{\tau^2 N} \right), \end{aligned} \quad (6.99)$$

と計算できる．この結果は， N が大きい方が $\tau \gg \tau_c(1)$ における失敗確率が低くなることを表している．

断熱定理に基づくスケジューリングでは，式 (6.88) と (6.95) を式 (6.41) に代入すると

$$\tau_c(\delta) = \frac{\sqrt{N-1}}{\delta} \sim O(\sqrt{N}), \quad (6.100)$$

が得られる．また，式 (6.57) において $|AT_{\max}(s)| = |AT_{10}(s)|$ であることを用いると

$$\tau_\infty = 2\tau_c(1), \quad (6.101)$$

と求まり，

$$\tau_{\text{th}} = 2\tau_c(1) \sim O(\sqrt{N}), \quad (6.102)$$

が得られる．長時間極限における失敗確率の上限 $P_{\text{all}}^\infty(\tau)$ は

$$P_{\text{all}}^\infty(\tau) = 4 \frac{N-1}{\tau^2} \sim O\left(\frac{N}{\tau^2} \right), \quad (6.103)$$

と計算できる．線形スケジューリングの場合と異なり，断熱定理に基づくスケジューリングでは N の増加と共に $P_{\text{all}}^\infty(\tau)$ も増加する．また，式 (6.27) と (6.39)，(6.88)，(6.95) より s の u 依存性は

$$s(u) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1-2u}{\sqrt{1 - \left(1 - \frac{1}{N}\right)(1-2u)^2}} \right], \quad (6.104)$$

と求まる．断熱定理に基づくスケジューリング ($N = 100$) における $s(u)$ を図 6.6 に示す． $|AT_{\max}(s)|$ が最小となる辺り $s \simeq 1/2$ で ds/du が小さくなっている．

式 (6.98) と (6.102) の結果から，線形スケジューリングにおける計算時間は $O(N)$ で増加し，断熱定理に基づくスケジューリングでは $O(\sqrt{N})$ で増加することが予想される．

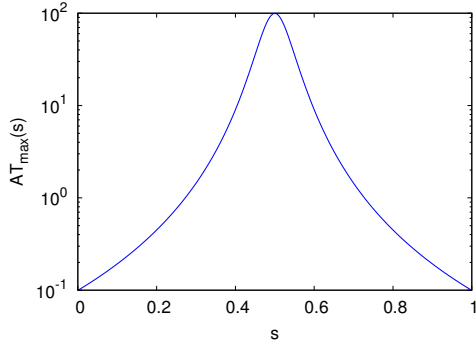


図 6.5: グローバー問題の $|A_{\max}(s)|$

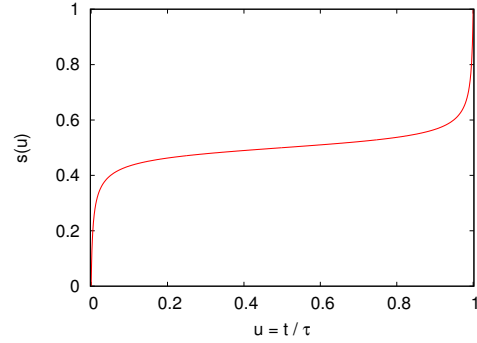


図 6.6: 断熱定理に基づくスケジュール

6.5.3 数値計算による確認

最後に、式 (6.98) と (6.102) で求めた τ_{th} の妥当性を数値計算によって確認する．ここでは、4 次のルンゲ-クッタ法を用いてシュレーディンガー方程式を解いて $N = 10^2, 10^4, 10^6$ における失敗確率の τ 依存性を求め、式 (6.98) と (6.102) の結果と比較する．

線形スケジューリングにおける失敗確率の τ 依存性を図 6.7 に示す．グラフには失敗確率に加えて、長時間極限における失敗確率 $P_{\text{all}}^{\infty}(\tau)$ [式 (6.99)] が実線で示してあり、 τ_{th} が点線で示してある．全ての N に対して失敗確率は $\tau \simeq \tau_{\text{th}}$ から低下し始めており、式 (6.98) で求めた τ_{th} の依存性は妥当な結果であることが分かる．また、 $\tau \gg \tau_{\text{th}}$ における失敗確率の上限は $P_{\text{all}}^{\infty}(\tau)$ で抑えられており、 N が増加すると共に長時間極限における失敗確率が低下することが分かる．図 6.8 には QA の各時刻 u で $\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(u)$ の基底状態を得る確率:

$$P_{\text{inst}}(u) = |\langle 0(u) | \psi(u) \rangle|^2, \quad (6.105)$$

を $N = 10^4, \tau = 3000$ の場合にプロットしてある．ここで、 $|\psi(u)\rangle$ は各時刻の状態ベクトルを表し、 $|0(u)\rangle$ は $\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(u)$ の基底状態を表す．線形スケジューリングでは $|AT_{\max}(s)|$ が最大となる領域で $P_{\text{inst}}(u)$ が急激に減少することが分かる．

断熱定理に基づくスケジューリングにおける失敗確率の τ 依存性を図 6.9 に示す．線形スケジューリングの場合と同様に、全ての N に対して失敗確率は $\tau \simeq \tau_{\text{th}}$ から低下し始めており、式 (6.102) で求めた τ_{th} の依存性は妥当な結果であることが分かる．また、 $\tau \gtrsim \tau_{\text{th}}$ における失敗確率の上限は $P_{\text{all}}^{\infty}(\tau)$ [式 (6.103)] で抑えられており、 N が増加すると共に長時間極限における失敗確率が増加する．図 6.10 には $N = 10^4, \tau = 100$ における $P_{\text{inst}}(u)$ が示してあり、断熱定理に基づくスケジューリングでは u に対して直線に近い形で減少することが分かる．

最後に、線形スケジューリングと断熱定理に基づくスケジューリングにおける失敗確率の τ 依存性を比較する．図 6.11 は $N = 10^4$ における τ 依存性を示している．断熱定理に基づくスケジューリングは線形スケジューリングに対して τ_{th} が小さくなるが、 $\tau \gg \tau_{\text{th}}$ における失敗確率は線形スケジューリングの方が小さくなっている．これは線形スケジューリングの方が $P_{\text{all}}^{\infty}(\tau)$ が小さいことに起因している．長時間極限における失敗確率を下げるためには $|\tilde{A}_{j0}(0)|$ と $|\tilde{A}_{j0}(1)|$ を小さくする必要があるが、これについては先行研究 [59] で議論されている．

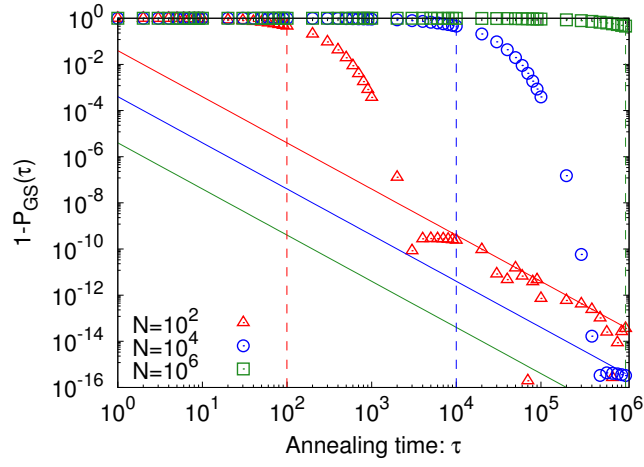


図 6.7: 線形スケジューリングにおける失敗確率の τ 依存性

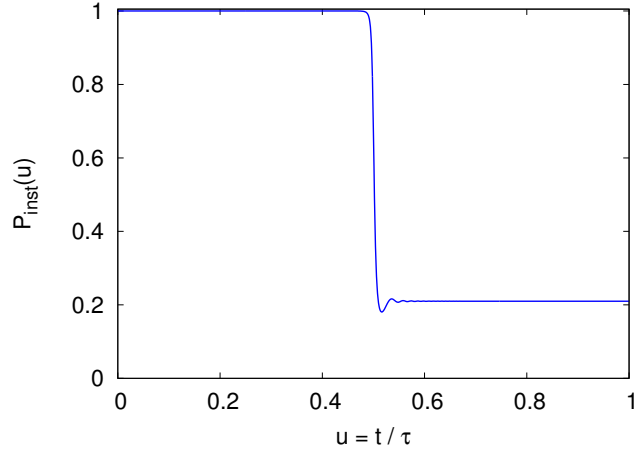


図 6.8: $N = 10^4, \tau = 3000$ における $P_{\text{inst}}(u)$

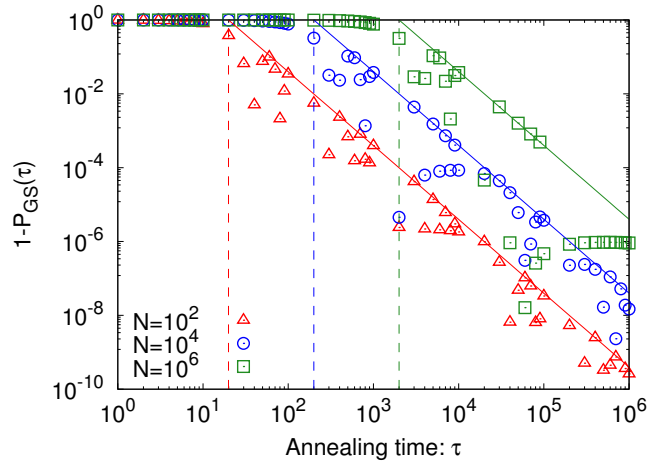


図 6.9: 断熱定理に基づくスケジューリングにおける失敗確率の τ 依存性

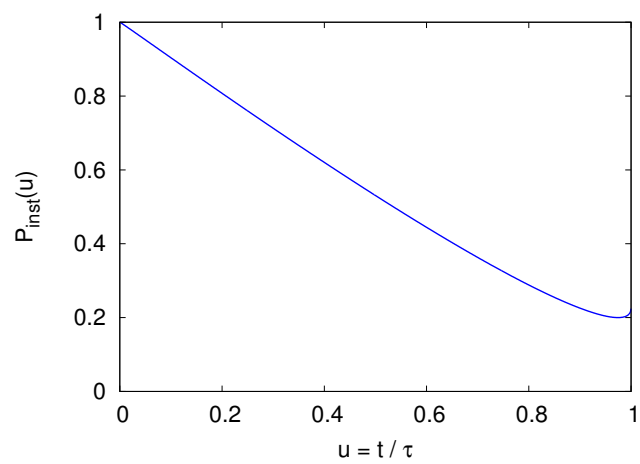


図 6.10: $N = 10^4, \tau = 100$ における $P_{\text{inst}}(u)$

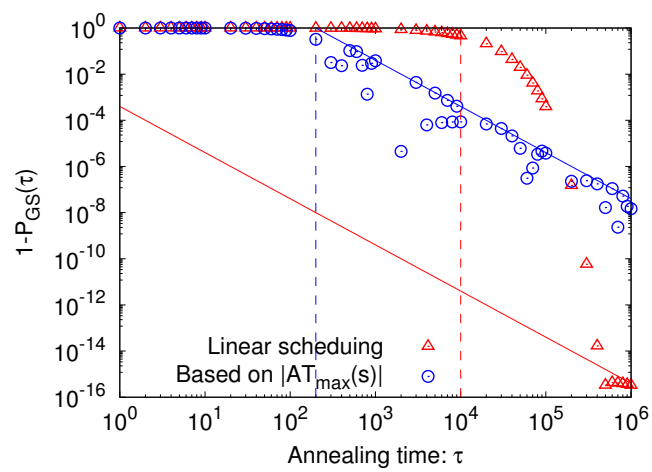


図 6.11: $N = 10^4$ における失敗確率の τ 依存性の比較

6.6 数分割問題のスケジューリング

本節では、数分割問題 [107–109] に対して、 τ_{th} のスケジューリング依存性を確認する。ここで、数分割問題とは与えられた数を 2 つのグループに分割する方法の中で、各グループに含まれる数の和が最も近くなるものを探す問題である。先ほどのグローバー問題の QA は 2 準位系に帰着したが、数分割問題では第一励起状態以外の励起状態も QA に関わってくる。このような場合は、第一励起状態に基づくスケジューリングよりも断熱定理に基づくスケジューリングの方が基底状態を効率的に探索できることを示す。以降では、 τ_{th} のスケジューリング依存性を確認した後、失敗確率と残留エネルギーの τ 依存性を各スケジューリングで評価する。ここで、残留エネルギーとは QA で得られる平均エネルギーと基底状態のエネルギーの差を表す。グローバー問題のような 2 準位系では失敗確率と残留エネルギーは同じ意味をもつが、数分割問題ではこれら 2 つの量は分けて考える必要がある。

6.6.1 問題設定

今回の評価では 8 個の数: $\{8.8, 9.7, 5.0, 6.8, 9.4, 9.2, 4.8, 6.9\}$ を 2 つのグループに分ける問題を設定する。最適解は $\{8.8, 9.7, 5.0, 6.8\}$ と $\{9.4, 9.2, 4.8, 6.9\}$ への分割であり、複数の最適解が発生しないように問題を設定した (図 6.12 参照)。それぞれの数に対してスピン変数 $\sigma_i^z \in (-1, +1)$ を割当て、スピン変数の値によってグループ分けを表現する。ただし、数分割問題はグループの入れ替えに対して対称なので、 $n_8 = 6.9$ を $\sigma_8^z = -1$ のグループに固定する。この場合の評価関数は

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= \left(\sum_{i=1}^{N+1} n_i \sigma_i^z \right)^2, \\ &= \left(\sum_{i=1}^N n_i \sigma_i^z \right)^2 - 2n_{N+1} \sum_{i=1}^N n_i \sigma_i^z, \end{aligned} \quad (6.106)$$

となる。ここで、 $N = 7$ は最適化問題を定義するスピン変数の数を表し、 n_i は与えられた数を表す。

6.6.2 アニール時間スケジューリング依存性

第 6.3 節で導入したハミルトニアンを特徴づける量: $|AT_{j0}(s)|$ は厳密対角化により計算でき、図 6.13 に $|AT_{\text{max}}(s)|$ と $|AT_{10}(s)|$ の計算結果を示す。第一励起状態のみを考慮すると QA の序盤と終盤で励起状態への遷移のし易さを過小評価してしまうことが分かる。線形スケジューリング、断熱定理に基づくスケジューリング、第一励起状態に基づくスケジューリングにおける τ_{th} は厳密対角化の結果を用いて計算することができ、以下に示す値となる。

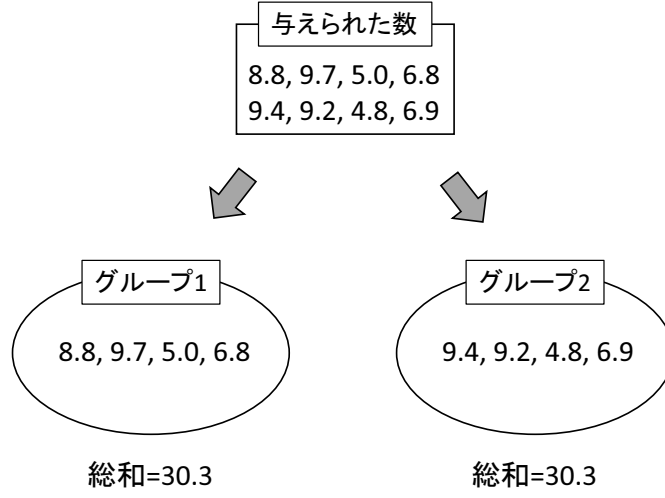


図 6.12: 今回の評価で取り扱う数分割問題

- 線形スケジューリング [式 (6.37) と (6.49) 参照]

$$\tau_c(1) = 2.23 \times 10^4, \quad (6.107)$$

$$\tau_\infty = 8.04 \times 10^2, \quad (6.108)$$

$$\tau_{th} = 2.23 \times 10^4, \quad (6.109)$$

- 断熱定理に基づくスケジューリング [式 (6.41) と (6.57) 参照]

$$\tau_c(1) = 6.88 \times 10^2, \quad (6.110)$$

$$\tau_\infty = 2.32\tau_c(1), \quad (6.111)$$

$$\tau_{th} = 1.60 \times 10^3, \quad (6.112)$$

- 第一励起状態に基づくスケジューリング [式 (6.44) と (6.60) 参照]

$$\tau_c(1) = 1.83 \times 10^9, \quad (6.113)$$

$$\tau_\infty = 0.73\tau_c(1), \quad (6.114)$$

$$\tau_{th} = 1.83 \times 10^9, \quad (6.115)$$

断熱定理に基づくスケジューリングの τ_{th} が最も小さく、第一励起状態に基づくスケジューリングの τ_{th} が最も大きくなっている。この結果は、第一励起状態に基づいたスケジューリングで断熱的な時間発展を達成するためには、線形スケジューリングよりも長いアニーリング時間を必要とすることを示している。スケジューリングを工夫して QA を高速化するには、式 (6.32) の分子にある行列要素も考慮してある程度の高エネルギー状態まで考慮する必要があることが分かる。

断熱定理に基づくスケジューリングと第一励起状態に基づくスケジューリングにおける s の u 依存性を図 6.14 に示す。2つのスケジューリングにおける s はほとんど同じ u 依存性を示となっているにも関わらず、 τ_{th} は式 (6.112) と (6.115) に示すように大きく異なる。

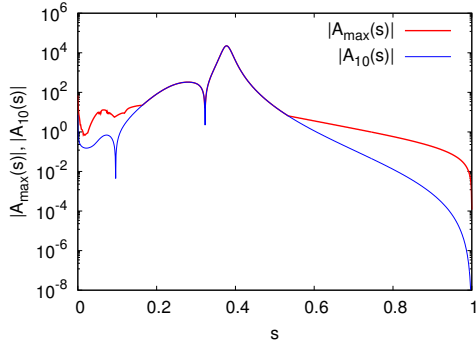


図 6.13: ハミルトニアンを特徴づける量

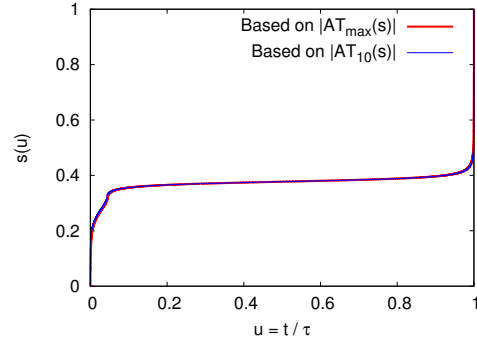


図 6.14: s の u 依存性の比較

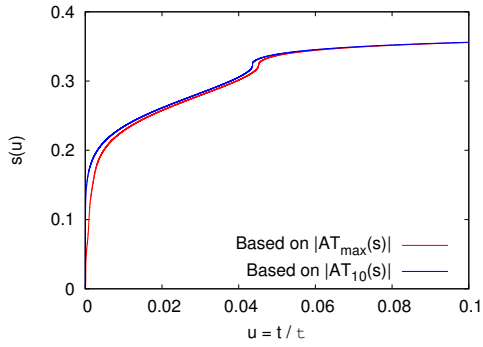


図 6.15: QA 序盤における $s(u)$ の比較

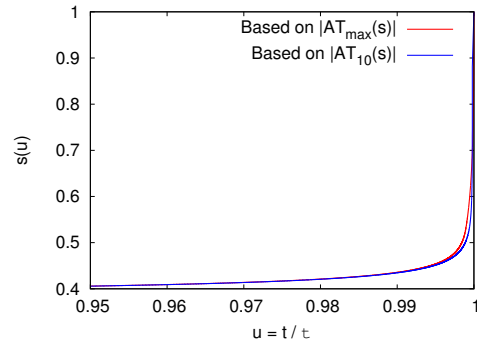


図 6.16: QA 終盤における $s(u)$ の比較

る．このことから， τ_{th} はスケジューリングの変更に対して非常に敏感であり，現実的には D-Wave マシン等のアニーリングマシンでスケジューリングの工夫による高速化を達成するのは非常に難易度が高いことが分かる．また，断熱定理に基づくスケジューリングを導出できて，且つ D-Wave マシン等で正確にスケジューリングを設定できたとしても，第 6.3 節で議論したように指数関数的な高速化を達成できる状況は極めて限定的である．QA の序盤と終盤における $s(u)$ を比較したのが図 6.15 と 6.16 である．第一励起状態に基づくスケジューリングでは QA の序盤と終盤における励起状態への遷移のし易さが過小評価されるので（図 6.13 参照），断熱定理に基づくスケジューリングに対して $s(u)$ が高速に変化している．

6.6.3 数値計算による確認

次に，シュレーディンガー方程式を数値的に解いて，失敗確率と残留エネルギーの τ 依存性を確認する．シュレーディンガー方程式は 4 次のルンゲ-クッタ法を用いて解いた．

線形スケジューリング，第一励起状態に基づいたスケジューリング，断熱定理に基づいたスケジューリングを用いた場合の失敗確率の τ 依存性を図 6.17 に示す．赤の実線は断熱定理に基づくスケジューリングにおける長時間極限の失敗確率の上限 $P_{all}^{\infty}(\tau)$ [式 (6.57)] を表しており，点線は各スケジューリングの τ_{th} を表している．図から明らかなように，断熱定理に基づくスケジューリングを利用すると失敗確率を下げるができるが，第一励

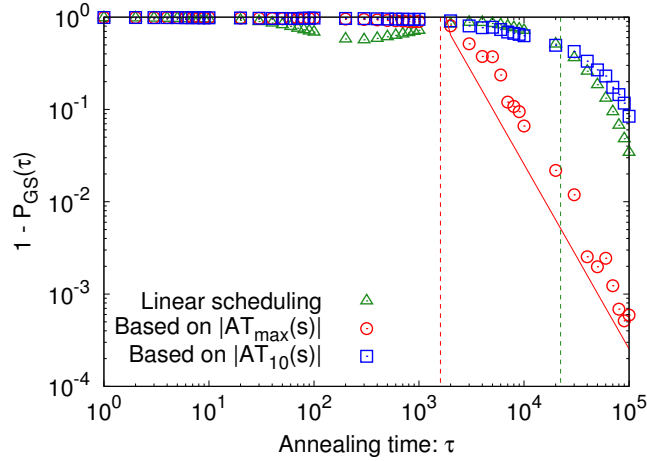


図 6.17: $N = 10^4$ における失敗確率の τ 依存性の比較

起状態に基づくスケジューリングでは線形スケジューリングと同等以下の成功確率しか得られない。第一励起状態に基づくスケジューリングによって QA 性能が改善しないこと自体は予想通りであるが、失敗確率が 1 から下がり始める時間に関しては τ_{th} [式 (6.115)] より小さくなっている。一方で、線形スケジューリングと断熱定理に基づくスケジューリングでは $\tau = \tau_{th}$ 付近から失敗確率が 1 から下がり始めており、この結果は断熱的な時間発展が実現されることで成功確率が上がり始めていることを示唆している。長時間極限における失敗確率に関しても、断熱定理に基づくスケジューリングでは式 (6.57) に近い値となっている。第一励起状態に基づくスケジューリングで τ_{th} よりも短いアニーリング時間から失敗確率が下がり始める原因ははっきりと分らないが、励起状態から基底状態への遷移が寄与しているのではないかと予想される [104, 121]。また、線形スケジューリングの $10^1 \lesssim \tau \lesssim 10^3$ で失敗確率が若干下がっていることも、励起状態から基底状態への遷移が関わっているのではないかと推測される。

図 6.18 は残留エネルギーの τ 依存性を示している。予想に反して、断熱定理に基づくスケジューリングより線形スケジューリングの残留エネルギーの方が低くなっている。成功確率は断熱定理に基づくスケジューリングが最も高くなっていることを考慮すると、断熱定理に基づくスケジューリングでは基底状態かエネルギーの非常に高い励起状態が出力されることが分かる。この原因としては、断熱定理に基づくスケジューリングでは QA の終盤で s を高速に動かすため、 $s \simeq 0.4$ で第一励起状態への遷移が発生すると QA 終盤で励起状態から励起状態への遷移が発生してしまうことが挙げられる。この結果は、高い成功確率を得るためのスケジューリングと低い残留エネルギーを得るためのスケジューリングは一般的に異なっていることを示している。基底状態を効率的に得るための指針は断熱定理によって与えられるが、低い残留エネルギーを得るための効率的なスケジューリングを設定する方法に関してはよく分かっていない。

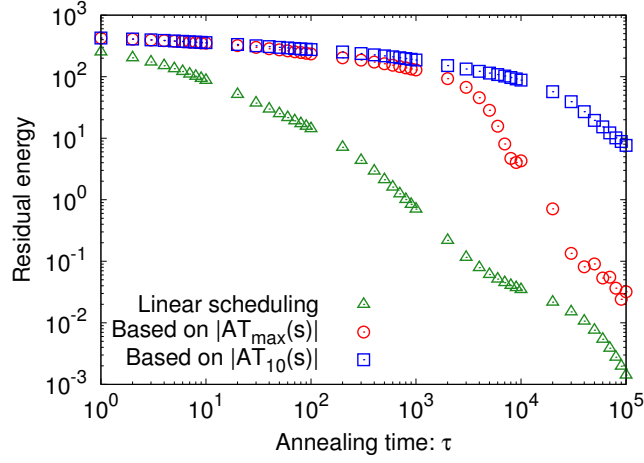


図 6.18: $N = 10^4$ における失敗確率の τ 依存性の比較

6.7 SA の量子系へのマッピング

本節以降では、SA における効率的な温度スケジューリングを検討していく。そのための準備として、本節では SA のダイナミクスを記述するマスター方程式の概要を説明した後、マスター方程式と虚時間シュレーディンガー方程式の対応について説明する。

6.7.1 マスター方程式の概要

古典的な Ising モデルを例にとりてマスター方程式の概要を説明する。マスター方程式は各時刻で各スピン配位 σ を得る確率 $P_\sigma(t)$ に対する微分方程式であり、全体の確率が保存されること:

$$\sum_{\sigma} P_{\sigma}(t) = 1, \quad (6.116)$$

を用いて

$$\frac{dP_{\sigma}(t)}{dt} = \sum_{\sigma' \neq \sigma} [W_{\sigma\sigma'} P_{\sigma'}(t) - W_{\sigma'\sigma} P_{\sigma}(t)], \quad (6.117)$$

で与えられる。ここで、 $\sigma \equiv \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$ であり、 N はスピン変数の数を表す。また、 W は遷移行列と呼ばれ、遷移行列の要素 $W_{\sigma \neq \sigma'}$ は σ' から σ への遷移確率を表す。式 (6.117) の右辺の第一項は σ' から σ に入ってくる確率の流れを表しており、第二項は σ から σ' へ出ていく確率の流れを表している。遷移行列の対角要素 $W_{\sigma\sigma}$ を

$$W_{\sigma\sigma} \equiv - \sum_{\sigma' \neq \sigma} W_{\sigma'\sigma}, \quad (6.118)$$

と定義すると、マスター方程式は行列を用いて

$$\frac{d\mathbf{P}(t)}{dt} = \mathbf{W}\mathbf{P}(t), \quad (6.119)$$

と書くことができる．ここで、 $\mathbf{P}(t)$ は 2^N 個のスピン配位に対する確率を列ベクトルで表現したものである．遷移行列 W の固有値と固有ベクトルが求まればマスター方程式を解くことができ、固有値と固有ベクトルをそれぞれ λ_i, ψ_i とおくと、

$$\mathbf{P}(t) = \sum_{i=0}^{2^N-1} a_i e^{\lambda_i t} \psi_i, \quad (6.120)$$

が得られる．ここで、

$$W\psi_i = \lambda_i \psi_i, \quad (6.121)$$

であり、 $\lambda_0 > \lambda_1 > \dots > \lambda_{2^N-1}$ とする．遷移行列の最大固有値は 0 で縮退がないことが知られており、平衡状態 $\mathbf{P}^\infty \equiv \mathbf{P}(t \rightarrow \infty)$ は

$$\mathbf{P}^\infty = \psi_0, \quad (6.122)$$

となる．また、 $1/|\lambda_1|$ は緩和時間と呼ばれており、系が平衡状態に到達するために必要な時間の目安を与える．平衡状態では式 (6.117) の右辺が 0 となるので

$$\sum_{\sigma' \neq \sigma} W_{\sigma\sigma'} P_{\sigma'}^\infty = \sum_{\sigma' \neq \sigma} W_{\sigma'\sigma} P_{\sigma'}^\infty, \quad (6.123)$$

が成り立つ．これが成り立つための十分条件は両辺の各項が等しくなること:

$$W_{\sigma\sigma'} P_{\sigma'}^\infty = W_{\sigma'\sigma} P_{\sigma'}^\infty, \quad (6.124)$$

であり、詳細つり合い条件と呼ばれる．系が熱浴と相互作用している場合の平衡状態はボルツマン分布:

$$P_{\sigma}^\infty = \frac{1}{Z} e^{-\beta \mathcal{H}_0(\sigma)}, \quad (6.125)$$

$$Z(T) = \sum_{\sigma} e^{-\beta \mathcal{H}_0(\sigma)}, \quad (6.126)$$

で与えられる．ここで、 β は逆温度 ($1/k_B T$) であり、 $\mathcal{H}_0(\sigma)$ は Ising モデルのハミルトニアンであり、 $Z(T)$ は分配関数 (規格化定数) である．以降では、ボルツマン定数 $k_B = 1$ として話を進める．式 (6.125) を詳細つり合い条件の式に代入すると、遷移行列の要素に対する条件として

$$\frac{W_{\sigma\sigma'}}{W_{\sigma'\sigma}} = e^{\beta[\mathcal{H}_0(\sigma') - \mathcal{H}_0(\sigma)]}, \quad (6.127)$$

を得る．遷移行列の要素 $W_{\sigma\sigma'}$ は式 (6.127) を満たせば何でもよく、一般的な形として

$$W_{\sigma\sigma'} = w_{\sigma\sigma'} \exp\left(-\frac{1}{2}\beta [\mathcal{H}_0(\sigma) - \mathcal{H}_0(\sigma')]\right), \quad (6.128)$$

と書くことができる．ここで、

$$w_{\sigma\sigma'} = w_{\sigma'\sigma}, \quad (6.129)$$

を満たす．一般的に $w_{\sigma\sigma'}$ は 1 スピンフリップで遷移可能なスピン配位のペアに対してのみ非ゼロの値が設定される．1 スピンフリップで遷移可能なペアに対して，メトロポリス法では

$$w_{\sigma\sigma'} = \min \left\{ \exp \left(-\frac{1}{2} [\mathcal{H}_0(\sigma) - \mathcal{H}_0(\sigma')] \right), \exp \left(+\frac{1}{2} [\mathcal{H}_0(\sigma) - \mathcal{H}_0(\sigma')] \right) \right\}, \quad (6.130)$$

とし，熱浴法では

$$w_{\sigma\sigma'} = \frac{1}{\exp \left(-\frac{1}{2} [\mathcal{H}_0(\sigma) - \mathcal{H}_0(\sigma')] \right) + \exp \left(+\frac{1}{2} [\mathcal{H}_0(\sigma) - \mathcal{H}_0(\sigma')] \right)}, \quad (6.131)$$

とする．

6.7.2 マスター方程式と虚時間シュレーディンガー方程式の対応

ここでは，SA のダイナミクスを量子系のハミルトニアンの下での時間発展とみなす方法について，先行研究 [110] に沿って説明する．

まず，基底状態において各スピン配位を得る確率が式 (6.125) で与えられる量子系のハミルトニアンを求める．つまり，基底状態 $|\phi_0\rangle$ が

$$|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{Z(T)}} e^{-\frac{1}{2}\beta\hat{\mathcal{H}}_0} \sum_{\sigma} |\sigma\rangle, \quad (6.132)$$

となるようなハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_q(T)$ を求めることが目標である．ここで，

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\sigma} |\sigma\rangle \mathcal{H}_0(\sigma) \langle\sigma|, \quad (6.133)$$

である． $|\phi_0\rangle$ を基底状態にもつ量子系のハミルトニアンは一意に決まるわけではない．先行研究 [111] では

$$\hat{\mathcal{H}}_q = \hat{1} - e^{\frac{1}{2}\beta\hat{\mathcal{H}}_0} \hat{W} e^{-\frac{1}{2}\beta\hat{\mathcal{H}}_0}, \quad (6.134)$$

が提案されているが，先行研究 [110] で提案されている量子系のハミルトニアン：

$$\hat{\mathcal{H}}_q = -e^{\frac{1}{2}\beta\hat{\mathcal{H}}_0} \hat{W} e^{-\frac{1}{2}\beta\hat{\mathcal{H}}_0}, \quad (6.135)$$

では遷移行列 W の固有値と $\hat{\mathcal{H}}_q$ の固有値が一对一対応しているため，古典系から量子系へのマッピングを議論するのに都合が良い．ここで，

$$\hat{W} = \sum_{\sigma, \sigma'} |\sigma\rangle W_{\sigma\sigma'} \langle\sigma'|, \quad (6.136)$$

である．実際に， \hat{W} の固有値と固有ベクトルを $\lambda_i, |\psi_i\rangle$ とおくと，

$$|\phi_i\rangle = e^{\frac{1}{2}\beta\hat{\mathcal{H}}_0} |\psi_i\rangle, \quad (6.137)$$

は $\hat{\mathcal{H}}_q$ の固有値 λ_i に属する固有ベクトルになっていることが分かる．また，式 (6.122) を用いると，基底状態が式 (6.132) となっていることも容易に確認できる．さらに，マスター

方程式において重要な寄与を及ぼす緩和時間 $1/|\lambda_1|$ は、 $\hat{\mathcal{H}}_q$ の基底状態と第一励起状態のエネルギーギャップの逆数として表れている．式 (6.135) に完全性:

$$\sum_{\sigma} |\sigma\rangle \langle \sigma| = \hat{1}, \quad (6.138)$$

を挿入して、式 (6.133) と (6.136) を代入すると

$$\hat{\mathcal{H}}_q = - \sum_{\sigma, \sigma'} e^{\frac{1}{2}\beta[\mathcal{H}_0(\sigma) - \mathcal{H}_0(\sigma')]} W_{\sigma\sigma'} |\sigma\rangle \langle \sigma'|, \quad (6.139)$$

と変形できる．さらに、式 (6.118) と (6.128) を代入すると

$$\hat{\mathcal{H}}_q = - \sum_{\sigma} W_{\sigma\sigma} |\sigma\rangle \langle \sigma| - \sum_{\sigma \neq \sigma'} w_{\sigma\sigma'} |\sigma\rangle \langle \sigma'|, \quad (6.140)$$

が得られる．第一項は対角要素を表し、第二項は非対角要素を表している．第二項の和を 1 スピンフリップで遷移可能なスピン配位のペアに制限し、 σ の j 番目のスピンを反転させたスピン配位を $\bar{\sigma}_j$ とおくと

$$- \sum_{\sigma \neq \sigma'} w_{\sigma\sigma'} |\sigma\rangle \langle \sigma'| = - \sum_j \sum_{\sigma} w_{\sigma\bar{\sigma}_j} |\sigma\rangle \langle \bar{\sigma}_j|, \quad (6.141)$$

となり、横磁場量子揺らぎに対応していることが分かる．式 (6.134) や (6.135) のマッピングを用いることで古典系の熱平衡状態を量子系の基底状態に対応させることができ、横磁場 QA を用いて熱平均値を計算できるようになる．古典系より量子系の方が表現能力が高いことを前提とするならば、古典系の熱平衡状態を量子系の基底状態として表現できると予想するのは自然な話である．

次に、量子系のハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_q$ のもとで、SA の時間発展を記述する運動方程式を求める．SA では温度 T が時間 t に依存して変化し、 \hat{W} や $\hat{\mathcal{H}}_q$ も時間 t と共に変化する．これらの量が時間の関数であることを明示的に表すため

$$\hat{\mathcal{H}}_q(t) = -e^{\frac{1}{2}\beta(t)\hat{\mathcal{H}}_0} \hat{W}(t) e^{-\frac{1}{2}\beta(t)\hat{\mathcal{H}}_0}, \quad (6.142)$$

と書くことにする．また、式 (6.137) を参考にして量子系の状態ベクトル $|\phi(t)\rangle$ を

$$|\phi(t)\rangle \equiv e^{\frac{1}{2}\beta(t)\hat{\mathcal{H}}_0} |P(t)\rangle, \quad (6.143)$$

と定義する．ここで、 $P_{\sigma}(t) = \langle \sigma | P(t) \rangle$ である．式 (6.143) をマスター方程式:

$$\frac{d}{dt} |P(t)\rangle = \hat{W}(t) |P(t)\rangle, \quad (6.144)$$

に代入して式 (6.142) を用いると、SA の時間発展を記述する運動方程式として

$$-\frac{d}{dt} |\phi(t)\rangle = \left[\hat{\mathcal{H}}_q(t) - \frac{1}{2} \frac{d\beta(t)}{dt} \hat{\mathcal{H}}_0 \right] |\phi(t)\rangle, \quad (6.145)$$

が得られる．式 (6.145) の左辺の t を it に置き換えると通常のシュレーディンガー方程式 (以降、実時間シュレーディンガー方程式と呼ぶ) となるため、これは虚時間シュレーディンガー方程式と呼ばれる．この結果から、虚時間シュレーディンガー方程式における効率的なスケジューリングが分かれば SA の高速化に繋がると期待される．

6.8 虚時間シュレーディンガー方程式の断熱定理

本節では、先行研究 [112] の内容に沿って虚時間シュレーディンガー方程式の断熱定理を導出する。先行研究 [112] では導出した断熱定理に基づいて SA の収束定理 [13] を導いている。

虚時間シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}(t) |\psi(t)\rangle, \quad (6.146)$$

で与えられる。ここで、 $\hat{\mathcal{H}}(t)$ は系のハミルトニアンであり、 $|\psi(t)\rangle$ は状態ベクトルを表す。虚時間シュレーディンガー方程式では、状態ベクトルのノルム $\langle\psi(u)|\psi(u)\rangle$ が保存しないことに注意しなければならない。式 (6.146) を用いると、 $\langle\psi(u)|\psi(u)\rangle$ の時間微分は

$$\frac{d}{dt} \langle\psi(u)|\psi(u)\rangle = \left[\frac{d}{dt} \langle\psi(t)| \right] |\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)| \left[\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \right] \quad (6.147)$$

$$= -2 \langle\psi(t)|\hat{\mathcal{H}}(t)|\psi(t)\rangle, \quad (6.148)$$

となることが分かる。つまり、虚時間シュレーディンガー方程式による時間発展を考えた場合は、励起状態の展開係数に加えて規格化定数 $|\langle\psi(u)|\psi(u)\rangle|^2$ の値も調べる必要がある。

第 6.2 節で断熱定理を導出したときと同様に、時間 t をアニーリング時間 τ で規格化して

$$u \equiv \frac{t}{\tau}, \quad (6.149)$$

とおくと、虚時間シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{1}{\tau} \frac{d}{du} |\psi(u)\rangle = \hat{\mathcal{H}}(u) |\psi(u)\rangle, \quad (6.150)$$

と書くことができる。ハミルトニアンと状態ベクトルは u の関数とみなすことで関数形が変化するが、同じ文字を用いて $\hat{\mathcal{H}}(u), |\psi(u)\rangle$ としている。状態ベクトル $|\psi(u)\rangle$ を $\hat{\mathcal{H}}(u)$ の固有ベクトルで展開して

$$|\psi(u)\rangle = \sum_k c_k(u) |k(u)\rangle = \sum_k c'_k(u) e^{-\tau\phi_k(u)} |k(u)\rangle, \quad (6.151)$$

とする。ここで、 $|k(u)\rangle$ は $\hat{\mathcal{H}}(u)$ の固有ベクトルを表し、

$$\hat{\mathcal{H}}(u) |k(u)\rangle = \varepsilon_k(u) |k(u)\rangle, \quad (6.152)$$

$$\phi_k(u) \equiv \int_0^u du' \varepsilon_k(u'), \quad (6.153)$$

である。式 (6.151) を式 (6.150) に代入して左から $\langle j(u)|$ を掛けると、 $c'_j(u)$ に関する微分方程式として

$$\frac{dc'_j(u)}{du} e^{-\tau\phi_j(u)} + \sum_k c'_k(u) e^{-\tau\phi_k(u)} \left\langle j(u) \left| \frac{d}{du} \right| k(u) \right\rangle = 0, \quad (6.154)$$

が得られる．さらに，式 (6.152) の両辺を u で微分して左から $\langle j \neq k(u) |$ を掛けると

$$\left\langle j(u) \left| \frac{d}{du} \right| k(u) \right\rangle = -\frac{1}{\Delta\varepsilon_{jk}(u)} \left\langle j(u) \left| \frac{d\hat{\mathcal{H}}(u)}{du} \right| k(u) \right\rangle, \quad (6.155)$$

$$\Delta\varepsilon_{jk}(u) \equiv \varepsilon_j(u) - \varepsilon_k(u), \quad (6.156)$$

が得られるので， $c'_j(u)$ の微分方程式は

$$\frac{dc'_j(u)}{du} = \sum_{k \neq j} c'_k(u) \frac{1}{\Delta\varepsilon_{jk}(u)} \left\langle j(u) \left| \frac{d\hat{\mathcal{H}}(u)}{du} \right| k(u) \right\rangle e^{\tau\Delta\phi_{jk}(u)}, \quad (6.157)$$

$$\Delta\phi_{jk}(u) = \phi_j(u) - \phi_k(u), \quad (6.158)$$

と変形できる．式 (6.157) の両辺を積分して $e^{-\tau\phi_j(u)}$ を掛けると

$$\begin{aligned} c_j(u) &= c_j(0)e^{-\tau\phi_j(u)} \\ &+ e^{-\tau\phi_j(u)} \sum_{k \neq j} \int_0^u du' c_k(u') \frac{1}{\Delta\varepsilon_{jk}(u')} \left\langle j(u') \left| \frac{d\hat{\mathcal{H}}(u')}{du'} \right| k(u') \right\rangle e^{\tau\phi_j(u')}, \end{aligned} \quad (6.159)$$

となる．アニーリング時間 τ が十分長い場合を想定し，式 (6.159) の右辺に含まれる $c_k(u')$ に対して

$$c_j(u) \simeq \begin{cases} c_0(0)e^{-\tau\phi_0(u)} & j = 0, \\ 0 & j \neq 0, \end{cases} \quad (6.160)$$

と近似すると，励起状態の展開係数は

$$c_{j \geq 1}(u) \simeq c_0(0)e^{-\tau\phi_j(u)} \int_0^u du' \frac{1}{\Delta\varepsilon_{j0}(u')} \left\langle j(u') \left| \frac{d\hat{\mathcal{H}}(u')}{du'} \right| 0(u') \right\rangle e^{\tau\Delta\phi_{j0}(u')}, \quad (6.161)$$

となる．さらに，

$$\frac{d}{du} e^{\tau\Delta\phi_{j0}(u)} = \tau\Delta\varepsilon_{j0}(u)e^{\tau\Delta\phi_{j0}(u)}, \quad (6.162)$$

を利用して部分積分を実行し， τ^{-1} の項のみを残すと

$$\frac{c_{j \geq 1}(u)}{c_0^{(0)}(u)} \simeq \frac{1}{\tau} \left[A_{j0}(u) - A_{j0}(0)e^{-\tau\Delta\phi_{j0}(u)} \right], \quad (6.163)$$

$$c_0^{(0)}(u) \equiv c_0(0)e^{-\tau\phi_0(u)}, \quad (6.164)$$

$$A_{j0}(u) \equiv \frac{1}{\Delta\varepsilon_{j0}(u)^2} \left\langle j(u) \left| \frac{d\hat{\mathcal{H}}(u)}{du} \right| 0(u) \right\rangle, \quad (6.165)$$

が得られる． $\phi_{j0}(u) > 0$ であることを考慮すると $\tau \gg 1$ では式 (6.163) の第二項は消えて

$$\frac{c_{j \geq 1}(u)}{c_0^{(0)}(u)} \simeq \frac{1}{\tau} A_{j0}(u), \quad (6.166)$$

となる．式 (6.135) のマッピングを用いると，エネルギーギャップと緩和時間の逆数との間に対応関係を取れるため，第二項の指数関数的な減衰はマスター方程式における緩和と関連があると考えられる．励起状態の展開係数の指数関数的な減衰は実時間シュレーディンガー方程式にはない特徴であり，虚時間シュレーディンガー方程式ではこれを利用することで断熱的な時間発展をしない場合でも高い成功確率を得られる場合がある（第 6.9 節参照）．基底状態の展開係数の時間変化を求めるため，式 (6.166) を式 (6.159) に代入すると

$$\frac{c_0(u)}{c_0^{(0)}(u)} \simeq 1 - \frac{1}{\tau} \sum_{k \geq 1} \int_0^u du' B_{j0}(u'), \quad (6.167)$$

$$B_{j0}(u) \equiv \frac{1}{\Delta \varepsilon_{j0}(u)^2} \left\langle j(u) \left| \frac{d\hat{\mathcal{H}}(u)}{du} \right| 0(u) \right\rangle^* A_{j0}(u), \quad (6.168)$$

$$= \frac{1}{\Delta \varepsilon_{j0}(u)^3} \left| \left\langle j(u) \left| \frac{d\hat{\mathcal{H}}(u)}{du} \right| 0(u) \right\rangle \right|^2, \quad (6.169)$$

が得られる．式 (6.166) と (6.167) より，虚時間シュレーディンガー方程式の下で断熱的な時間発展を実現するためには

$$\max_{u,j} \left[\frac{1}{\tau} |A_{j0}(u)| \right] \ll 1, \quad (6.170)$$

$$\max_j \left[\frac{1}{\tau} \left| \int_0^u du' B_{j0}(u') \right| \right] \ll 1, \quad (6.171)$$

を満たす必要がある．式 (6.170) は実時間シュレーディンガー方程式の断熱条件と一致しており，式 (6.171) はノルムが保存しないことに起因して発生する虚時間シュレーディンガー方程式特有の条件である．

6.9 虚時間シュレーディンガー方程式によるグローバー問題の QA

本節では，解析的な計算が可能なグローバー問題を例題として設定し，虚時間シュレーディンガー方程式における効率的なスケジューリングを検討する．先行研究 [112] では虚時間シュレーディンガー方程式の断熱定理をもとに SA の収束定理 [13] を導いている．同様にして，虚時間シュレーディンガー方程式における効率的なスケジューリングが分かれば，温度スケジューリングの工夫による SA の高速化に貢献できる可能性がある．グローバー問題のハミルトニアンは式 (6.62) から (6.65) で与えられ， $s(u)$ のスケジューリングによって $\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(u)$ の時間依存性を制御する．ここで注意しなければならないのは，本節で扱っているのはグローバー問題の SA ではないことである．グローバー問題の SA を虚時間シュレーディンガー方程式を用いて調べるためには式 (6.135) の変換をする必要がある．しかしながら，ここでの目的は虚時間シュレーディンガー方程式における効率的なスケジューリングに関して一般的な結論を得ることであり，解析が容易な式 (6.62) から (6.65) のハミルトニアンのもとでの時間発展を調べることにする．以降では，時間発展が虚時間シュレーディンガー方程式によって記述される QA を QA-IT と呼ぶことにし，時間発展が実時間シュレーディンガー方程式で記述される QA を QA-RT と呼ぶことにする．

6.9.1 アニールリング時間のスケジューリング依存性

前節で求めた断熱定理を用いて, QA-IT で断熱的な時間発展を実現するために必要なアニールリング時間のスケジューリング依存性を計算する. ここでは, アニールリング時間を特徴づける時間として以下の3つの時間:

$$\max_u \left[\frac{1}{\tau_c(\delta_c)} |A_{\max}(u)| \right] = \delta_c \ll 1, \quad (6.172)$$

$$\max_j \left[\frac{1}{\tau_d(\delta_d)} \left| \int_0^u du' B_{j0}(u') \right| \right] = \delta_d \ll 1, \quad (6.173)$$

$$\tau_{\text{th}} = \max[\tau_c(1), \tau_d(1)], \quad (6.174)$$

を導入し, 線形スケジューリングと断熱定理に基づいたスケジューリング [式 (6.27), (6.36), (6.39) 参照] における $\tau_c(\delta_c), \tau_d(\delta_d), \tau_{\text{th}}$ を計算する. ここで,

$$|A_{\max}(u)| \equiv \max_j |A_{j0}(u)|, \quad (6.175)$$

とおいた. $\tau_c(\delta_c)$ は QA-IT と QA-RT に共通するアニールリング時間であり, $\tau_d(\delta_d)$ は QA-IT 特有のアニールリング時間である. 線形スケジューリングにおけるアニールリング時間は, 式 (6.31), (6.36), (6.95), (6.168) を用いると

$$\tau_c(\delta_c) = \frac{1}{\delta_c} \sqrt{N(N-1)} \sim O(N), \quad (6.176)$$

$$\tau_d(\delta_d) = \frac{1}{\delta_d} \frac{(N-1)(2N+1)}{3N} \sim O(N), \quad (6.177)$$

$$\tau_{\text{th}} = \tau_c(1) = \sqrt{N(N-1)} \sim O(N), \quad (6.178)$$

が得られる. また, 断熱定理に基づくスケジューリングでは式 (6.36) の代わりに式 (6.39) を用いて

$$\tau_c(\delta_c) = \frac{1}{\delta_c} \sqrt{N-1} \sim O(\sqrt{N}), \quad (6.179)$$

$$\tau_d(\delta_d) = \frac{1}{\delta_d} \sqrt{N-1} \arctan \sqrt{N-1} \sim O(\sqrt{N}), \quad (6.180)$$

$$\tau_{\text{th}} = \tau_d(1) = \sqrt{N-1} \arctan \sqrt{N-1} \sim O(\sqrt{N}), \quad (6.181)$$

が得られる. QA-IT と QA-RT の τ_{th} は同じ N 依存性を示しており [式 (6.98) と (6.178), 式 (6.102) と (6.181) を参照], グローバー問題において断熱的な時間発展を実現するためのアニールリング時間には両方で本質的な違いがないことが分かる.

6.9.2 線形スケジューリングでの成功確率

前節で求めた励起状態の展開係数 [式 (6.163)] から分かるように, 励起状態の展開係数は基底状態とのエネルギーギャップに依存した速さで指数関数的に減衰する. このことから, QA-IT では基底状態から励起状態への遷移が発生したとしても, エネルギーギャップが大きい領域での減衰を利用することで高い成功確率が得られると期待される. 実際に,

いくつかのモデルで QA-RT より QA-IT の方が高速となることが先行研究 [16, 18, 19] で示されている．ここでは，短時間極限での線形スケジューリングにおける成功確率の上限を計算し，励起状態の指数減衰を考慮した場合の計算時間を算出する．

線形スケジューリングにおけるグローバー問題のハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{QA}}(s) = s\hat{\mathcal{H}}_0 + (1-s)\hat{\mathcal{H}}_q, \quad (6.182)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \hat{I}_N - |0\rangle\langle 0|, \quad (6.183)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_q = \hat{I}_N - |\Psi_0\rangle\langle \Psi_0|, \quad (6.184)$$

$$|\Psi_0\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle, \quad (6.185)$$

$$\frac{ds}{du} = 1, \quad (6.186)$$

で与えられる．第 6.5 節で述べたようにグローバー問題の QA は 2 準位系に帰着するので，基底状態と励起状態の展開係数のみを考えればよく， $\max_j |A_{j0}(u)| = |A_{10}(u)|$ となる．式 (6.157) に式 (6.165) を代入すると，展開係数の微分方程式は

$$\frac{dc'_1(u)}{du} = +c'_0(u)\Delta\varepsilon_{10}(u)A_{10}(u)e^{+\tau\Delta\phi_{10}(u)}, \quad (6.187)$$

$$\frac{dc'_0(u)}{du} = -c'_1(u)\Delta\varepsilon_{10}(u)A_{10}^*(u)e^{-\tau\Delta\phi_{10}(u)}, \quad (6.188)$$

となる．この微分方程式に式 (6.34), (6.36), (6.95) を代入すると

$$\frac{dc'_1(u)}{du} = +\frac{\sqrt{N-1}}{N} \frac{c'_0(u)}{\Delta\varepsilon_{10}(u)^2} e^{+\tau\Delta\phi_{10}(u)}, \quad (6.189)$$

$$\frac{dc'_0(u)}{du} = -\frac{\sqrt{N-1}}{N} \frac{c'_1(u)}{\Delta\varepsilon_{10}(u)^2} e^{-\tau\Delta\phi_{10}(u)}, \quad (6.190)$$

と変形できる．式 (6.189) を積分すると，励起状態の展開係数について

$$c'_1(u) = c'_1(0) + \frac{\sqrt{N-1}}{N} \int_0^u du' \frac{c'_0(u')}{\Delta\varepsilon_{10}(u')^2} e^{\tau\Delta\phi_{10}(u')}, \quad (6.191)$$

が得られる．初期条件を

$$c_0(0) = c'_0(0) = 1, \quad (6.192)$$

$$c_1(0) = c'_1(0) = 0, \quad (6.193)$$

と設定すると，式 (6.190) の右辺は負となるので，

$$c'_0(u) \leq 1, \quad (6.194)$$

となる．式 (6.191) に式 (6.193) と (6.194) を代入して，両辺に $e^{-\tau\phi_1(u)}$ を掛けると

$$c_1(u) \leq e^{-\tau\phi_0(u)} D_1(u), \quad (6.195)$$

$$D_1(u) \equiv \frac{\sqrt{N-1}}{N} e^{-\tau\Delta\phi_{10}(u)} \int_0^u \frac{du'}{\Delta\varepsilon_{10}(u')^2} e^{\tau\Delta\phi_{10}(u')}, \quad (6.196)$$

となる． $c_1(u)$ の上限を評価するためには， $D_1(u)$ の右辺の積分を計算すればよい．断熱定理では長時間極限における展開係数を求めることを目指していたので，式 (6.196) の部分積分を実行する際に $e^{\tau\Delta\phi_{10}(u')}$ を積分し， $1/\tau$ の次数を増加させていた．一方で，ここでは短時間アニーリングでの展開係数を求めたいので，部分積分を実行する際に $e^{\tau\Delta\phi_{10}(u')}$ を微分して， τ の次数を増加させていくという方針をとる．ただし，以降の計算が簡単になるため，断熱定理の導出と同様の部分積分を 1 回だけ実行し，

$$D_1(u) = \frac{1}{\tau} \frac{\sqrt{N-1}}{N} e^{-\tau\Delta\phi_{10}(u)} \left\{ \left[\frac{1}{\Delta\varepsilon_{10}(u')^3} e^{\tau\Delta\phi_{10}(u')} \right]_{u'=0}^{u'=1} + 12 \left(1 - \frac{1}{N} \right) \int_0^u \frac{du'}{\Delta\varepsilon_{10}(u')^5} \left(u' - \frac{1}{2} \right) e^{\tau\Delta\phi_{10}(u')} \right\}, \quad (6.197)$$

と変形する．式 (6.158) に式 (6.153) と (6.88) を代入すると， $N \gg 1$ では

$$\Delta\phi_{10}(u) \simeq \frac{1}{2} \left(u - \frac{1}{2} \right) \Delta\varepsilon_{10}(u) + \frac{1}{4}, \quad (6.198)$$

と近似できる（付録.B 参照）．式 (6.198) を式 (6.197) に代入すると，QA 終了時点 ($u = 1$) における $D_1(u = 1)$ は

$$D_1(u = 1) \simeq \frac{1}{\tau} \frac{\sqrt{N-1}}{N} (1 - e^{-\frac{\tau}{2}}) + \frac{12N}{\tau} \left(\frac{\sqrt{N-1}}{N} \right)^3 e^{-\frac{\tau}{4}} I_1(1, 0), \quad (6.199)$$

$$I_1(u_a, u_b) \equiv \int_{u_a}^{u_b} \frac{du}{\Delta\varepsilon_{10}(u)^5} \left(u - \frac{1}{2} \right) e^{\frac{\tau}{2} \left(u - \frac{1}{2} \right) \Delta\varepsilon_{10}(u)}, \quad (6.200)$$

となる．さらに，式 (6.200) の右辺に含まれる指数関数の肩に対して， $N \gg 1$ として

$$\frac{\tau}{2} \left(u - \frac{1}{2} \right) \Delta\varepsilon_{10}(u) \simeq \tau \left(u - \frac{1}{2} \right) \left| u - \frac{1}{2} \right|, \quad (6.201)$$

と近似する．この近似ではエネルギーギャップの最小値を 0 としているため，断熱的な時間発展について調べたい場合に採用すると間違いを起こすと考えられる．一方で，グローバー問題に対する短時間の QA-IT では励起状態の展開係数の指数減衰が支配的な要素となるため，大きな問題にはならない．或いは，短時間の QA ではエネルギーギャップの最小値が $1/\sqrt{N}$ と 0 のどちらであったとしても，基底状態を維持するよりも励起状態に遷移する方が支配的であると考えてもよい．式 (6.201) は $|u - 1/2|$ を含むので，

$$I_1(0, 1) = I_1 \left(0, \frac{1}{2} \right) + I_1 \left(\frac{1}{2}, 1 \right), \quad (6.202)$$

と分解して，第一項と第二項の上限を別々に評価する．第一項に関しては，積分変数を

$$x = 4(N-1) \left(u - \frac{1}{2} \right)^2 + 1, \quad (6.203)$$

と変換すると

$$I_1 \left(0, \frac{1}{2} \right) \simeq -\frac{1}{8} \frac{N^{\frac{5}{2}}}{N-1} e^{\frac{1}{4} \frac{\tau}{N-1}} J_1(1, N), \quad (6.204)$$

$$J_1(1, N) \equiv \int_1^N \frac{dx}{x^{\frac{5}{2}}} e^{-\frac{x}{4} \frac{\tau}{N-1}}, \quad (6.205)$$

となる． $J_1(1, N)$ の被積分関数に含まれる $1/x^{\frac{5}{2}}$ は繰り返し積分し易い関数であり，部分積分を実行する際に $e^{-\frac{x}{4} \frac{\tau}{N-1}}$ を微分して τ の次数を増やしていくことができる．この部分積分を 3 回実行すると

$$\begin{aligned} J_1(1, N) = & \frac{2}{3} e^{-\frac{1}{4} \frac{\tau}{N-1}} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\tau}{N-1} \right) - \frac{1}{4} \left(\frac{\tau}{N-1} \right)^2 \right] \\ & - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{N} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{4} \frac{N\tau}{N-1}} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{N\tau}{N-1} \right) - \frac{1}{4} \left(\frac{N\tau}{N-1} \right)^2 \right] \\ & + \frac{1}{24} \left(\frac{\tau}{N-1} \right)^3 \int_1^N \sqrt{x} e^{-\frac{x}{4} \frac{\tau}{N-1}} dx, \end{aligned} \quad (6.206)$$

が得られる．式 (6.206) の第三項の積分を厳密に計算することはできないが， $1 \leq x \leq N$ で成立する以下の不等式:

$$\frac{1}{1 + \sqrt{N}} x + \frac{\sqrt{N}}{1 + \sqrt{N}} \leq \sqrt{x}, \quad (6.207)$$

を用いると $J_1(1, N)$ の下限を

$$\begin{aligned} J_1(1, N) \geq & \frac{2}{3} e^{-\frac{1}{4} \frac{\tau}{N-1}} \left[1 - \frac{1}{2} \frac{\sqrt{N}-1}{\sqrt{N}+1} \left(\frac{\tau}{N-1} \right) \right] \\ & - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{N} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{1}{4} \frac{N\tau}{N-1}} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{N}-1}{\sqrt{N}+1} \left(\frac{N\tau}{N-1} \right) \right], \end{aligned} \quad (6.208)$$

と評価することができ，結果を式 (6.204) に代入すると

$$\begin{aligned} I_1 \left(0, \frac{1}{2} \right) \leq & -\frac{1}{12} \frac{N^{\frac{5}{2}}}{N-1} \left[1 - \frac{1}{2} \frac{\sqrt{N}-1}{\sqrt{N}+1} \left(\frac{\tau}{N-1} \right) \right] \\ & + \frac{1}{12} \frac{N}{N-1} e^{-\frac{\tau}{4}} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{N}-1}{\sqrt{N}+1} \left(\frac{N\tau}{N-1} \right) \right] \end{aligned} \quad (6.209)$$

が得られる．式 (6.202) の第二項に関しても，式 (6.203) によって積分変数を変換すると

$$I_1 \left(\frac{1}{2}, 1 \right) \simeq \frac{1}{8} \frac{N^{\frac{5}{2}}}{N-1} e^{-\frac{1}{4} \frac{\tau}{N-1}} K_1(1, N), \quad (6.210)$$

$$K_1(1, N) \equiv \int_1^N \frac{dx}{x^{\frac{5}{2}}} e^{\frac{x}{4} \frac{\tau}{N-1}}, \quad (6.211)$$

と変形できる．先程と同様の部分積分を 3 回実行すると

$$\begin{aligned} K_1(1, N) = & -\frac{2}{3} \left(\frac{1}{N} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{1}{4} \frac{N\tau}{N-1}} \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{N\tau}{N-1} \right) - \frac{1}{4} \left(\frac{N\tau}{N-1} \right)^2 \right] \\ & + \frac{2}{3} e^{\frac{1}{4} \frac{\tau}{N-1}} \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\tau}{N-1} \right) - \frac{1}{4} \left(\frac{\tau}{N-1} \right)^2 \right] \\ & - \frac{1}{24} \left(\frac{\tau}{N-1} \right)^3 \int_1^N \sqrt{x} e^{\frac{x}{4} \frac{\tau}{N-1}} dx, \end{aligned} \quad (6.212)$$

となり、式 (6.207) を用いると $K_1(1, N)$ の上限を

$$K_1(1, N) \leq -\frac{2}{3} \left(\frac{1}{N} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{1}{4} \frac{N\tau}{N-1}} \left[1 - \frac{1}{2} \frac{\sqrt{N}-1}{\sqrt{N}+1} \left(\frac{N\tau}{N-1} \right) \right] + \frac{2}{3} e^{\frac{1}{4} \frac{\tau}{N-1}} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{N}-1}{\sqrt{N}+1} \frac{\tau}{N-1} \right], \quad (6.213)$$

と評価することができる。この結果を式 (6.210) に代入すると、

$$I_1 \left(\frac{1}{2}, 1 \right) \leq -\frac{1}{12} \frac{N}{N-1} e^{\frac{\tau}{4}} \left[1 - \frac{1}{2} \frac{\sqrt{N}-1}{\sqrt{N}+1} \left(\frac{N\tau}{N-1} \right) \right] + \frac{1}{12} \frac{N^{\frac{5}{2}}}{N-1} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{N}-1}{\sqrt{N}+1} \left(\frac{\tau}{N-1} \right) \right], \quad (6.214)$$

が得られる。式 (6.199) に式 (6.202), (6.209), (6.214) を代入すると

$$D_1(u=1) \leq \frac{1}{2\sqrt{N}-1} \frac{\sqrt{N}-1}{\sqrt{N}+1} \left(1 + 2\sqrt{N}e^{-\frac{\tau}{4}} + e^{-\frac{\tau}{2}} \right) \simeq e^{-\frac{\tau}{4}}, \quad (6.215)$$

となる。この結果は、励起状態の展開係数は N に依存しない速さで指数関数的に減衰することを示しており、この結果の妥当性については後の数値計算で確認する。

次に、基底状態の展開係数の下限を評価する。QA-IT ではノルムが保存しないので、成功確率を計算するためには基底状態と励起状態の展開係数の比を求める必要がある。まず、以下の不等式:

$$\frac{d}{dt} \sqrt{P_{\text{GS}}(t)} = \frac{d}{dt} \frac{\langle 0|\psi(t) \rangle}{\langle \psi(t)|\psi(t) \rangle} \geq 0, \quad (6.216)$$

を証明する。この不等式は、最適解 $|0\rangle$ を得る確率が QA-IT の過程で減少しないことを表している。式 (6.147) を用いると

$$\frac{d}{dt} \sqrt{P_{\text{GS}}(t)} = \frac{\langle 0|\psi(t) \rangle \langle \psi(t)|\hat{H}(t)|\psi(t) \rangle - \langle \psi(t)|\psi(t) \rangle \langle 0|\hat{H}(t)|\psi(t) \rangle}{\langle \psi(t)|\psi(t) \rangle^{\frac{3}{2}}}, \quad (6.217)$$

と変形できる。式 (6.90) と (6.91) を用いると、最適解 $|0\rangle$ は

$$|0\rangle = P(t) |0(t)\rangle - Q(t) |1(t)\rangle, \quad (6.218)$$

$$0 \leq P(t), Q(t) \leq 1, \quad (6.219)$$

と展開でき、状態ベクトルは

$$|\psi(t)\rangle = L(t) \left[\alpha(t) |0(t)\rangle + \sqrt{1 - \alpha(t)^2} |1(t)\rangle \right], \quad (6.220)$$

$$0 \leq \alpha(t) \leq 1, \quad (6.221)$$

と書くことができる．ここで、 $L(t)$ は時間に依存する状態ベクトルのノルムを表している．式 (6.218) と (6.220) を式 (6.217) に代入すると

$$\frac{d}{dt}\sqrt{P_{\text{GS}}(t)} = \alpha(t)\sqrt{1-\alpha(t)^2} \left[\sqrt{1-\alpha(t)^2}P(t) + \alpha(t)Q(t) \right] \Delta\epsilon_{10}(t) \geq 0, \quad (6.222)$$

となり、式 (6.216) が示される．この結果から、

$$P_{\text{GS}}(\tau) \geq \frac{1}{N}, \quad (6.223)$$

となることが分かる．ここで、 $P_{\text{GS}}(\tau)$ は QA-IT の終了時点で最適解を得る確率を表しており、 $1/N$ は QA-IT の初期条件において最適解を得る確率を表している．基底状態の展開係数を

$$C_0(u) \equiv e^{-\tau\phi_0(u)}D_0(u), \quad (6.224)$$

において、式 (6.224) と (6.195) を用いると、 $P_{\text{GS}}(\tau)$ は展開係数を用いて

$$P_{\text{GS}}(\tau) = \frac{c_0(1)^2}{c_0(1)^2 + c_1(1)^2}, \quad (6.225)$$

$$= \frac{D_0(1)^2}{D_0(1)^2 + D_1(1)^2}, \quad (6.226)$$

と書くことができる．励起状態の展開係数に関しては、式 (6.215) より $\tau \rightarrow 0, N \rightarrow \infty$ で

$$D_1(u=1) \leq 1, \quad (6.227)$$

を満たしており、式 (6.223), (6.226), (6.227) を用いると

$$D_0(u=1) \geq \frac{1}{\sqrt{N}}, \quad (6.228)$$

が得られる．

最後に、特定の成功確率:

$$P_{\text{GS}}(\tau) = \frac{1}{1 + \delta'^2}, \quad (6.229)$$

を達成するために必要なアニーリング時間 $\tau_{\text{GS}}(\delta')$ を計算する．式 (6.215) と (6.228) より、

$$\frac{D_1(1)}{D_0(1)} \lesssim \sqrt{N}e^{-\frac{\tau}{4}}, \quad (6.230)$$

が得られ、これを式 (6.226) に代入すると

$$P_{\text{GS}}(\tau) = \frac{1}{1 + Ne^{-\frac{\tau}{2}}}, \quad (6.231)$$

となる．この結果から、式 (6.229) を達成するためのアニーリング時間は

$$\tau_{\text{GS}}(\delta') = 2 \log \left(\frac{N}{\delta'^2} \right) \sim O(\log N), \quad (6.232)$$

と見積もることができる．

断熱的な時間発展を前提にしたアニーリング時間 τ_{th} は $O(N)$ で増加するが、励起状態の展開係数の指数減衰も考慮すると $O(\log N)$ で抑えられることが分かる．

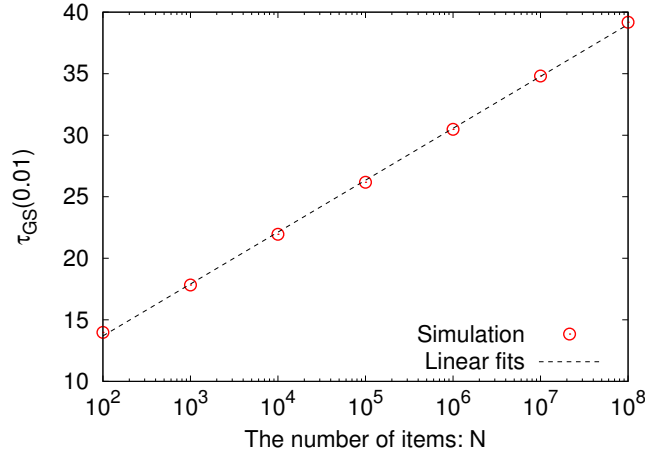


図 6.19: 線形スケジューリングで 99% の成功確率を得るために必要なアニーリング時間

6.9.3 数値計算による確認

これまでに計算してきた結果の妥当性を数値計算によって確認する．ここでは，4 次のルンゲ-クッタ法を用いて虚時間シュレーディンガー方程式を解き，QA-IT の $\tau_{\text{GS}}(\delta')$ と失敗確率を求めて，それぞれ式 (6.232) と (6.231) と比較する．

線形スケジューリングにおいて 99% の成功確率を得るために必要なアニーリング時間 $\tau_{\text{GS}}(\delta' = 0.01)$ を図 6.19 に示す．横軸は \log スケールとしてあるので，数値計算の結果も $\tau_{\text{GS}} \sim O(\log N)$ となっていることが分かる．線形近似によって $\tau_{\text{GS}}(0.01)$ の N 依存性を求めると

$$\tau_{\text{GS}}(0.01) = 1.83 \log N + 5.26, \quad (6.233)$$

が得られる．式 (6.232) では $\log N$ の係数が数値計算の結果に対して大きく見積もられていることが分かる．この原因として，基底状態の展開係数に対する不等式 (6.228) が緩いことが挙げられる．図 6.20 には，励起状態の展開係数の τ 依存性を $N = 10^2, 10^4, 10^6$ に対してプロットしてある．黒の実線は式 (6.215) であり，点線はそれぞれの N に対する長時間項を表している．短時間領域での展開係数は式 (6.215) とよく一致しており， N に依存しない速さで指数関数的に減少している．この結果を鑑みると， $\tau_{\text{GS}}(\delta')$ の係数の違いは基底状態の展開係数の見積もりが甘いことに起因していると考えられる．図 6.21 は，失敗確率の τ 依存性が示してある．実線は式 (6.231) を示しており，点線は長時間極限における失敗確率を表している．失敗確率が長時間極限に到達するまでの領域で，失敗確率は式 (6.231) とよく一致している．

断熱定理に基づくスケジューリングにおける $\tau_{\text{GS}}(\delta' = 0.01)$ の N 依存性を図 6.22 に示す．線形近似によって $\tau_{\text{GS}}(0.01)$ の N 依存性を求めると

$$\tau_{\text{GS}}(0.01) = 9.77 N^{0.50}, \quad (6.234)$$

が得られる．線形スケジューリングの場合と異なり，この結果は断熱的な時間発展を実現するためのアニーリング時間 τ_{th} とよく一致している．図 6.23 は断熱定理に基づくスケジューリングにおける失敗確率の τ 依存性を示している．実線は長時間極限における失敗

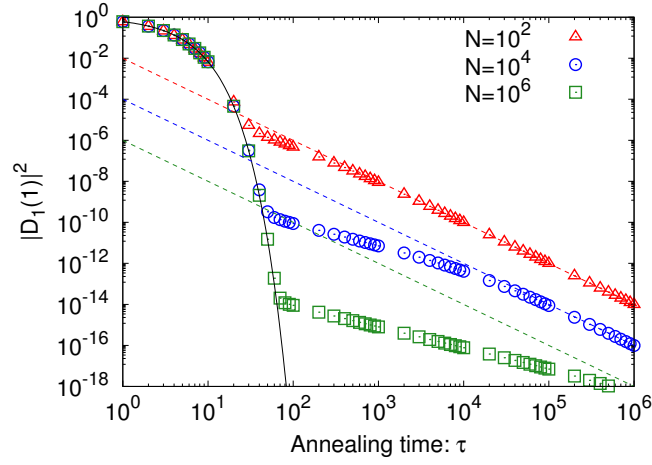


図 6.20: 第一励起状態の展開係数の τ 依存性

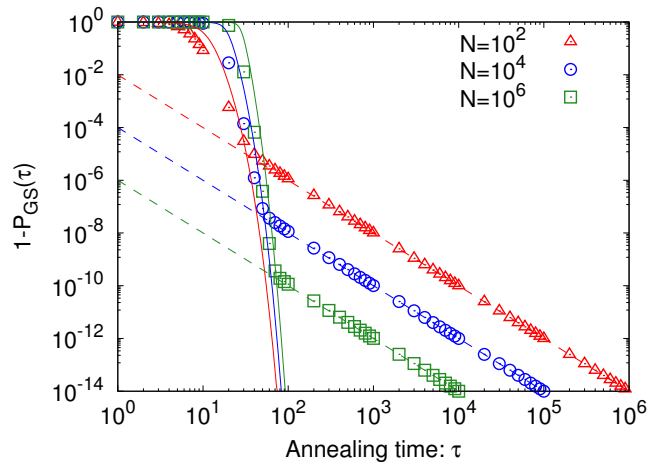


図 6.21: 線形スケジューリングにおける失敗確率の τ 依存性

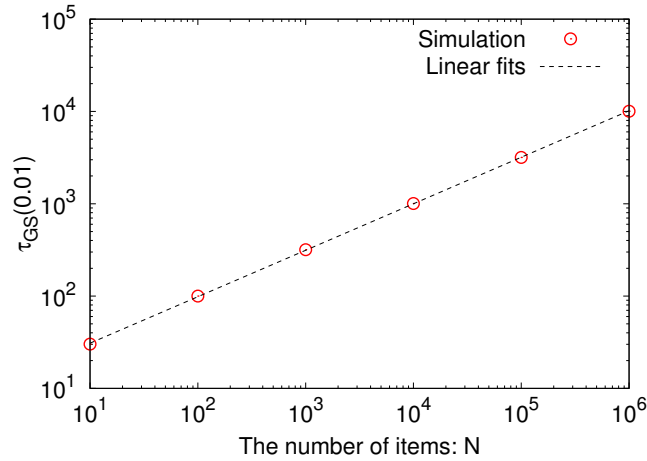


図 6.22: 断熱定理に基づくスケジューリングで 99% の成功確率を得るために必要なアニーリング時間

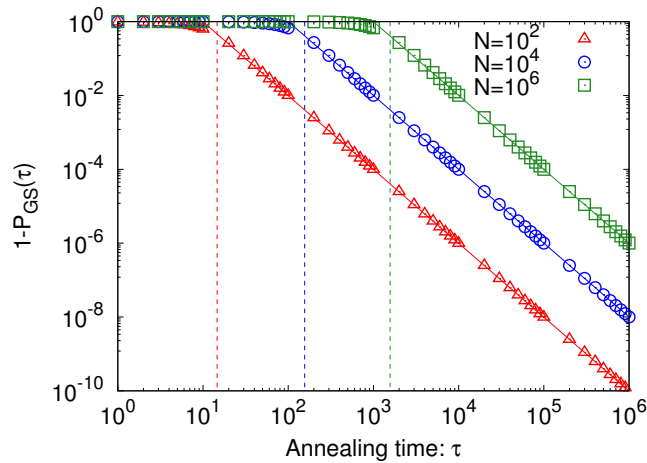


図 6.23: 断熱定理に基づくスケジューリングにおける失敗確率の τ 依存性

確率を表しており、点線は τ_{th} [式 (6.181) 参照] を表している。失敗確率の τ 依存性に関しても、断熱定理から求めた物理量のみを用いて説明できることが分かる。

以上より、線形スケジューリングでは τ_{th} よりも短いアニーリング時間で高い成功確率が得られるのに対して、断熱定理に基づくスケジューリングでは τ_{th} に基づいて必要なアニーリング時間が決まることが分かった。短時間領域における線形スケジューリングの性能は式 (6.231) でよく記述され、断熱定理の結果に基づいて数値計算の結果を説明することはできない。次節では、本節の結果をもとに QA-IT における効率的なスケジューリングについて考察する。

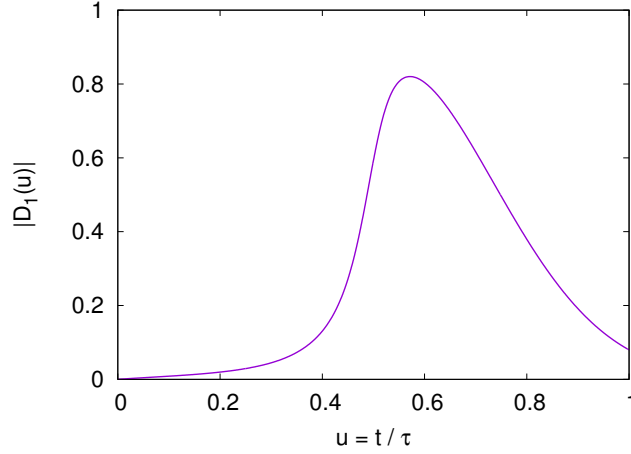


図 6.24: 線形スケジューリングにおける励起状態の展開係数の時間推移 ($N = 100, \tau = 10$)

6.10 QA-IT における効率的なスケジューリングの考察

グローバー問題の QA-IT では線形スケジューリングのアニーリング時間が $O(\log N)$ となり、断熱的な時間発展を仮定したアニーリング時間 $O(N)$ より小さくなることが解析計算と数値計算から明らかになった. $\tau_{GS}(0.01) \ll \tau_{th}$ という結果は、線形スケジューリングでは励起状態への遷移が発生したとしても高い成功確率を得られることを示している. その原因としては、QA-IT ではエネルギーギャップに依存して励起状態の展開係数が指数関数的に減衰することが挙げられる. これは虚時間シュレーディンガー方程式の時間発展に特有の現象である. $N = 100, \tau = 10$ における励起状態の展開係数の時間推移を示したのが図 6.24 である. $|AT_{\max}(u)|$ が最大となる $u = 1/2$ 付近で励起状態の展開係数が最大となった後、励起状態の展開係数が減少していることが分かる. これらの結果は、QA-IT では励起状態への遷移を防ぐことよりも、励起状態の展開係数の指数減衰を利用することに重きを置くべきであることを示している. 特に、グローバー問題のエネルギーギャップは最小値を取った後に再び増加するため (図 6.3 参照)、励起状態の展開係数の指数減衰を有効に利用することができる. 以上のことから、エネルギーギャップが最小となった後に再び増加する問題では、QA-IT の後半で ds/du を減少させるスケジューリングが効率的であると考えられる. 一方で、QA-IT が進むにつれてエネルギーギャップが減少していく問題では励起状態の指数減衰にはあまり期待できないため、励起状態への遷移を抑えるスケジューリングが有効であると予想される. この場合は、断熱定理に基づくスケジューリングが有効となり、基本的にエネルギーギャップが小さくなるにつれて ds/du を減少させていくことになる. 結局のところ、いずれの場合でも QA-IT が進むにつれて ds/du を小さくしていくスケジューリングが効率的になるという予想が立つ. また、SA のダイナミクスは虚時間シュレーディンガー方程式で記述されるので、温度スケジューリングも同様の考え方で設定するのが妥当と言える.

断熱定理に基づくスケジューリングでは、失敗確率の τ 依存性が断熱定理の結果と一致した. つまり、このスケジューリングでは励起状態の指数減衰を全く活用できていない. この理由としては、断熱定理に基づくスケジューリングではエネルギーギャップが大きい

領域で ds/du を大きくするため、指数減衰が発生する暇もなくエネルギーギャップが大きい領域を通過してしまうことが挙げられる．励起状態の指数減衰の利用を放棄するスケジューリングは、グローバール問題等のエネルギーギャップが再度増加する問題では非効率的である．

6.11 本章のまとめ

本章の前半では QA-RT における効率的なスケジューリングを検討し、後半では QA-IT における効率的なスケジューリングを検討した．QA-RT と QA-IT ではスケジューリングを設定する際の観点が異なっており、それぞれについて本節でまとめる．

QA-RT では、励起状態への遷移を防ぐスケジューリングを設定することで、高い成功確率を短いアニーリング時間で得られるようになる．本論文では断熱定理に基づくスケジューリングを提案し、断熱的な時間発展が実現され始める時間 $\tau_c(1)$ が $|AT_{\max}(s)|$ の平均値で与えられることを示した．線形スケジューリングの $\tau_c(1)$ は $|AT_{\max}(s)|$ の最大値で決まることから、断熱定理に基づくスケジューリングを用いることで、短いアニーリング時間で断熱的な時間発展を達成できる．ただし、エネルギーギャップが指数関数的に小さくなる問題では、断熱定理に基づくスケジューリングを採用したとしても $\tau_c(1)$ が多項式的な増加に抑えられる可能性は低い．グローバール問題と数分割問題では、以下の3つのスケジューリング:

- 線形スケジューリング
- 断熱定理に基づくスケジューリング
- 第一励起状態に基づくスケジューリング

における失敗確率の τ 依存性を確認し、断熱定理に基づくスケジューリングにおいて最も高い成功確率が得られることを確認した．先行研究 [102] では第一励起状態に基づくスケジューリングを提案しているが、 $\tilde{A}_{j0}(s)$ に含まれる行列要素の影響によって $|AT_{10}(s)|$ と $|AT_{\max}(s)|$ は必ずしも一致するとは限らない． $|AT_{10}(s)| \neq |AT_{\max}(s)|$ となる問題で第一励起状態に基づくスケジューリングを採用してしまうと、思わぬところで励起状態への遷移が発生して成功確率が低下してしまう危険性がある．実際に、数分割問題で第一励起状態に基づくスケジューリングを設定しても、線形スケジューリングに対して性能が改善されることはなかった．このことから、効率的なスケジューリングを設定するためには多くの励起状態の固有エネルギーと固有ベクトルの情報を事前に知っている必要がある．また、第一励起状態に基づくスケジューリングと断熱定理に基づくスケジューリングにおける $s(u)$ と失敗確率の評価結果（図 6.14 と 6.17 参照）から、成功確率はスケジューリングに対して非常に敏感であることが分かる．以上のことから、スケジューリングによる高速化を達成するためには以下の2つのハードル:

- $|AT_{\max}(s)|$ を事前に正確に知ること
- アニーリングマシン上で $s(u)$ を誤差なく設定すること

を越えなければならず、D-Wave マシン等の QA マシンを用いて一般的な問題を解く際に、スケジューリングを工夫して高速化するのは非常に難易度が高い。

QA-IT では、励起状態の展開係数の指数関数的な減衰を利用することを重視し、これが難しい場合には励起状態への遷移を防ぐスケジューリングを設定すれば良い。グローバー問題の線形スケジューリングの結果から分かるように、励起状態への遷移を防ぐことは高い成功確率を得るための十分条件であって、必要条件ではない。励起状態の指数減衰を有効に活用できるのはエネルギーギャップが最小になった後に再度広がる問題であり、このような問題では ds/du を徐々に小さくするスケジューリングが効率的となる。一方で、QA-IT が進むにつれてエネルギーギャップが小さくなる問題では励起状態の指数減衰に期待できないため、QA-RT と同様に断熱定理に基づくスケジューリングによって励起状態への遷移を抑えるのが良いと予想される。この場合も、基本的にはエネルギーギャップが閉じると共に ds/du を小さくする必要があるので、QA-IT が進むにつれて ds/du を下げていくことになる。結局のところ、QA-IT ではいずれの場合でも時間の経過とともに s をゆっくり下げていけば良いことが分かる。ただし、エネルギーギャップが単調減少する場合は、QA-RT と同様にスケジューリングの誤差に対する成功確率の感度が高くなると予想されるが、エネルギーギャップが再度広がる問題ではスケジューリングに対するシビアな調整をしなくてもある程度の成功確率が得られると考えられる。SA のダイナミクスは虚時間シュレーディンガー方程式に書き換えることができるため、QA-IT における効率的なスケジューリングの考え方は、SA で温度スケジューリングを工夫する際に活用できると期待される。

第7章 XX 量子揺らぎの導入による高速化

7.1 本章の概要

本章では、量子揺らぎを導入するハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_q$ を横磁場:

$$\hat{\mathcal{H}}_q = -\Gamma \sum_i \hat{\sigma}_i^z, \quad (7.1)$$

から変更してエネルギーギャップを広げることを考える。前章では断熱定理に基づくスケジューリングによる高速化を検討したが、エネルギーギャップが指数関数的に閉じる問題での効果は限定的であり、且つスケジューリングに要求される精度もシビアであった。しかしながら、 $\hat{\mathcal{H}}_q$ の工夫によってエネルギーギャップのシステムサイズ依存性を多項式的な減少に改善できれば、線形スケジューリングであったとしても $\tau_c(\delta)$ は多項式的な増加に抑えられる。また、揺らぎを導入する方法に自由度があるのは QA 特有の強みであり、SA では温度以外の方法で揺らぎを導入することはできない。この強みを用いて QA の性能改善を試みるのがここでの目的であり、 $\hat{\sigma}_i^x$ の 2 次項を含む $\hat{\mathcal{H}}_q$ の導入による QA の性能変化を調べる。

第 7.2 節では先行研究について説明し、第 7.3 節では鈴木-トロッター展開によって量子系を古典系の確率分布に対応させる方法を示す。第 7.4 節では $\{\hat{\sigma}_i^x\}$ の全結合相互作用を平均場理論で取り扱う方法を説明する。第 7.5 節と 7.6 節では、それぞれ 1 次元 Ising モデルと 1 次元 XY モデルに対して 2 次の全結合量子揺らぎ（本論文では、全結合 XX 相互作用と呼ぶ）を導入した時の QA 性能を解析的に調べる。第 7.7 節は本章のまとめにあてられる。

7.2 先行研究

QA の断熱定理によると、 $\tau_c(\delta)$ はエネルギーギャップの逆 2 乗に比例して増加するため、エネルギーギャップの最小値の N 依存性を評価できれば、アニーリング時間の増加が多項式的か指数関数的かを判断できる。しかしながら、エネルギーギャップを求めるためには一般的に $2^N \times 2^N$ の行列の対角化が必要であり、 N が大きい極限でのエネルギーギャップを評価するのは難しい。そこで、エネルギーギャップを直接求めるのを諦めて、QA の過程で発生する相転移の次数を調べてエネルギーギャップを間接的に評価するという戦略が広く利用されている。相転移の次数はエネルギーギャップの N 依存性と強い関連があることが知られており、例外的な事例 [113] が報告されているものの、2 次相転移ではエネルギーギャップの最小値が N に対して多項式的に減少するのに対して、1 次相転移では指数関数的に閉じることが多くの問題で確かめられている [114–116]。本章と次章では、統

計力学的な解析を用いて QA の過程で発生する相転移の次数を調べ、 $\hat{\mathcal{H}}_q$ の変更が QA 性能に与える影響を調べる。

横磁場以外の $\hat{\mathcal{H}}_q$ の導入によって、横磁場を用いた場合に対して指数関数的に高速化できる例を最初に示したのは先行研究 [117] である。この論文では p -spin モデル:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = -NJ \left(\frac{1}{N} \sum_i \hat{\sigma}_i^z \right)^p, \quad (7.2)$$

の QA を取り扱っている。ここで、 $J > 0$ であり、全てのスピン変数が同じ値になる自明な基底状態をもつ。 $\hat{\mathcal{H}}_q$ として横磁場を採用した場合は、横磁場を弱くしていくと 1 次相転移が発生し、エネルギーギャップが指数関数的に減少することが先行研究 [116] で示されている。これに対して、先行研究 [117] では横磁場に加えて反強磁性の全結合 XX 相互作用を導入した $\hat{\mathcal{H}}_q$:

$$\hat{\mathcal{H}}_q = -\Gamma_1 \sum_i \hat{\sigma}_i^x + N\Gamma_2 \left(\frac{1}{N} \sum_i \hat{\sigma}_i^x \right)^2, \quad (7.3)$$

を採用することで 1 次相転移を回避できることを発見した。ここで、 $\Gamma_1, \Gamma_2 > 0$ である。また、このようにして 1 次相転移を回避した場合に、エネルギーギャップが多項式的な減少に抑えられることが先行研究 [118] で確かめられている。その他に、ホップフィールドモデルでも同様の方法で 1 次相転移を回避できることが確認されており [119], XX 相互作用の導入による高速化を検討した研究は多く報告されている [120–122]。

本章では、 $\hat{\mathcal{H}}_q$ として横磁場を用いた場合に 2 次相転移が発生する問題に対して、強磁性と反強磁性の全結合 XX 相互作用を導入したことによる相転移の次数の変化を調べる。先行研究では主に 1 次相転移が発生する問題に対して反強磁性の全結合 XX 相互作用を適用しており、2 次相転移が発生する問題での QA の性能変化や強磁性の全結合 XX 相互作用の影響を解析的に調べた研究はなかった。第 7.5 節では 1 次元 Ising モデルに対して、第 7.6 節では 1 次元 XY モデルに対して全結合 XX 相互作用を導入する効果を調べる。以降は、 $\hat{\mathcal{H}}_q$ として横磁場を採用した QA を TMF-QA (TMF は Transverse Magnetic Field の頭文字) と呼び、反強磁性と強磁性の全結合 XX 相互作用を採用した QA をそれぞれ AF-QA と FM-QA と呼ぶことにする。

7.3 鈴木-トロッター展開と Non-stoquastic Hamiltonian

本節では、鈴木-トロッター展開 [123] によって d 次元の量子系のボルツマン分布を $d+1$ 次元の古典系のボルツマン分布として表現する方法を示し、Non-stoquastic Hamiltonian と呼ばれる古典的な確率解釈ができないハミルトニアンについて説明する。

ハミルトニアンが

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) + \hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x), \quad (7.4)$$

で与えられる量子系を考える。ここで、 $\hat{\sigma}^{z,x} \equiv \{\hat{\sigma}_1^{z,x}, \hat{\sigma}_2^{z,x}, \dots, \hat{\sigma}_N^{z,x}\}$ である。また、本節では QA に関連した式 (7.4) のハミルトニアンに限って話を進めるが、以降の話は一般的な量子系のハミルトニアンに適用可能である。この系の分配関数 Z は

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) - \beta \hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x)}, \quad (7.5)$$

である．ここで， Tr は任意の基底を用いた行列表示に対する対角和を表し， $\beta = 1/T$ は逆温度を表す．分配関数をこのままの形で求めるのは難しいので，鈴木-トロッター展開：

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = \lim_{K \rightarrow \infty} \left[\exp \left(\frac{1}{K} \hat{A} \right) \exp \left(\frac{1}{K} \hat{B} \right) \right]^K, \quad (7.6)$$

を用いて $\hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z)$ と $\hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x)$ に分解すると

$$Z = \text{Tr} \lim_{K \rightarrow \infty} \left[\exp \left(-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) \right) \exp \left(-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x) \right) \right]^K, \quad (7.7)$$

となる．さらに，完全性：

$$\sum_{\sigma^z} |\sigma^z\rangle \langle \sigma^z| = \hat{1}, \quad (7.8)$$

を $K-1$ 回挿入すると

$$Z = \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{\sigma_1^z} \cdots \sum_{\sigma_K^z} W(\sigma_{\text{all}}^z), \quad (7.9)$$

$$W(\sigma_{\text{all}}^z) \equiv \exp \left[-\frac{\beta}{K} \sum_{\kappa=1}^K \mathcal{H}_0(\sigma_{\kappa}^z) \right] \prod_{\kappa=1}^K \left\langle \sigma_{\kappa}^z \left| \exp \left(-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x) \right) \right| \sigma_{\kappa+1}^z \right\rangle, \quad (7.10)$$

となる．ここで， $\sigma_{\text{all}}^z \equiv \{\sigma_1^z, \dots, \sigma_K^z\}$ とおき，トロッター方向に周期境界条件 $|\sigma_{K+1}^z\rangle = |\sigma_1^z\rangle$ を課した．分配関数がボルツマン分布の規格化定数であることを考えると，式 (7.9) は σ_{all}^z が得られる確率が $W(\sigma_{\text{all}}^z)$ に比例すると解釈できる．このように解釈するならば $W(\sigma_{\text{all}}^z) > 0$ を満たさなければならないが， $\hat{\mathcal{H}}_q$ の選び方によって $W(\sigma_{\text{all}}^z) < 0$ となる場合が存在する（負符号問題）． $|\sigma^z\rangle$ や $|\sigma^x\rangle$ 等の単純な基底を用いた場合に $W(\sigma_{\text{all}}^z) < 0$ となる σ_{all}^z が存在するハミルトニアンは Non-stoquastic Hamiltonian と呼ばれ，上記のような古典的な確率解釈ができない．このことから，Non-stoquastic Hamiltonian を導入することで，QA 特有の高速化を達成できるのではないかという期待が湧いてくる．一方で， $W(\sigma_{\text{all}}^z) > 0$ の場合は有効ハミルトニアン $\mathcal{H}_{\text{eff}}(\sigma_{\text{all}}^z)$ ：

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}(\sigma_{\text{all}}^z) = \frac{1}{K} \sum_{\kappa=1}^K \mathcal{H}_0(\sigma_{\kappa}^z) - \frac{1}{\beta} \sum_{\kappa=1}^K \log \left\langle \sigma_{\kappa}^z \left| \exp \left(-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x) \right) \right| \sigma_{\kappa+1}^z \right\rangle, \quad (7.11)$$

に対してモンテカルロ法を適用することで，量子系の物理量のボルツマン分布に対する平均値を計算することができる．この方法は量子モンテカルロ法と呼ばれている． $\mathcal{H}_{\text{eff}}(\sigma_{\text{all}}^z)$ は σ_{all}^z の関数なので古典系のハミルトニアンであり，トロッター方向に完全性を挿入したことに起因して元の系に対して次元が 1 つ増えている．

本章で検討する QA のハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) + \hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x), \quad (7.12)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_q = -\Gamma_1 \sum_i \hat{\sigma}_i^x - N\Gamma_2 \left(\frac{1}{N} \sum_i \hat{\sigma}_i^x \right)^2, \quad (7.13)$$

であり，AF-QA のハミルトニアン ($\Gamma_1 > 0, \Gamma_2 < 0$) は Non-stoquastic であり，FM-QA のハミルトニアン ($\Gamma_1 > 0, \Gamma_2 > 0$) は Stoquastic であることが知られている（付録 C 参照）．

7.4 全結合 XX 相互作用の平均場理論による取り扱い

前節で説明したように AF-QA のハミルトニアンは Non-stoquastic であるが，全結合の XX 相互作用に関しては鈴木-トロッター展開と平均場理論を組み合わせることで量子モンテカルロ法を適用できるようになることが先行研究 [124] で示されている．ここで提案されている方法は次節以降で利用するので，本節で簡単に説明しておく．

先行研究 [124] の方法で取り扱い可能なハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0(\boldsymbol{\sigma}^z) + \hat{\mathcal{H}}_q(\hat{m}_x), \quad (7.14)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_q(\hat{m}_x) = N \hat{h}_q(\hat{m}_x), \quad (7.15)$$

$$\hat{m}_x \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^x, \quad (7.16)$$

である．ここで， $\hat{h}_q(\hat{m}_x)$ は \hat{m}_x に依存する任意の関数である．分配関数 Z は

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_0(\boldsymbol{\sigma}^z) - \beta \hat{\mathcal{H}}_q(\hat{m}_x)}, \quad (7.17)$$

で与えられ，鈴木-トロッター展開を適用した後に完全性:

$$\sum_{\boldsymbol{\sigma}^x} |\boldsymbol{\sigma}^x\rangle \langle \boldsymbol{\sigma}^x| = \hat{1}, \quad (7.18)$$

を $K-1$ 回挿入すると

$$Z = \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{\boldsymbol{\sigma}_1^x} \cdots \sum_{\boldsymbol{\sigma}_K^x} \exp \left[-\frac{\beta N}{K} \sum_{\kappa=1}^K h_q \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^x(\kappa) \right) \right] \\ \times \prod_{\kappa=1}^K \left\langle \boldsymbol{\sigma}_\kappa^x \left| \exp \left[-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\boldsymbol{\sigma}}^z) \right] \right| \boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^x \right\rangle, \quad (7.19)$$

となる．ここで， $\boldsymbol{\sigma}_\kappa^x \equiv \{\sigma_1^x(\kappa), \sigma_2^x(\kappa), \dots, \sigma_N^x(\kappa)\}$ とした．また， h_q に関する項はディラックの δ 関数とそのフーリエ変換:

$$h_q(x) = \int dy \delta(y-x) h_q(y), \quad (7.20)$$

$$\delta(y-x) = \int \frac{d\lambda}{2\pi} e^{-\lambda(y-x)}, \quad (7.21)$$

を用いると，

$$\exp \left[-\frac{\beta N}{K} h_q \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^x(\kappa) \right) \right] \\ \propto \int dm_x(\kappa) \exp \left[-\frac{\beta N}{K} h_q(m_x(\kappa)) \right] \delta \left(\frac{\beta N}{K} m_x(\kappa) - \frac{\beta}{K} \sum_{i=1}^N \sigma_i^x(\kappa) \right) \\ \propto \int dm_x(\kappa) d\lambda_x(\kappa) \exp \left[-\frac{\beta N}{K} \left(h_q(m_x(\kappa)) + \lambda_x(\kappa) m_x(\kappa) - \frac{\lambda_x(\kappa)}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^x(\kappa) \right) \right], \quad (7.22)$$

と変形できる．これを式 (7.19) に代入し， $\sigma_i^x(\kappa)$ に関する項をブラケットの中に戻すと

$$\begin{aligned}
Z &\propto \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{\sigma_1^x} \cdots \sum_{\sigma_K^x} \int \prod_{\kappa=1}^K dm_x(\kappa) \int \prod_{\kappa=1}^K d\lambda_x(\kappa) \\
&\times \exp \left[-\frac{\beta N}{K} \sum_{\kappa=1}^K (h_q(m_x(\kappa)) + \lambda_x(\kappa) m_x(\kappa)) \right] \\
&\times \prod_{\kappa=1}^K \left\langle \sigma_{\kappa}^x \left| \exp \left[-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) \right] \exp \left[\frac{\beta}{K} \lambda_x(\kappa) \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^x \right] \right| \sigma_{\kappa+1}^x \right\rangle, \quad (7.23)
\end{aligned}$$

となる．さらに，完全性 [式 (7.18)] を逆方向に適用すると

$$\begin{aligned}
Z &\propto \lim_{K \rightarrow \infty} \int \prod_{\kappa=1}^K dm_x(\kappa) \int \prod_{\kappa=1}^K d\lambda_x(\kappa) \exp \left[-\frac{\beta N}{K} \sum_{\kappa=1}^K (h_q(m_x(\kappa)) + \lambda_x(\kappa) m_x(\kappa)) \right] \\
&\times \text{Tr} \left(\prod_{\kappa=1}^K \exp \left[-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) \right] \exp \left[\frac{\beta}{K} \lambda_x(\kappa) \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^x \right] \right), \quad (7.24)
\end{aligned}$$

と変形できる．ここで，静的近似:

$$m_x \equiv m_x(\kappa), \quad (7.25)$$

$$\lambda_x \equiv \lambda_x(\kappa), \quad (7.26)$$

を仮定すると

$$\begin{aligned}
Z &\propto \int dm_x \int d\lambda_x e^{-\beta N (h_q(m_x) + \lambda_x m_x)} \\
&\times \text{Tr} \lim_{K \rightarrow \infty} \left(\exp \left[-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) \right] \exp \left[\frac{\beta}{K} \lambda_x \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^x \right] \right)^K, \quad (7.27)
\end{aligned}$$

と変形でき，鈴木-トロッター展開を逆方向に適用すると

$$Z \propto \int dm_x \int d\lambda_x e^{-\beta N (h_q(m_x) + \lambda_x m_x)} \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}(\hat{\sigma}^z, \hat{\sigma}^x, \lambda_x)}, \quad (7.28)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}(\hat{\sigma}^z, \hat{\sigma}^x, \lambda_x) \equiv \hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) - \lambda_x \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^x, \quad (7.29)$$

が得られる．熱力学的極限 $N \rightarrow \infty$ では積分を鞍点法により評価することができる． λ_x の積分を実行し，鞍点条件:

$$\lambda_x = -\frac{dh_q(m_x)}{dm_x} \equiv -h'_q(m_x), \quad (7.30)$$

を式 (7.28) と (7.29) に代入すると

$$Z \propto \int dm_x e^{-\beta N f(m_x)}, \quad (7.31)$$

$$f(m_x) = h_q(m_x) - m_x h'_q(m_x) - \frac{1}{\beta N} \log Z_{\text{eff}}(m_x), \quad (7.32)$$

$$Z_{\text{eff}}(m_x) \equiv \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}(\hat{\sigma}^z, \hat{\sigma}^x, m_x)}, \quad (7.33)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}(\hat{\sigma}^z, \hat{\sigma}^x, m_x) = \hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) + h'_q(m_x) \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^x, \quad (7.34)$$

が得られる． m_x は自由エネルギー [式 (7.32)] の鞍点条件:

$$m_x = \langle \hat{m}_x \rangle_{\text{eff}}, \quad (7.35)$$

$$\langle \hat{m}_x \rangle_{\text{eff}} \equiv \frac{1}{Z_{\text{eff}}(m_x)} \text{Tr} \left[\hat{m}_x e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}(\hat{\sigma}^z, \hat{\sigma}^x, m_x)} \right], \quad (7.36)$$

を満たすように決めればよい．鞍点方程式を解くためには有効ハミルトニアン [式 (7.34)] のもとで \hat{m}_x の平均値を求める必要があるが， $\hat{\mathcal{H}}_{\text{eff}}(\hat{\sigma}^z, \hat{\sigma}^x, m_x)$ は横磁場しか含んでいないので量子モンテカルロ法を用いて求めることができる．また，式 (7.32) から (7.34) は， $\hat{\mathcal{H}}_0$ に横磁場を印加した場合の分配関数を計算できれば，式 (7.15) の $\hat{\mathcal{H}}_q(\hat{m}_x)$ を導入した場合の自由エネルギーも計算可能であることを示している．

7.5 1次元 Ising モデルの場合

前節で説明した方法を用いて，1次元強磁性 Ising モデルに対して強磁性と反強磁性の全結合 XX 相互作用を導入した場合の相図を解析的に調べる．

本節で取り扱うハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) = -J \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_{i+1}^z, \quad (7.37)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_q(\hat{m}_x) = N \hat{h}_q(\hat{m}_x), \quad (7.38)$$

$$\hat{h}_q(\hat{m}_x) = -\Gamma_1 \hat{m}_x - \frac{1}{2} \Gamma_2 \hat{m}_x^2, \quad (7.39)$$

である．ここで， $\Gamma_1 > 0$ は横磁場の強さを表し， $\Gamma_2 > 0 (\Gamma_2 < 0)$ は強磁性（反強磁性）の全結合 XX 相互作用の強さを表す．

7.5.1 自由エネルギーと鞍点方程式

前節で求めた有効ハミルトニアンの分配関数 Z_{eff} [式 (7.33)] は，1次元強磁性 Ising モデルに横磁場を印加した場合の分配関数であり，

$$\log Z_{\text{eff}}(m_x) = \frac{N}{\pi} \int_0^\pi dq \log \left(2 \cosh \beta \sqrt{1 + h'_q(m_x)^2 + 2 h'_q(m_x) \cos q} \right), \quad (7.40)$$

$$h'_q(m_x) = -\Gamma_1 - \Gamma_2 m_x, \quad (7.41)$$

で与えられる [125] (付録 D.1 参照). ここで, 簡単のため $J = 1$ とした. 式 (7.40) を式 (7.32) に代入すると, $\beta \rightarrow \infty$ における自由エネルギーは

$$f(m_x) = h_q(m_x) - m_x h'_q(m_x) - 2 \frac{1 - h'_q(m_x)}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\omega \sqrt{1 + \frac{4h'_q(m_x)}{[1 - h'_q(m_x)]^2} \sin^2 \omega}, \quad (7.42)$$

と求まり, 鞍点方程式として

$$m_x = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\omega \frac{1 - \frac{2}{1 - h'_q(m_x)} \sin^2 \omega}{\sqrt{1 + \frac{4h'_q(m_x)}{[1 - h'_q(m_x)]^2} \sin^2 \omega}}, \quad (7.43)$$

が得られる. 式 (7.42) の第三項は第二種の完全楕円積分であり, 自由エネルギーに特異性が発生し得るのは $h'_q(m_x) = -1$ のみである. $h'_q(m_x) = -1$ 付近における自由エネルギーの h'_q に対する依存性を調べるため,

$$h'_q \equiv -1 + \Delta h'_q, \quad (7.44)$$

とにおいて, 自由エネルギーを $\Delta h'_q$ の関数と見なすと

$$\tilde{f}(\Delta h'_q) \sim (\Delta h'_q)^2 \log |\Delta h'_q|, \quad (7.45)$$

となる. また, $h'_q(m_x) = -1$ のときに

$$m_x = \frac{2}{\pi}, \quad (7.46)$$

となることも式 (7.43) から分かる.

7.5.2 横磁場のみを印加した場合: $\Gamma_2 = 0$

この場合は $h'_q(m_x) = -\Gamma_1$ であり, 式 (7.43) より m_x は

$$m_x = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\omega \frac{1 - \frac{2}{1 + \Gamma_1} \sin^2 \omega}{\sqrt{1 - \frac{4\Gamma_1}{[1 + \Gamma_1]^2} \sin^2 \omega}}, \quad (7.47)$$

と求まる. また, $\Gamma_1 = 1 + \Delta\Gamma_1$ とおくと, $\Gamma_1 = 1$ 付近の自由エネルギーは

$$\tilde{f} \sim -(\Delta\Gamma_1)^2 \log |\Delta\Gamma_1|, \quad (7.48)$$

となり, 自由エネルギーの 2 階微分は

$$\frac{d^2 \tilde{f}}{d\Gamma_1^2} \sim \frac{dm_x}{d\Gamma_1} \sim \log |\Delta\Gamma_1|, \quad (7.49)$$

と得られる. 以上より, 横磁場のみを印加した場合は $\Gamma_1 = 1$ で 2 次相転移が発生することが分かる. 図 7.1 は m_x の Γ_1 依存性を表しており, 第二種完全楕円積分の特異性に起因して $\Gamma_1 = 1$ における傾きは無限大となる.

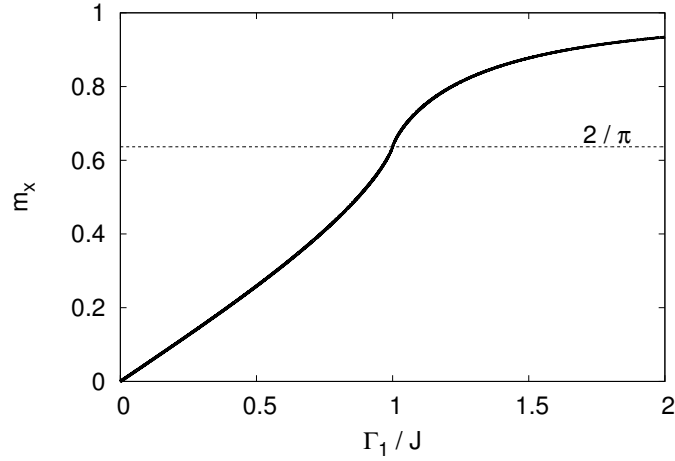


図 7.1: TMF-QA における m_x の Γ_1 依存性

7.5.3 反強磁性相互作用を印加した場合: $\Gamma_2 < 0$

式 (7.41) を用いて鞍点方程式 (7.43) の右辺から m_x を消去すると

$$h'_q = -\Gamma_2 S_R(h'_q) - \Gamma_1, \quad (7.50)$$

$$S_R(h'_q) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\omega \frac{1 - \frac{2}{1-h'_q} \sin^2 \omega}{\sqrt{1 + \frac{4h'_q}{(1-h'_q)^2} \sin^2 \omega}}. \quad (7.51)$$

となる．この鞍点方程式は， Γ_1 と Γ_2 が与えられたときに h'_q を決定する方程式と見なすことができる．式 (7.50) の左辺と右辺を h'_q の関数として図示したのが図 7.2 である．右辺の関数は $h'_q = 0$ で $-\Gamma_1$ となっており， Γ_2 を固定して Γ_1 を減少させていくと鞍点方程式を満たす m_x が小さくなっていくことが分かる．また，式 (7.46) を式 (7.41) に代入すると， $h'_q = -1$ となるのは

$$\Gamma_1 = -\frac{2\Gamma_2}{\pi} + 1, \quad (7.52)$$

のときであることが分かる．このときの鞍点方程式 (7.50) の左辺と右辺を h'_q の関数として示したのが図 7.3 である．右辺の関数の傾きは第二種完全楕円積分の特異性に起因して $h'_q = -1$ で $-\infty$ となっており，図 7.3 の状況から Γ_2 を固定して Γ_1 を変化させたときの h'_q の変化量: $\Delta h'_q$ は

$$\Delta h'_q = 0, \quad (7.53)$$

になる． $h'_q = -1$ 付近での Γ_1 の変化に対する m_x の応答を調べるため，

$$h'_q = -1 + \Delta h'_q, \quad (7.54)$$

$$\Gamma_1 = -\frac{2\Gamma_2}{\pi} + 1 + \Delta\Gamma_1, \quad (7.55)$$

$$m_x = \frac{2}{\pi} + \Delta m_x, \quad (7.56)$$

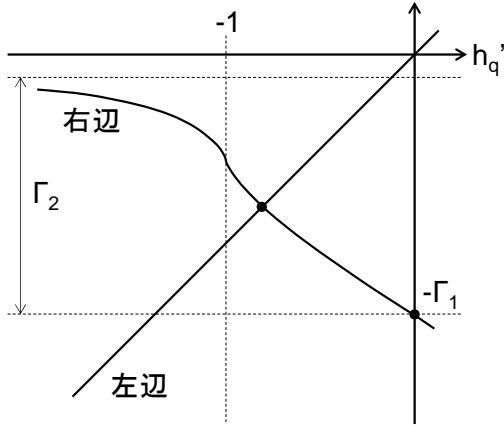


図 7.2: $\Gamma_1 < -\frac{2\Gamma_2}{\pi} + 1$ での鞍点方程式

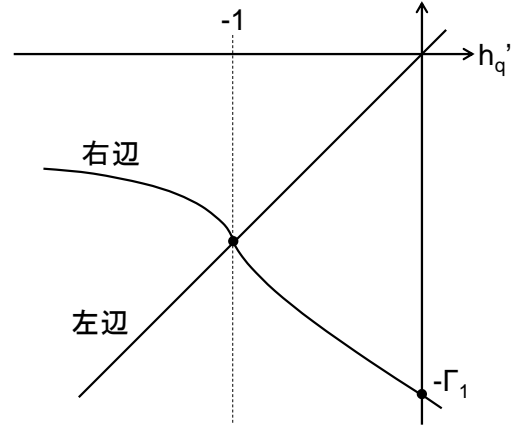


図 7.3: $\Gamma_1 = -\frac{2\Gamma_2}{\pi} + 1$ での鞍点方程式

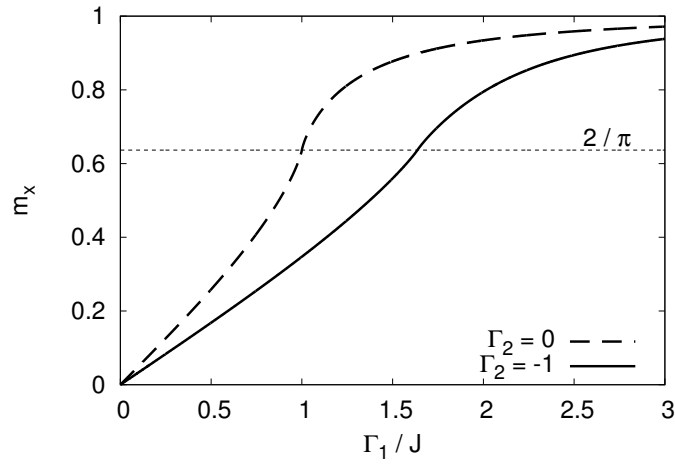


図 7.4: AF-QA における m_x の Γ_1 依存性

とおき、式 (7.53) と合わせて式 (7.41) に代入すると

$$\Delta m_x = -\frac{1}{\Gamma_2} \Delta \Gamma_1, \quad (7.57)$$

が得られる。この結果は、反強磁性の全結合 XX 相互作用の導入によって、 $m_x = 2/\pi$ における $dm_x/d\Gamma_1$ の特異性が消えることを示しており、TMF-QA で発生する 2 次相転移を回避できることを意味している。 $\Gamma_2 = 0, -1$ における m_x の Γ_1 依存性を図 7.4 に示す。反強磁性 XX 相互作用を追加することで $m_x = 2/\pi$ となる Γ_1 が大きくなっており、 m_x の傾きも緩やかになっていることが分かる。

7.5.4 強磁性相互作用を印加した場合: $\Gamma_2 > 0$

$\Gamma_2 > 0$ としたときの鞍点方程式 (7.50) の左辺と右辺の関数を図示したのが図 7.5 である。反強磁性 XX 相互作用を追加した場合と同様に右辺の関数は $h'_q = 0$ で $-\Gamma_1$ となっており、 Γ_2 を固定して Γ_1 を減少させていくと鞍点方程式を満たす m_x が小さくなる。一方

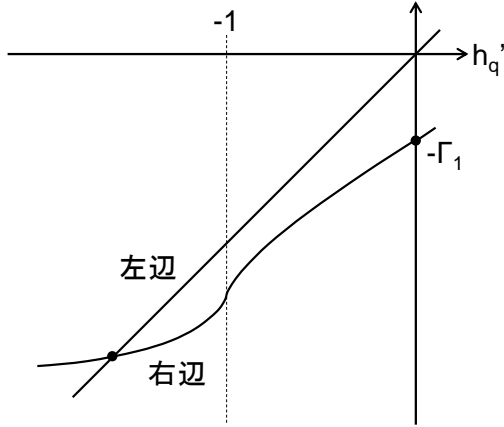


図 7.5: $\Gamma_1 < -\frac{2\Gamma_2}{\pi} + 1$ での鞍点方程式

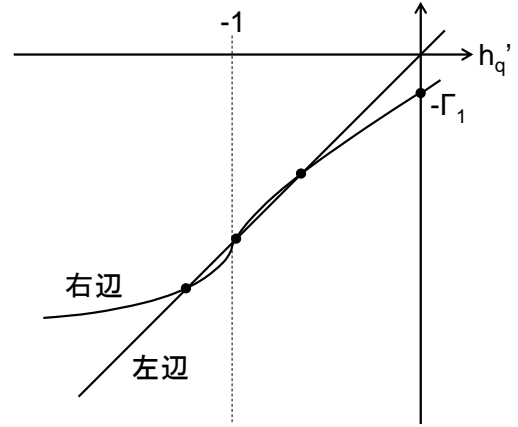


図 7.6: $\Gamma_1 = -\frac{2\Gamma_2}{\pi} + 1$ での鞍点方程式

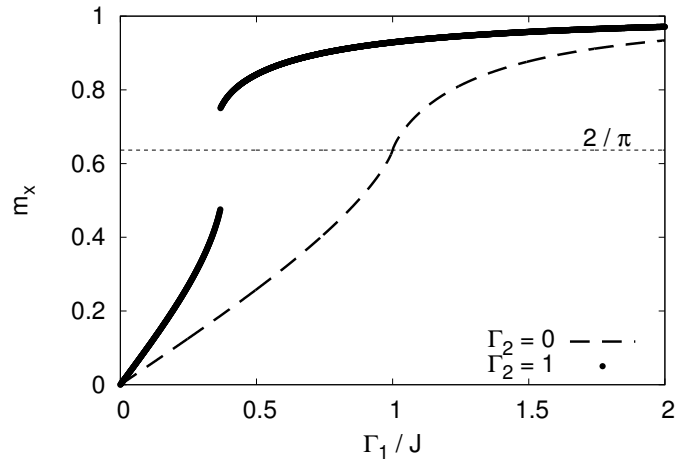


図 7.7: FM-QA における m_x の Γ_1 依存性

で、 Γ_2 の正負が反転したことで、右辺の関数形が上下反転していることが分かる。さらに、右辺の関数の傾きは第二種完全楕円積分の特異性に起因して $h'_q = -1$ で ∞ となる。これらのことを考慮すると、図 7.5 の状況で Γ_1 を減少させていくと鞍点方程式が 3 つの解をもつようになることが分かる（図 7.6 参照）。この結果として m_x は不連続に変化するようになり、強磁性 XX 相互作用を導入することで 1 次相転移が発生することが分かる。 $\Gamma_2 = 0, 1$ における m_x の Γ_1 依存性を図 7.7 に示す。 m_x は $2/\pi$ を挟んで不連続に変化しており、1 次相転移が発生していることが分かる。

$\Gamma_2 > 0$ の場合に $h'_q = -1$ が安定な解になり得ないことは、式 (7.57) から正当化される。もし $h'_q = -1$ が安定解になっていると仮定すると、 Γ_1 を減少させると m_x が増加するという非物理的な結果が式 (7.57) から導かれてしまう。このことから、強磁性の全結合 XX 相互作用を導入した場合は $m_x = 2/\pi$ は安定な解になり得ず、 $m_x = 2/\pi$ を挟んで不連続な変化が発生することが示される。この結果から、TMF-QA ($\Gamma_2 = 0$) の $\tau_c(\delta)$ は N に対して多項式的に増加するのに対して、FM-QA ($\Gamma_2 > 0$) では指数関数的に増加すると考えられ、強磁性の全結合 XX 相互作用の導入によって QA 性能が悪化すると予想される。

強磁性と反強磁性の全結合 XX 相互作用を導入したときの相図を図 7.8 に示す。 $\Gamma_2 = 0$

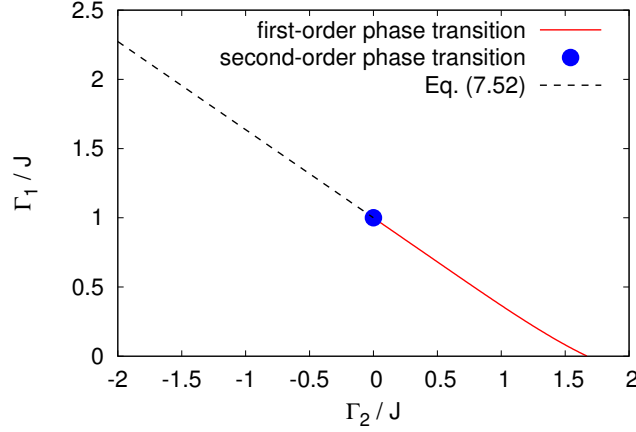


図 7.8: 1 次元強磁性 Ising モデルに強磁性と反強磁性の全結合 XX 相互作用を導入したときの相図

では 2 次相転移が発生し, $\Gamma_2 > 0$ では 1 次相転移が発生するが, $\Gamma_2 < 0$ では相転移は発生しない.

7.6 1 次元 XY モデルの場合

次に, 1 次元 XY モデルに対して強磁性と反強磁性の全結合 XX 相互作用を導入した場合の相転移を解析的に調べる.

本節で取り扱うハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^y) = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^N (\hat{\sigma}_i^x \hat{\sigma}_{i+1}^x + \hat{\sigma}_i^y \hat{\sigma}_{i+1}^y), \quad (7.58)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_q(\hat{m}_z) = N \hat{h}_q(\hat{m}_z), \quad (7.59)$$

$$\hat{h}_q(\hat{m}_z) = -\Gamma_1 \hat{m}_z - \frac{1}{2} \Gamma_2 \hat{m}_z^2, \quad (7.60)$$

である. ここで, $\Gamma_1 > 0$ は横磁場の強さを表し, $\Gamma_2 > 0 (\Gamma_2 < 0)$ は強磁性 (反強磁性) の全結合 XX 相互作用の強さを表す. 本節では \hat{m}_z を用いて量子揺らぎを導入するが, 以降でも \hat{m}_z の 2 次の項は全結合 XX 相互作用と呼ぶことにする.

7.6.1 自由エネルギーと鞍点方程式

7.4 節の式 (7.33), (7.33), (7.33) を用いて自由エネルギーを計算し, 鞍点方程式を求める. 有効ハミルトニアンの分配関数 Z_{eff} [式 (7.33)] は, 1 次元 XY モデルに横磁場を印加した場合の分配関数であり,

$$\ln Z_{\text{eff}} = \beta N h'_q(m_z) + \frac{N}{\pi} \int_0^\pi dq \log \left[1 + e^{2\beta(\cos q - h'_q(m_z))} \right], \quad (7.61)$$

$$h'_q(m_z) = -\Gamma_1 - \Gamma_2 m_z, \quad (7.62)$$

で与えられる [126] (付録 D.2) . ここで, 簡単のため $J = 1$ とした. 式 (7.61) を式 (7.32) に代入すると, 自由エネルギーとして

$$f(m_z) = h_q(m_z) - m_z h'_q(m_z) - h'_q(m_z) - \frac{1}{\pi\beta} \int_0^\pi dq \log \left[1 + e^{2\beta(\cos q - h'_q(m_z))} \right], \quad (7.63)$$

が得られる. $\beta \rightarrow \infty$ では $\cos q - h'_q(m_z) > 0$ を満たす q のみが積分に寄与するので

$$f(m_z) = h_q(m_z) - m_z h'_q(m_z) - h'_q(m_z) - \frac{2}{\pi} \int_0^\pi dq (\cos q - h'_q(m_z)) \theta(\cos q - h'_q(m_z)), \quad (7.64)$$

となる. ここで,

$$\theta(x) \equiv \begin{cases} 1 & x > 0, \\ 0 & x < 0, \end{cases} \quad (7.65)$$

である. 式 (7.62) を式 (7.64) に代入すると, 自由エネルギーと鞍点方程式として以下を得る (上段: 自由エネルギー, 下段: 鞍点方程式) .

- 領域 I: $\Gamma_1 + \Gamma_2 m_z > +1$

$$f(m_z) = \frac{1}{2}\Gamma_2(m_z - 1)^2 - \Gamma_1 - \frac{1}{2}\Gamma_2, \quad (7.66)$$

$$m_z = +1, \quad (7.67)$$

- 領域 II: $-1 < \Gamma_1 + \Gamma_2 m_z < +1$

$$f(m_z) = \frac{1}{2}\Gamma_2(m_z + 1)^2 + \Gamma_1 - \frac{1}{2}\Gamma_2 - \frac{2}{\pi} \sqrt{1 - (\Gamma_1 + \Gamma_2 m_z)^2} - \frac{2}{\pi} (\Gamma_1 + \Gamma_2 m_z) \arccos(-\Gamma_1 - \Gamma_2 m_z), \quad (7.68)$$

$$m_z = \frac{1}{\Gamma_2} \sin\left(\frac{\pi m_z}{2}\right) - \frac{\Gamma_1}{\Gamma_2}, \quad (7.69)$$

- 領域 III: $\Gamma_1 + \Gamma_2 m_z < -1$

$$f(m_z) = \frac{1}{2}\Gamma_2(m_z + 1)^2 + \Gamma_1 - \frac{1}{2}\Gamma_2, \quad (7.70)$$

$$m_z = -1, \quad (7.71)$$

7.6.2 反強磁性相互作用を印加した場合: $\Gamma_2 < 0$

領域 I の鞍点方程式 (7.67) より, $\Gamma_1 > 1 - \Gamma_2$ では $m_z = 1$ となる.

領域 II の鞍点方程式 (7.69) の右辺と左辺の関数を図示したのが図 7.9 である. 右辺の関数は $m_z = 0$ で $\Gamma_1/|\Gamma_2|$ となり, Γ_2 を固定して Γ_1 を減少させると鞍点方程式を満たす m_z も小さくなる. Γ_1 を領域 I から減少させていくと, 領域 II の鞍点方程式 (7.69) は $\Gamma_1 = 1 - \Gamma_2$ で $m_z = 1$ の解をもつ (図 7.10 参照). 領域 II の鞍点方程式が解をもち始

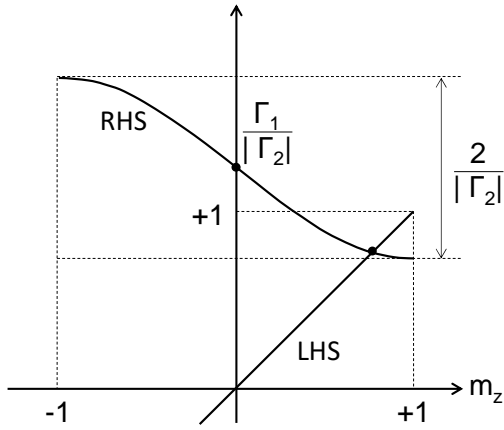


図 7.9: $\Gamma_1 < 1 - \Gamma_2$ における鞍点方程式

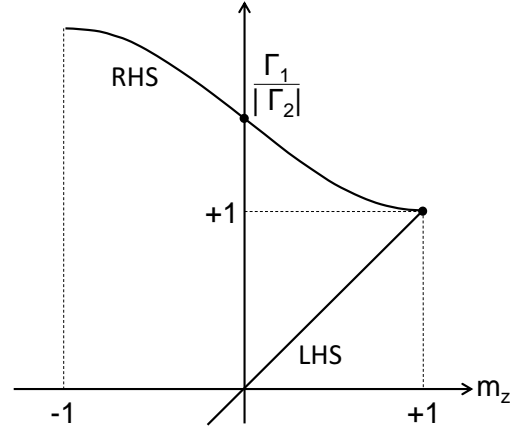


図 7.10: $\Gamma_1 = 1 - \Gamma_2$ における鞍点方程式

める Γ_1 と、領域 I の鞍点方程式が解をもたなくなる Γ_1 は一致しており、境界領域において $m_z = 1$ となることが分かる。この結果は、領域 I から領域 II への移り変わりにおいて m_z が連続的に変化し、 $\Gamma_1 = 1 - \Gamma_2$ で 2 次相転移が発生することを示している。領域 II に移った後は、 m_z は明らかに Γ_1 の減少に対して連続的に変化する（図 7.9 参照）。

相転移点近傍の m_z の振る舞いを調べるため

$$m_z \equiv 1 - \Delta m_z, \quad (7.72)$$

$$\Gamma_1 \equiv 1 - \Gamma_2 - \Delta_1, \quad (7.73)$$

とおき、式 (7.69) に代入すると

$$\Delta m_z = -\frac{1}{\Gamma_2} \Delta \Gamma_1, \quad (7.74)$$

が得られる。この結果から、反強磁性の全結合 XX 相互作用を導入しても臨界指数は変化しないが、臨界振幅が減少することが分かる。ただし、XY モデルでは領域 I で $dm_z/d\Gamma_1 = 0$ となっているので、前節の Ising モデルと異なり 2 次相転移が消えることはない。 $\Gamma_2 = 0, -1$ における m_z の Γ_1 依存性を図 7.11 に示す。1 次元強磁性 Ising モデルの場合と同様に、反強磁性 XX 相互作用を追加すると 2 次相転移が発生する Γ_1 が大きくなり、領域 II における m_z の傾きが小さくなっている。

7.6.3 強磁性相互作用を印加した場合: $\Gamma_2 > 0$

領域 I の鞍点方程式 (7.67) より、 $\Gamma_1 > 1 - \Gamma_2$ では $m_z = 1$ が自由エネルギーを最小化する解の候補となる。

領域 II の鞍点方程式 (7.69) の右辺と左辺の関数を図示したのが図 7.12 である。右辺の関数は $m_z = 0$ で $-\Gamma_1/\Gamma_2$ となり、 Γ_2 を固定して Γ_1 を減少させると鞍点方程式を満たす m_z も小さくなる。また、 Γ_2 の正負が反転したことで右辺の関数形は図 7.9 に対して上下

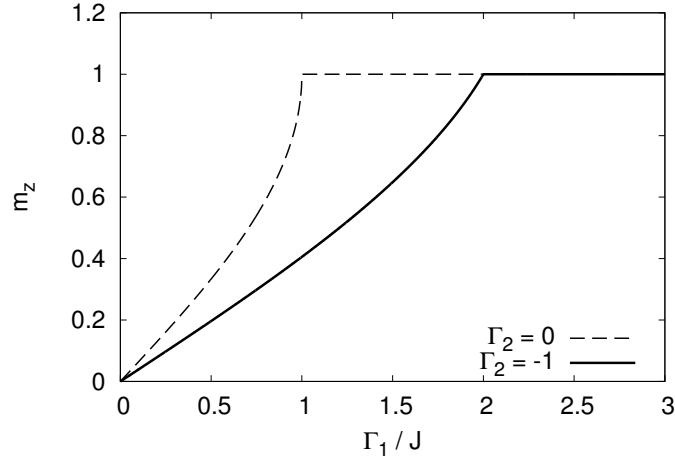


図 7.11: AF-QA における m_z の Γ_1 依存性

反転している． Γ_1 を減少させていったときに， Γ_1 が以下の不等式:

$$\Gamma_1 \leq \Gamma_1^{(\text{UB})} \equiv \sqrt{1 - \left(\frac{2\Gamma_2}{\pi}\right)^2} - \Gamma_2 \left[1 - \frac{2}{\pi} \arcsin\left(\frac{2\Gamma_2}{\pi}\right)\right], \quad (7.75)$$

を満たすと領域 II の鞍点方程式は解をもつようになる（図 7.13 参照）． $\Gamma_1^{(\text{UB})}$ は領域 I の鞍点方程式が解をもたなくなる境界 ($\Gamma_1 = 1 - \Gamma_2$) と一致していないため，

$$\Gamma_1^{(\text{LB})} \leq \Gamma_1 \leq \Gamma_1^{(\text{UB})}, \quad (7.76)$$

$$\Gamma_1^{(\text{LB})} \equiv 1 - \Gamma_2, \quad (7.77)$$

において領域 I と領域 II の鞍点方程式が同時に解をもつことになる． $\Gamma_1 = \Gamma_1^{(\text{UB})}$ における領域 II の鞍点方程式の解は

$$m_z = 1 - \Delta m_z^{(\text{XY})}, \quad (7.78)$$

$$\Delta m_z^{(\text{XY})} = \frac{2}{\pi} \arcsin\left(\frac{2\Gamma_2}{\pi}\right), \quad (7.79)$$

であり，領域 I から領域 II への切り替わりにおいて m_z には少なくとも $\Delta m_z^{(\text{XY})}$ の不連続な飛びが発生する．これは， $\Gamma_1^{(\text{LB})} \leq \Gamma_1 \leq \Gamma_1^{(\text{UB})}$ の範囲内で 1 次相転移が発生することを示している． $\Gamma_2 = 0, 0.5$ における m_z の Γ_1 依存性を図 7.14 に示す． Γ_1 を減少させていくと $m_z = 1$ から不連続に変化し，1 次相転移が発生していることが分かる．1 次元強磁性 Ising モデルの場合と同様に，TMF-QA ($\Gamma_2 = 0$) の $\tau_c(\delta)$ は N に対して多項式的に増加するのに対して，FM-QA ($\Gamma_2 > 0$) では指数関数的に増加すると考えられ，強磁性の全結合 XX 相互作用の導入によって QA 性能が悪化すると予想される．

強磁性と反強磁性の全結合 XX 相互作用を導入したときの相図を図 7.15 に示す． $\Gamma_2 \leq 0$ では 2 次相転移が発生し， $\Gamma_2 > 0$ では 1 次相転移が発生する．

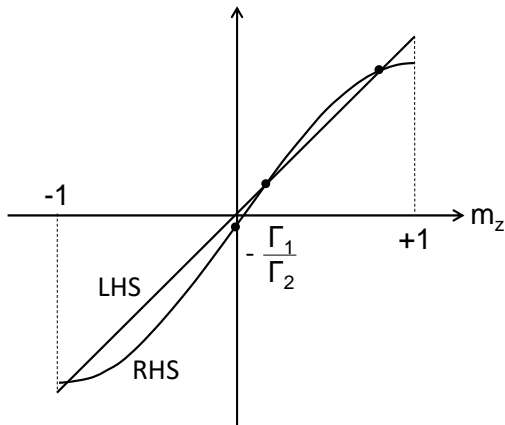


図 7.12: 領域 II の鞍点方程式 (7.69) が解を 3 つもつ場合

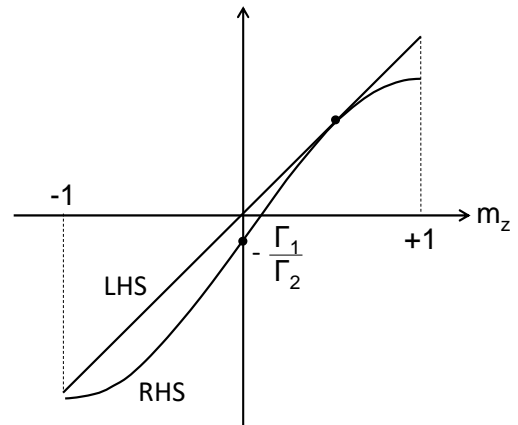


図 7.13: 領域 II の鞍点方程式 (7.69) が解を 1 つもつ場合

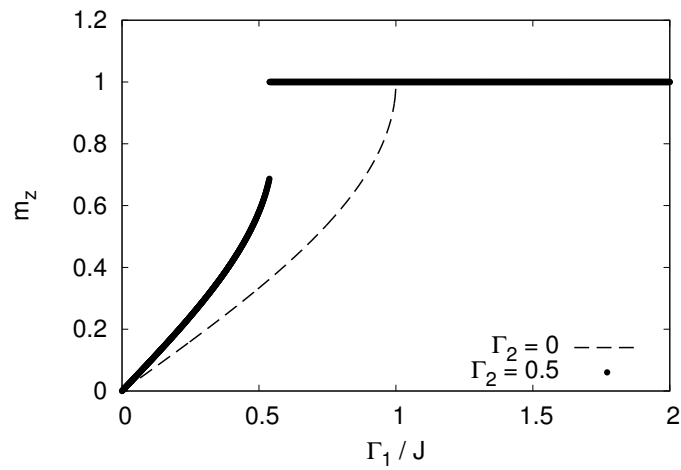


図 7.14: FM-QA における m_z の Γ_1 依存性

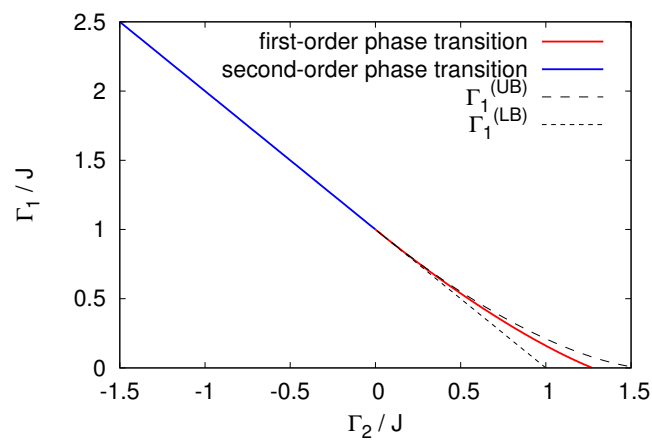


図 7.15: 1 次元 XY モデルに強磁性と反強磁性の全結合 XX 相互作用を導入したときの相図

7.7 本章のまとめ

本章では、1次元 Ising モデルと XY モデルの QA において、横磁場に加えて全結合の XX 相互作用を導入した場合の相転移の次数を解析的に調べた。相転移の次数はエネルギーギャップの最小値と関連があることが知られており、QA 性能を議論する際に統計力学的な解析によって相転移の次数を調べることは有用な方法である。特に、 $\hat{\mathcal{H}}_q$ が \hat{m}_x の関数となっている場合は、横磁場のみを印加したときの分配関数 Z_{eff} [式 (7.33) と (7.34)] を計算できれば、 Z_{eff} を用いて全結合 XX 相互作用を導入した時の自由エネルギー [式 (7.32)] を計算することができる。

強磁性の全結合 XX 相互作用を導入した場合は、1次元 Ising モデルと XY モデルで共に 1 次相転移が発生することが分かった。2つのモデルは TMF-QA では 2 次相転移が発生することを考慮すると、強磁性の全結合 XX 相互作用を用いると QA 性能が悪化すると予想される。一方で、反強磁性の全結合 XX 相互作用を利用した場合は、1次元 Ising モデルでは 2 次相転移を解消できるという結果が得られた。また、1次元 XY モデルでは 2 次相転移は残るが、臨界指数を保ったまま臨界振幅を減少させることができる。1次元 XY モデルに対する効果は小さいが、反強磁性の全結合 XX 相互作用を用いることで 1次元 Ising モデルの基底状態を効率的に探索できるようになると期待できる。

最後に反強磁性と強磁性の XX 相互作用の違いについて考察する。反強磁性の XX 相互作用は横磁場によって作られる x 方向の秩序を崩す働きをするので、図 7.4 と 7.11 の結果が示すように Γ_1 が大きい領域から m_x (XY モデルでは m_z) が減少し始める。1次元 Ising モデルで $m_x = 2/\pi$ となる横磁場の強さを $\Gamma_1^{(\text{Ising})}$ とし、1次元 XY モデルで $m_z = 1$ となる最小の横磁場の強さを $\Gamma_1^{(\text{XY})}$ とおくと、 $\partial m_x / \partial \Gamma_1$ と $\partial m_z / \partial \Gamma_1$ は

$$\int_0^{\Gamma_1^{(\text{Ising})}} \frac{\partial m_x}{\partial \Gamma_1} d\Gamma_1 = \frac{2}{\pi}, \quad (7.80)$$

$$\int_0^{\Gamma_1^{(\text{XY})}} \frac{\partial m_z}{\partial \Gamma_1} d\Gamma_1 = 1, \quad (7.81)$$

を満たす。反強磁性の XX 相互作用は $\Gamma_1^{(\text{Ising})}, \Gamma_1^{(\text{XY})}$ を増加させるので、 $\partial m_x / \partial \Gamma_1$ と $\partial m_z / \partial \Gamma_1$ は減少する。式 (7.57) と (7.74) はこの効果を表しており、1次元 Ising モデルでは 2 次相転移が消え、1次元 XY モデルでは臨界指数が減少する。一方で、強磁性の XX 相互作用は横磁場によって作られる秩序をさらに強める働きをする。このため、図 7.7 と 7.14 が示すように、1次元 Ising モデルでは $m_x < 2/\pi$ となる Γ_1 が減少し、1次元 XY モデルでは $m_z < 1$ となる Γ_1 が減少する。結果として $\Gamma_1 = 0$ で $m_x = m_z = 0$ まで減少させるのに不連続な激しい変化が伴うようになる。本章で解析した結果を踏まえると、QA の性能を向上させるためには、一般的に強磁性よりも反強磁性の XX 相互作用を用いた方が良いと考えられる。今回は Non-stoquastic Hamiltonian と Stoquastic Hamiltonian の違いに焦点をあてた議論はできなかったが、これらの違いについて明確にすることができれば古典的な最適化手法に対する QA の優位性を見出せる可能性があり、今後の課題として残っている。

第8章 one-hot 表示した整数最適化問題の高速解法

8.1 本章の概要

整数変数で定義される最適化問題を Ising マシンで解くためには整数変数を 2 値変数で表現する必要があるが、D-Wave マシンを用いる場合には one-hot 表示が採用されるのが一般的である（第 2.3 節参照）。本章では、one-hot 表示を用いた場合の QA や SA の性能を解析的に調べ、整数最適化問題を効率的に解くための整数変数の 2 値化方法を提案する。

第 8.2 節では、one-hot 表示によって Ising 表現した場合に、QA による基底状態探索を効率的に実行する方法を検討した先行研究を示す。第 8.3 節では、Potts モデルのハミルトニアンを Ising 表現について説明する。第 8.4 節では全結合強磁性 Potts モデルのハミルトニアンを one-hot 表示により Ising 表現した場合に、横磁場を用いた QA(TMF-QA) の過程で 1 次相転移が発生することを解析的に示す。強磁性 Potts モデルは温度変化に対して 1 次相転移が発生し [96]、SA を用いて基底状態を探索するのが難しいモデルであることが知られているが、第 8.4 節の結果は QA を用いたとしても計算時間が指数関数的に増加することを示唆している。第 8.5 節では、全結合強磁性 Potts モデルの 1 次相転移を回避する方法として half-hot 制約を用いた繰り返し最適化を提案し、第 8.6 節で提案方法を全結合強磁性 Potts モデルに適用すると実際に 1 次相転移を回避できることを示す。第 8.7 節では提案手法の Potts グラスモデルへの適用を検討し、第 8.8 節はまとめにあてられる。

8.2 先行研究

one-hot 表示に照準を絞って高速化を議論した研究として、先行研究 [127–129] が挙げられる。これらの先行研究の課題認識は第 5.2 節で説明した内容と同様であり、one-hot 表示した後の解空間には制約条件を満たさない組合せが多く含まれているため、量子揺らぎを導入するハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_q$ を工夫して制約条件を満たす解空間に探索を限定している。例えば、one-hot 表示した後の最適化問題が

$$\min_{\sigma^z} \mathcal{H}_{\text{cost}}(\sigma^z) \text{ s.t. } \mathcal{H}_{\text{pen}}^{(i)}(\sigma_i^z) = 0, \quad (8.1)$$

$$\mathcal{H}_{\text{pen}}^{(i)}(\sigma_i^z) \equiv \sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z - (Q - 2), \quad (8.2)$$

と表されている場合に、以下の条件を満たす $\hat{\mathcal{H}}_q$:

$$[\hat{\mathcal{H}}_{\text{cost}}(\hat{\sigma}^z), \hat{\mathcal{H}}_q] \neq 0, \quad (8.3)$$

$$[\hat{\mathcal{H}}_{\text{pen}}^{(i)}(\hat{\sigma}_i^z), \hat{\mathcal{H}}_q] = 0, \quad (8.4)$$

を導入すると、シュレーディンガー方程式による時間発展のもとで $\hat{\mathcal{H}}_{\text{pen}}^{(i)}(\hat{\sigma}_i^z)$ は一定に保たれる。つまり、one-hot 制約を満たす初期条件を設定すれば、QA の過程で制約条件を満たす部分空間に探索が限定されることになる。さらに、上記の $\hat{\mathcal{H}}_q$ を利用すると制約条件が自動的に満たされることになるので、one-hot 制約に起因するペナルティ項が不要となる。ペナルティ項は σ_{qi}^z と $\sigma_{q'i}^z$ の間で全結合相互作用を発生させるため、これが無くなることで D-Wave マシンに埋め込み可能な問題サイズも増えると期待される。具体的な $\hat{\mathcal{H}}_q$ としては

$$\hat{\mathcal{H}}_q = - \sum_i \sum_{q=1}^Q \left(\hat{\sigma}_{qi}^x \hat{\sigma}_{q+1,i}^x + \hat{\sigma}_{qi}^y \hat{\sigma}_{q+1,i}^y \right), \quad (8.5)$$

が提案されている。このハミルトニアンは短距離相互作用しか含んでおらず、QA マシンへの XX 相互作用や YY 相互作用の実装の観点からも将来的に有望な方法になり得と考えられる。

先行研究では one-hot 制約に適した $\hat{\mathcal{H}}_q$ の導入によって QA 性能の向上を狙っているが、本章で検討する方法では one-hot 制約自体の変更によって基底状態探索を効率化する方法を提案する。提案手法は QA マシンに限らず Ising モデルベースの最適化に広く適用可能であり、整数最適化問題を解く一般的な方法論として発展させていくことも可能である。

8.3 Potts モデルのハミルトニアンの Ising 表現

本章で扱う Potts モデルのハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{potts}} = -\frac{4}{N} \sum_{i<j} J_{ij} \delta_{S_i, S_j}, \quad (8.6)$$

である。ここで、 $S_i \in (1, 2, \dots, Q)$ は Potts スピンを、 N は Potts スピンの数を、 J_{ij} は Potts スピン間の相互作用を、 δ はクロネッカーのデルタを表す。式 (8.6) のハミルトニアンの基底状態探索は、one-hot 表示によって

$$\min_{\mathbf{x}} \left[-\frac{4}{N} \sum_{i<j} J_{ij} \sum_{q=1}^Q x_{qi} x_{qj} \right] \text{ s.t. } \sum_{q=1}^Q x_{qi} = 1, \quad (8.7)$$

と書き換えることができる。ここで、 $x_{qi} \in (0, 1)$ である。これを Ising スピン $\sigma_{qi}^z \in (+1, -1)$ を用いて表すためには、以下の線形変換:

$$x_{qi} = \frac{1 - \sigma_{qi}^z}{2}, \quad (8.8)$$

を用いればよい。定数項を省略すると、式 (8.7) は

$$\min_{\sigma^z} \left[-\frac{1}{N} \sum_{i<j} J_{ij} \sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z \sigma_{qj}^z + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\sum_{j \neq i} J_{ij} \right) \sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z \right] \text{ s.t. } \sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z = Q - 2, \quad (8.9)$$

となる．さらに，one-hot 制約により $\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z$ は定数となっているので，式 (8.9) の評価関数部分の第二項は省略できて

$$\min_{\sigma^z} \left[-\frac{1}{N} \sum_{i < j} J_{ij} \sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z \sigma_{qj}^z \right] \text{ s.t. } \sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z = Q - 2, \quad (8.10)$$

と変形できる．ペナルティ項を用いて制約条件なしの最適化問題に書き換えると，one-hot 表示によって Ising 表現した評価関数は

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{1}{N} \sum_{i < j} J_{ij} \sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z \sigma_{qj}^z + \frac{\lambda}{2Q} \sum_{i=1}^N \left(\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z - (Q - 2) \right)^2, \quad (8.11)$$

となる．以降では，式 (8.11) のハミルトニアンを用いて QA や SA の過程で発生する相転移の次数を解析的に調べていく．

8.4 全結合強磁性 Potts モデルの QA

本節では，全結合強磁性 Potts モデルのハミルトニアンを one-hot 表示を用いて Ising 表現した場合，QA の過程で 1 次相転移が発生することを解析的に示す．この結果は，エネルギーギャップがシステムサイズに対して指数関数的に減少し，QA を用いて効率的に基底状態を探索することが不可能であることを示唆している．また，本節の後半では QA で 1 次相転移が発生する原因を考察し，次節での half-hot 制約を用いた方法の提案に繋げる．

8.4.1 問題設定

全結合強磁性 Potts モデルでは $J_{ij} = J > 0$ であり，QA のハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_q, \quad (8.12)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = -\frac{J}{2N} \sum_{q=1}^Q \left(\sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_{qi}^z \right)^2 + \frac{\lambda}{2Q} \sum_{i=1}^N \left[\left(\sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_{qi}^z \right)^2 - 2(Q - 2) \sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_{qi}^z \right], \quad (8.13)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_q = -\Gamma \sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_{qi}^x, \quad (8.14)$$

である．ここで， Γ は横磁場の強さを制御するパラメータであり， $\hat{\mathcal{H}}_0$ ではペナルティ項の展開によって発生する定数項を省略した．式 (8.13) から分かるように，ペナルティ項は全結合の反強磁性相互作用と外部磁場から構成されている．

強磁性 Potts モデルの基底状態の例を図 8.1 に示す．ただし，図が複雑になるのを防ぐため，スピン変数間の相互作用は式 (8.13) の第一項に含まれる最近接相互作用のみを示してある．図 8.1 の基底状態は Q 個の強磁性 Ising モデルの基底状態から構成されており，one-hot 制約を満たすために 1 個の GS_{FM} と $Q - 1$ 個の $\overline{\text{GS}}_{\text{FM}}$ が配置されている．ここで， GS_{FM} と $\overline{\text{GS}}_{\text{FM}}$ は強磁性 Ising モデルの基底状態を表しており， $\overline{\text{GS}}_{\text{FM}}$ は GS_{FM} の全ての

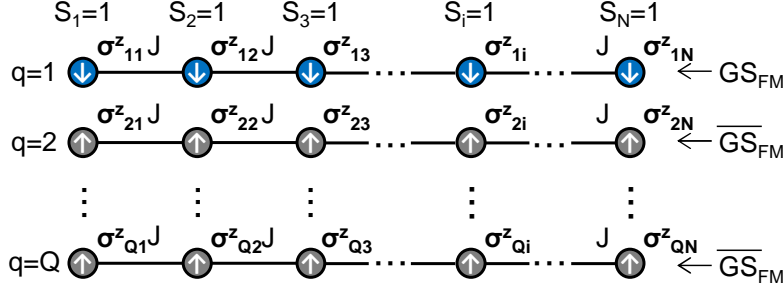


図 8.1: 強磁性 Potts モデルの基底状態の例

スピンを反転させたものを表す. \mathcal{H}_0 の第一項は Q 個の独立な全結合強磁性 Ising モデルのハミルトニアン之和であり, 図 8.1 のスピン配位は \mathcal{H}_0 の第一項と第二項を同時に最小化する. このことから, ペナルティ項の強さを決めるパラメータ λ は

$$\lambda > 0, \quad (8.15)$$

と設定すればよいことが分かる (λ を決める考え方の詳細は付録 A を参照).

8.4.2 自由エネルギーとオーダーパラメータ

鈴木-トロッター展開を適用した後に, 静的近似を仮定すると $N \rightarrow \infty, \beta \rightarrow \infty$ における自由エネルギーとして

$$f(\{m_q\}) = \frac{J}{2} \sum_{q=1}^Q m_q^2 + \varepsilon_{\min}^{(\text{eff})}(\{m_q\}), \quad (8.16)$$

が得られる (導出の詳細は付録 E.1 を参照). ここで, m_q は $\{\sigma_{qi}^z | i = 1, 2, \dots, N\}$ に対する強磁性オーダーパラメータであり, $\varepsilon_{\min}^{(\text{eff})}(\{m_q\})$ は以下で与えられる有効ハミルトニアン:

$$\hat{\mathcal{H}}^{(\text{eff})}(\{m_q\}) \equiv \frac{\lambda}{2Q} \left(\sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_q^z \right)^2 - \sum_{q=1}^Q \left(Jm_q + \frac{Q-2}{Q} \lambda \right) \hat{\sigma}_q^z - \Gamma \sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_q^x, \quad (8.17)$$

の最小固有値を表す. $\varepsilon_{\min}^{(\text{eff})}(\{m_q\})$ は $2^Q \times 2^Q$ 行列の最小固有値であり, Q が小さければ厳密対角化によって数値的に求めることができる. $\{m_q\}$ は自由エネルギー [式 (8.16)] を最小化するように決定される.

8.4.3 オーダーパラメータの量子揺らぎ依存性

自由エネルギーを最小化する $\{m_q\}$ を求め, 強磁性オーダーパラメータの Γ 依存性と相転移の次数を調べる. 系を記述するオーダーパラメータは Q 個あるが, one-hot 制約の対称性を考慮すると, 自由エネルギーを最小化する $\{m_q\}$ は 1 個の $m^{(-)}$ と $Q-1$ 個の $m^{(+)}$ の 2 つのグループに分けられる. $\Gamma = 0$ では $m^{(-)} = -1, m^{(+)} = +1$ である (図 8.1 参照). この対称性を利用するとオーダーパラメータの数を $m^{(\pm)}$ の 2 個に減らすことができる.

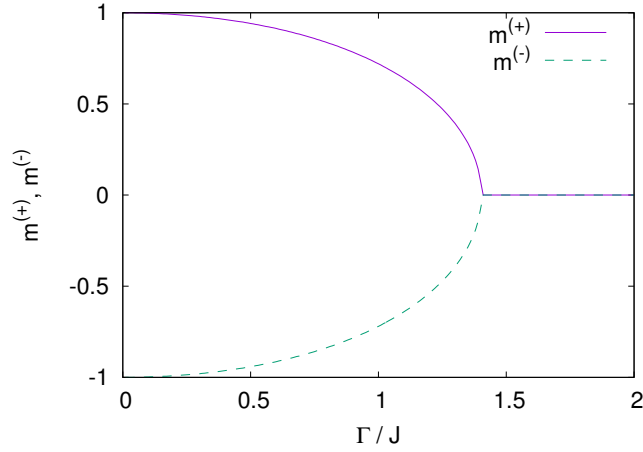


図 8.2: $Q = 2$ における $m^{(\pm)}$ の Γ 依存性

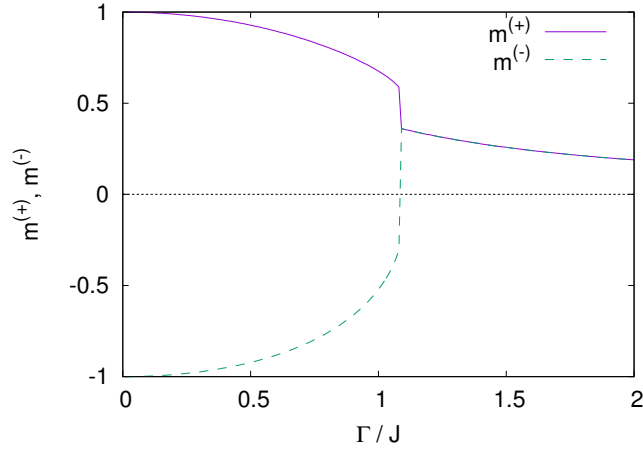


図 8.3: $Q = 3$ における $m^{(\pm)}$ の Γ 依存性

自由エネルギーを最小化する $m^{(\pm)}$ の Γ 依存性を $Q = 2, 3, 4$ で求めた結果を図 8.2, 8.3, 8.4 に示す。ここで、 $\lambda/J = 1$ と設定した。 $Q = 2$ では $m^{(\pm)}$ が連続的に変化する 2 次相転移が発生しており、 $Q > 2$ では $m^{(\pm)}$ が不連続に変化する 1 次相転移が発生することが分かる。 $Q = 2$ と $Q > 2$ の場合で振る舞いが異なるのは Γ が大きい領域であり、 $Q = 2$ では $m^{(\pm)} = 0$ となっているのに対して、 $Q > 2$ では $m^{(\pm)} > 0$ となる。 Γ が小さい領域では全ての場合で $m^{(+)} > 0, m^{(-)} < 0$ となっていたため、 $Q > 2$ の場合は 2 つの領域の切り替りで $m^{(\pm)}$ が不連続に変化することになる。 $Q > 2$ の場合に Γ が大きい領域で $m^{(\pm)} > 0$ となる原因は式 (8.13) のペナルティ項に含まれる外部磁場であり、ペナルティ項を上手く調整することで 1 次相転移を回避できると期待できる。ここで、全結合強磁性 Potts モデルの 1 次相転移は前章で検討した全結合 XX 相互作用の導入によって回避できないことを容易に示すことができ、詳細な計算は付録 F に示してある。

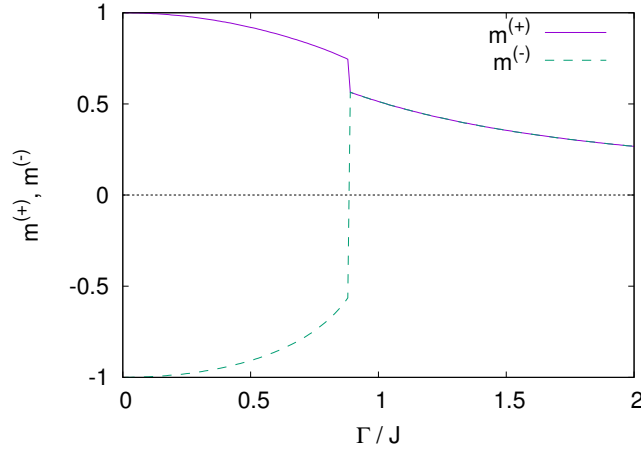


図 8.4: $Q = 4$ における $m^{(\pm)}$ の Γ 依存性

8.5 half-hot 制約下の繰り返し最適化

one-hot 制約のペナルティ項に含まれる外部磁場に起因する 1 次相転移を回避するため、本節では half-hot 制約下での繰り返し最適化を提案する。

half-hot 制約とは

$$\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z = 0, \quad (8.18)$$

であり、ペナルティ項は

$$\frac{\lambda}{2Q} \left(\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z \right)^2, \quad (8.19)$$

で与えられる。このペナルティ項は全結合反強磁性相互作用のみで構成されており、外部磁場を含まないため強磁性 Potts モデルにおける 1 次相転移を回避できると期待できる。ここで、half-hot 制約をブール変数を用いて表すと

$$\sum_{q=1}^Q x_{qi} = \frac{Q}{2}, \quad (8.20)$$

となる。one-hot 制約を課した場合はそれぞれの整数変数に対して 1 個の値が選択されるが、half-hot 制約下の最適化では Q 個の選択肢の中から $Q/2$ 個の選択肢に絞られると解釈できる。提案手法では最終的に各整数変数で 1 個の選択肢に絞り込まれるまで half-hot 制約下の最適化を繰り返す。

次に、 k 回目の最適化の結果から $k+1$ 回目の最適化における評価関数を導く方法を示す。 k 回目の最適化問題は一般的な形として

$$\min_{\sigma^{zk}} \left[- \sum_{i < j} \sum_{q=1}^{Q^k} \sum_{q'=1}^{Q^k} J_{ij}^k(q, q') \sigma_{qi}^{zk} \sigma_{q'j}^{zk} - \sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^{Q^k} h_i^k(q) \sigma_{qi}^{zk} \right] \text{ s.t. } \sum_{q=1}^{Q^k} \sigma_{qi}^{zk} = 0, \quad (8.21)$$

と書くことができる．ここで、 σ^{zk} は k 回目の最適化問題を定義するスピン変数を、 $J_{ij}^k(q, q')$ は σ_{qi}^{zk} と $\sigma_{q'j}^{zk}$ の間の相互作用を、 $h^k(q)$ は σ_{qi}^{zk} に対する外部磁場を、 $Q^k = Q/2^{k-1}$ は k 回目の最適化で残っている選択肢の数を表す． k 回目の最適化の結果は $\{\mu_i^k\}_{i=1,2,\dots,N}$ と $\{\nu_i^k\}_{i=1,2,\dots,N}$ を用いて規定することができ、 $\{\sigma_{qi}^{zk} = -1 | q \in \mu_i^k\}, \{\sigma_{qi}^{zk} = +1 | q \in \nu_i^k\}$ とする． $k+1$ 回目の最適化問題では、各整数変数で $q \in \nu_i^k$ に属するスピン変数の値を $+1$ に固定し、 $q \in \mu_i^k$ に属するスピン変数を

$$\sigma_{qi}^{z,k+1} \equiv \sigma_{\mu_{qi}^k, i}^{zk}, \quad (8.22)$$

と定義すれば良い．式 (8.21) に含まれる q と q' の和に関して

$$\sum_q = \sum_{q \in \mu_i^k} + \sum_{q \in \nu_i^k}, \quad (8.23)$$

$$\sum_{q'} = \sum_{q' \in \mu_j^k} + \sum_{q' \in \nu_j^k}, \quad (8.24)$$

が成り立つことを用いると、 $k+1$ 回目の最適化問題は

$$\min_{\sigma^{z,k+1}} \left[- \sum_{i < j} \sum_{q=1}^{Q^{k+1}} \sum_{q'=1}^{Q^{k+1}} J_{ij}^{k+1}(q, q') \sigma_{qi}^{z,k+1} \sigma_{q'j}^{z,k+1} - \sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^{Q^{k+1}} h_i^{k+1}(q) \sigma_{qi}^{z,k+1} \right] \\ \text{s.t.} \quad \sum_{q=1}^{Q^{k+1}} \sigma_{qi}^{z,k+1} = 0, \quad (8.25)$$

$$J_{ij}^{k+1}(q, q') = J_{ij}^k(\mu_{qi}^k, \mu_{q'j}^k), \quad (8.26)$$

$$h_i^{k+1}(q) = \sum_{j \neq i} \sum_{q'=1}^{Q^{k+1}} J_{ij}^k(\mu_{qi}^k, \nu_{q'j}^k) + h_i^k(\mu_{qi}^k), \quad (8.27)$$

となる．ここで、 μ_{qi}^k と ν_{qi}^k はそれぞれ μ_i^k と ν_i^k の q 番目の要素を表す．以上で、 k 回目の最適化の結果から $k+1$ 番目の最適化問題を導出する式が得られた．

8.6 全結合強磁性 Potts モデルへの適用

本節では、half-hot 制約下の繰り返し最適化を全結合強磁性 Potts モデルに適用した場合の相転移の次数を調べる．

8.6.1 繰り返し最適化による基底状態への到達

まず、全結合強磁性 Potts モデルでは half-hot 制約下の繰り返し最適化によって正しい基底状態に到達できることを示す．1 回目の最適化における相互作用と外部磁場は

$$J_{ij}^1(q, q') = \frac{J}{N} \delta_{qq'}, \quad (8.28)$$

$$h_i^1(q) = 0, \quad (8.29)$$

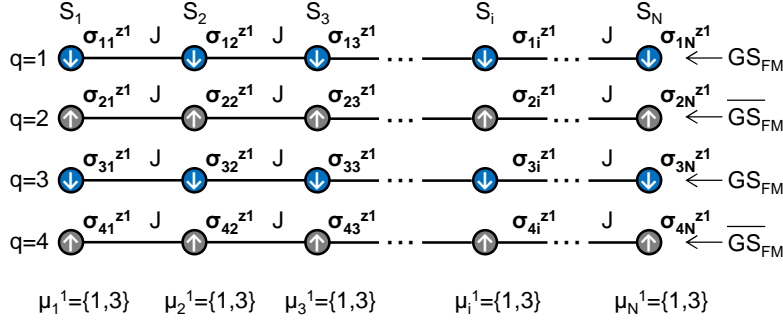


図 8.5: half-hot 制約下の全結合強磁性 Potts モデルの基底状態の例 ($Q = 4$)

である．これを式 (8.26) と (8.27) に代入すると，2 回目の最適化における相互作用と外部磁場が

$$J_{ij}^2(q, q') = \frac{J}{N} \delta_{\mu_{qi}^1, \mu_{q'j}^1}, \quad (8.30)$$

$$h_i^2(q) = \frac{J}{N} \sum_{j \neq i} \sum_{q'=1}^{Q^{k+1}} \delta_{\mu_{qi}^1, \nu_{q'j}^1}, \quad (8.31)$$

となることが分かる．全結合強磁性 Potts モデルの half-hot 制約下の基底状態の例を $Q = 4$ について図 8.5 に示す．図 8.5 の基底状態は強磁性 Ising モデルの基底状態から構成されており， $\mu_i^1 = \{1, 3\}, \nu_i^1 = \{2, 4\}$ となっている．また，half-hot 制約を満たすために GS_{FM} と $\overline{\text{GS}}_{\text{FM}}$ が $Q/2$ 個ずつ配置されている．1 回目の最適化で $\mu_i^1 = \{1, 3\}, \nu_i^1 = \{2, 4\}$ が得られたとすると，2 回目の最適化問題は式 (8.30) と (8.31) より

$$\min_{\sigma^{z2}} \left[-\frac{J}{2N} \sum_{q=1}^{Q/2} \left(\sum_{i=1}^N \sigma_{qi}^{z2} \right)^2 \right] \text{ s.t. } \sum_{q=1}^{Q/2} \sigma_{qi}^{z2} = 0, \quad (8.32)$$

となる．ここで， $\sigma_{1i}^{z2} \equiv \sigma_{1i}^{z1}, \sigma_{2i}^{z2} \equiv \sigma_{3i}^{z1}$ である．これは状態数が $Q/2$ の全結合強磁性 Potts モデルに対する half-hot 制約下の最適化問題である．以上より，それぞれの繰り返し最適化で基底状態を得ることができれば，最終的に全結合強磁性 Potts モデルの基底状態に到達することができる．

8.6.2 half-hot 制約下の相転移の次数: Q が偶数の場合

half-hot 制約下での QA のハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_q, \quad (8.33)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = -\frac{J}{2N} \sum_{q=1}^Q \left(\sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_{qi}^z \right)^2 + \frac{\lambda}{2Q} \sum_{i=1}^N \left(\sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_{qi}^z \right)^2, \quad (8.34)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_q = -\Gamma \sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_{qi}^x, \quad (8.35)$$

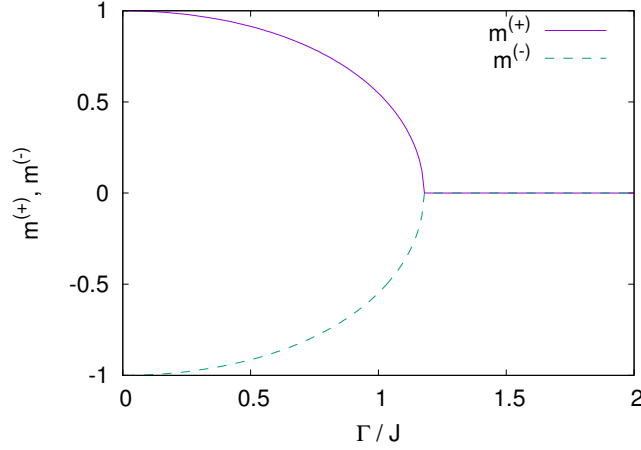


図 8.6: half-hot 制約下の $Q = 4$ における $m^{(\pm)}$ の Γ 依存性

となる．鈴木-トロッター展開を適用した後に，静的近似を仮定すると $N \rightarrow \infty, \beta \rightarrow \infty$ における自由エネルギーとして

$$f(\{m_q\}) = \frac{J}{2} \sum_{q=1}^Q m_q^2 + \varepsilon_{\min}^{(\text{eff})}(\{m_q\}), \quad (8.36)$$

が得られる（付録 E.1 と同様の計算によって導出できる）．ここで， m_q は $\{\sigma_{qi}^z | i = 1, 2, \dots, N\}$ に対する強磁性オーダーパラメータであり， $\varepsilon_{\min}^{(\text{eff})}(\{m_q\})$ は以下で与えられる有効ハミルトニアン：

$$\hat{\mathcal{H}}^{(\text{eff})}(\{m_q\}) = \frac{\lambda}{2Q} \left(\sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_q^z \right)^2 - J \sum_{q=1}^Q m_q \hat{\sigma}_q^z - \Gamma \sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_q^x, \quad (8.37)$$

の最小固有値を表す．

強磁性オーダーパラメータ $\{m_q\}$ は自由エネルギーを最小化するように決定される．one-hot 制約下の場合と同様に，half-hot 制約下では自由エネルギーを最小化する $\{m_q\}$ は $Q/2$ 個の $m^{(-)}$ と $Q/2$ 個の $m^{(+)}$ の 2 つのグループに分けられる． $\Gamma = 0$ では $m^{(-)} = -1, m^{(+)} = +1$ である（図 8.5 参照）．この対称性を用いると， Q 個のオーダーパラメータを $m^{(\pm)}$ の 2 個に減らすことができる．自由エネルギーを最小化する $m^{(\pm)}$ の Γ 依存性を $Q = 4$ で求めた結果を図 8.6 に示す． Γ が大きい領域では期待通り $m^{(\pm)} = 0$ となっており， Γ を減少させると連続的に $m^{(+)} > 0, m^{(-)} < 0$ へと変化していることが分かる．この結果は，half-hot 制約を用いることで 1 次相転移を回避できることを示している．

8.6.3 half-hot 制約下の相転移の次数: Q が奇数の場合

Q が奇数の場合には，式 (8.18) で定義した half-hot 制約を満足することができない．そこで，任意の Q に対して提案手法を適用できるようにするため，half-hot 制約の定義を

$$\left| \sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z \right| \leq 1, \quad (8.38)$$

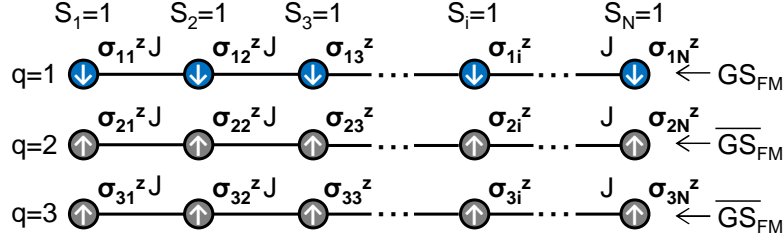


図 8.7: 一般化した half-hot 制約下での基底状態の例: $\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z = +1$

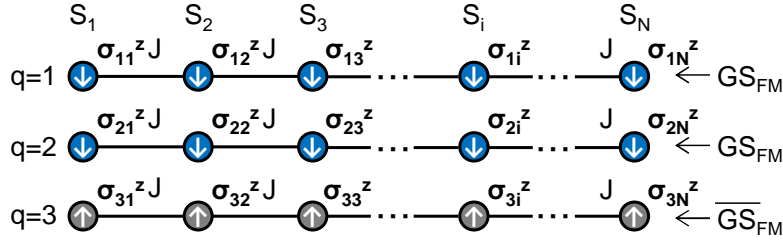


図 8.8: 一般化した half-hot 制約下での基底状態の例: $\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z = -1$

と修正する．本論文では，式 (8.38) で定義される half-hot 制約を一般化した half-hot 制約と呼ぶ． Q が偶数の場合は $\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z$ も偶数となるので，式 (8.38) の定義と式 (8.18) の定義は一致する．一方で， Q が奇数の場合は $\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z$ も奇数となるので，式 (8.38) より $\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z$ は $+1$ か -1 に制限される． Q の偶奇によって $\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z$ は異なる値に制限されるが，いずれの場合にしても式 (8.19) の制約項を用いれば良いことを簡単に確認できる．実際に， $\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z$ が奇数の場合には， $\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z = \pm 1$ で式 (8.19) のペナルティ項が最小となる．結果として， Q の偶奇に関わらず一般化した half-hot 制約下での評価関数 $\hat{\mathcal{H}}_0$ は式 (8.34) で与えられることになる．

次に，一般化した half-hot 制約を用いると， Q が奇数の場合にも 1 次相転移を回避できることを確認する．一般化した half-hot 制約下での基底状態の例を $Q = 3$ の場合について図 8.7 と 8.8 に示す．図 8.7 では全ての整数変数 S_i で $\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z = +1$ となっており，図 8.8 では全ての整数変数 S_i で $\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z = -1$ となっている．いずれの基底状態も強磁性 Ising モデルの基底状態から構成されており，式 (8.34) の第一項と第二項が同時に最小化される．one-hot 制約下の場合と同様に，一般化した half-hot 制約下で自由エネルギー [式 (8.36) と (8.37)] を最小にする $\{m_q\}$ は， $(Q+1)/2$ 個の $m^{(\pm)}$ と $(Q-1)/2$ 個の $m^{(\mp)}$ の 2 つのグループに分けられる．ここで，それぞれの符号は $\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z = \pm 1$ の基底状態に対応する．図 8.9 と 8.10 は，それぞれ $\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z = +1$ と $\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z = -1$ に到達する $m^{(\pm)}$ の Γ 依存性を示す．いずれの場合も Γ が大きい領域で $m^{(\pm)} = 0$ となっており， Γ を減少させると $m^{(+)} > 0, m^{(-)} < 0$ に連続的に変化している．以上の結果から，一般化した half-hot 制約を用いることで Q が奇数の場合でも 1 次相転移を回避できることが示された．

8.6.4 half-hot 制約下の相転移の次数: $Q \rightarrow \infty$ の場合

ここまでは Q が有限の場合に 1 次相転移を回避できることを示してきたが，次は $Q \rightarrow \infty$ の場合にも同様に 2 次相転移が発生することを解析的に示す． $Q \rightarrow \infty$ の場合は式 (8.34)

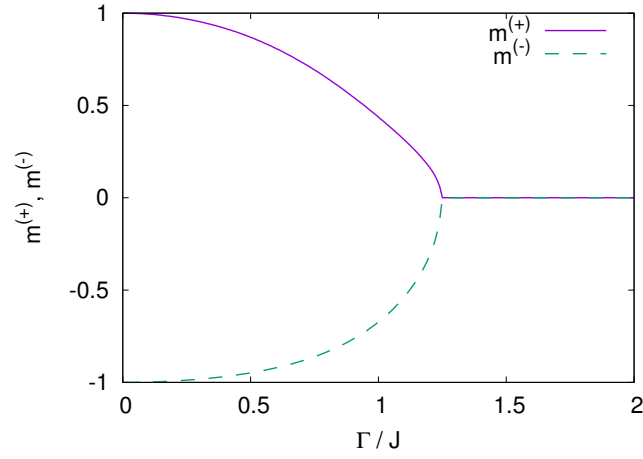


図 8.9: 一般化した half-hot 制約下の $Q = 3$ における $m^{(\pm)}$ の Γ 依存性: $\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z = +1$

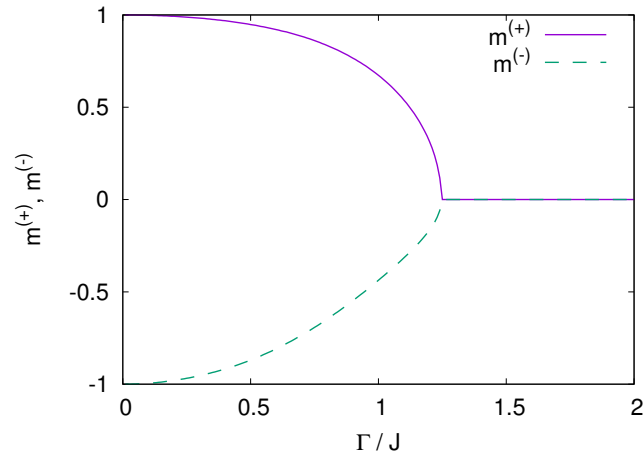


図 8.10: 一般化した half-hot 制約下の $Q = 3$ における $m^{(\pm)}$ の Γ 依存性: $\sum_{q=1}^Q \sigma_{qi}^z = -1$

の第二項にも平均場理論の計算を適用することができ、自由エネルギーとして

$$f(\{m_q\}, \{M_i\}) = \frac{J}{2Q} \sum_{q=1}^Q m_q^2 - \frac{\lambda}{2N} \sum_{i=1}^N M_i^2 - \frac{1}{\beta N Q} \sum_{q=1}^Q \sum_{i=1}^N \log 2 \cosh \beta \Xi_{qi}, \quad (8.39)$$

$$\Xi_{qi} \equiv \sqrt{(Jm_q - \lambda M_i)^2 + \Gamma^2}, \quad (8.40)$$

が得られる（導出の詳細は付録 E.2 を参照）。ここで、 M_i は $\{\sigma_{qi}^z | q = 1, 2, \dots, Q\}$ に対する強磁性オーダーパラメータであり、 $\{m_q\}$ と $\{M_i\}$ は自由エネルギーを最小にするように決定される。鞍点方程式は

$$m_q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (Jm_q - \lambda M_i) \frac{\tanh \beta \Xi_{qi}}{\Xi_{qi}}, \quad (8.41)$$

$$M_i = \frac{1}{Q} \sum_{q=1}^Q (Jm_q - \lambda M_i) \frac{\tanh \beta \Xi_{qi}}{\Xi_{qi}}, \quad (8.42)$$

である。この鞍点方程式は無限個のオーダーパラメータを含む連立方程式であり、これを解くためには何かしらの対称性を仮定して物理的に意味のある解を求める必要がある。ここでは、それぞれの整数変数 S_i に区別がないこと、half-hot 制約が課せられていることを考慮して以下の対称性を仮定する。

- M_i は i に依存しない ($M \equiv M_i$) .
- $\{m_q\}$ は $Q/2$ 個の $m^{(+)}$ と $Q/2$ 個の $m^{(-)}$ に分類される。
- $m^{(+)}$ と $m^{(-)}$ の絶対値が等しい ($|m^{(+)}| = |m^{(-)}|$) .

式 (8.41) と (8.42) より

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N M_i = \frac{1}{Q} \sum_{q=1}^Q m_q, \quad (8.43)$$

が成り立ち、2 番目と 3 番目の仮定から右辺が 0 となることが分かる。つまり、

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N M_i = 0, \quad (8.44)$$

であり、1 番目の仮定から $M = M_i = 0$ が導かれる。 $M_i = 0$ を式 (8.41) に代入すると、 $m^{(\pm)}$ に対する鞍点方程式として

$$m^{(\pm)} = \frac{Jm^{(\pm)}}{\sqrt{(Jm^{(\pm)})^2 + \Gamma^2}} \tanh \beta \sqrt{(Jm^{(\pm)})^2 + \Gamma^2}, \quad (8.45)$$

が得られる。この鞍点方程式の右辺は奇関数であり、3 番目の仮定と矛盾していないことが分かる。式 (8.45) の鞍点方程式は全結合強磁性 Ising モデルの鞍点方程式と一致しており、 $Q \rightarrow \infty$ でも 1 次相転移が発生しないことが示された。また、この結果は絶対零度に制限されておらず、half-hot 制約を用いると QA と SA の両方で 1 次相転移を回避できる。

8.7 全結合 Potts グラスモデルへの適用

本章では、half-hot 制約下の繰り返し最適化を全結合 Potts グラスモデル [97] に適用することを考える．全結合 Potts グラスモデルのハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{potts}} = - \sum_{i < j} J_{ij} \delta_{S_i, S_j}, \quad (8.46)$$

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \exp \left[-\frac{N}{2J^2} \left(J_{ij} - \frac{J_0}{N} \right)^2 \right], \quad (8.47)$$

で与えられる．ここで、 $S_i \in (1, 2, \dots, Q)$ であり、 δ はクロネッカーのデルタを表し、 $P(J_{ij})$ は相互作用 J_{ij} の確率分布である．half-hot 制約を用いて式 (8.46) を Ising 表現すると、QA のハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_q, \quad (8.48)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = - \sum_{i < j} J_{ij} \sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_{qi}^z \sigma_{qj}^z + \frac{\lambda}{2Q} \sum_{i=1}^N \left(\sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_{qi}^z \right)^2, \quad (8.49)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_q = -\Gamma \sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_{qi}^x, \quad (8.50)$$

となる．式 (8.49) の第一項は Q 個の独立な SK モデル [62, 63] のハミルトニアンの和になっている．SK モデルの自由エネルギーは平均場理論によって解析的に求めることができるため、これを利用すれば Potts グラスモデルの自由エネルギーも計算することができる．

8.7.1 half-hot 制約下の自由エネルギーと鞍点方程式: $Q \rightarrow \infty$ の場合

$Q \rightarrow \infty$ における自由エネルギーと鞍点方程式を求め、half-hot 制約下の Potts グラスモデルの鞍点方程式が横磁場を印可した SK モデルの鞍点方程式 [130] と一致することを示す（横磁場 SK モデルの鞍点方程式の導出は付録 G を参照）．

自由エネルギーは

$$-\beta[f]_J = \frac{1}{NQ} [\log Z]_J, \quad (8.51)$$

で与えられる．ここで、 $[\dots]_J$ は $\{J_{ij}\}$ に対する平均（配位平均）を表し、 Z は分配関数:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}, \quad (8.52)$$

である．自由エネルギーの配位平均を計算する理由としては以下を挙げることができる．

- $N \rightarrow \infty$ における自由エネルギーは個々の $\{J_{ij}\}$ の実現値に依存するのではなく、 $\{J_{ij}\}$ の確率分布を指定する少数のパラメータに依存すると考えられる（自己平均性）．
- 配位平均を先に計算してしまえば、 $\{J_{ij}\}$ のランダム性を消すことができるため自由エネルギーの計算が容易になる．

このような理由から、スピングラスの分野では自由エネルギーの配位平均を計算することが多い。

配位平均: $[\log Z]_J$ を計算するための方法としてはレプリカ法 [131] が提案されている。 $\log Z$ の配位平均を直接計算するのは非常に難しいが、 Z が指数関数の和で表せるので、特に $P(J_{ij})$ がガウス分布の場合は $[Z]_J$ の配位平均の方が計算は容易である。そこで、レプリカ法では以下の恒等式:

$$[\log Z]_J = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{[Z^n]_J - 1}{n}, \quad (8.53)$$

を用いて $[\log Z]_J$ の配位平均を計算する。 $[Z^n]$ は n 個の独立なレプリカを導入した系の分配関数であり、 $[\log Z]_J$ を計算するより遥かに簡単である。

鈴木-トロッター展開の後にレプリカ法を適用し、静的近似とレプリカ対称性を仮定すると自由エネルギーとして

$$\begin{aligned} -\beta f = & -\frac{\beta J_0}{2Q} \sum_q m_q^2 + \frac{\beta^2 J^2}{4Q} \sum_q \xi_q^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4Q} \sum_q \eta_q^2 \\ & + \frac{\beta \lambda}{2N} \sum_i M_i^2 + \frac{1}{NQ} \sum_{q,i} \int Du_{qi} \ln \int Dv_{qi} 2 \cosh \beta \Xi_{qi}, \end{aligned} \quad (8.54)$$

が得られる (導出の詳細は付録 E.3 参照)。ここで、 m_q と M_i はそれぞれ $\{\sigma_{qi}^z | i = 1, 2, \dots, N\}$ と $\{\sigma_{qi}^z | q = 1, 2, \dots, Q\}$ に対する強磁性オーダーパラメータを、 ξ_q はレプリカ番号とトロッター番号が異なるスピン配位間のオーバーラップを、 η_q は同じレプリカ番号でトロッター番号が異なるスピン配位間のオーバーラップを表す。また、 $\Xi_{qi}, H_{qi}, Du_{qi}, Dv_{qi}$ は

$$\Xi_{qi} \equiv \sqrt{H_{qi}^2 + \Gamma^2}, \quad (8.55)$$

$$H_{qi} \equiv J_0 m_q - \lambda M_i + J \left[\sqrt{\xi_q} u_{qi} + \sqrt{\eta_q - \xi_q} v_{qi} \right], \quad (8.56)$$

$$Du_{qi} \equiv \frac{du_{qi}}{2\pi} \exp \left(-\frac{u_{qi}^2}{2} \right), \quad (8.57)$$

$$Dv_{qi} \equiv \frac{dv_{qi}}{2\pi} \exp \left(-\frac{v_{qi}^2}{2} \right), \quad (8.58)$$

と定義した。全結合強磁性 Potts モデルの場合と同様に、 m_q と M_i に対して以下の対称性を仮定する。

- M_i は i に依存しない ($M \equiv M_i$) 。
- $\{m_q\}$ は $Q/2$ 個の $m^{(+)}$ と $Q/2$ 個の $m^{(-)}$ に分類される。
- $m^{(+)}$ と $m^{(-)}$ の絶対値が等しい ($|m^{(+)}| = |m^{(-)}|$) 。

これらの対称性を仮定すると $M_i = 0$ を容易に示すことができ、 $M_i = 0$ を式 (8.54) と

(8.56) に代入して鞍点方程式を求めると

$$m_q = \int Du_q \frac{\int Dv_q \frac{H_q}{\Xi_q} \sinh \beta \Xi_q}{\int Dv_q \cosh \beta \Xi_q}, \quad (8.59)$$

$$\xi_q = \int Du_q \left(\frac{\int Dv_q \frac{H_q}{\Xi_q} \sinh \beta \Xi_q}{\int Dv_q \cosh \beta \Xi_q} \right)^2, \quad (8.60)$$

$$\eta_q = \int Du_q \frac{\int Dv_q \left(\frac{H_q^2}{\Xi_q^2} \cosh \beta \Xi_q + \frac{\Gamma^2}{\beta \Xi_q^3} \sinh \beta \Xi_q \right)}{\int Dv_q \cosh \beta \Xi_q}, \quad (8.61)$$

が得られる。ここで、

$$\Xi_q \equiv \sqrt{H_q^2 + \Gamma^2}, \quad (8.62)$$

$$H_q \equiv \sqrt{\xi_q} u_q + \sqrt{\eta_q - \xi_q} v_q + J_0 m_q, \quad (8.63)$$

である。これらの鞍点方程式は横磁場 SK モデルの鞍点方程式と一致しており、横磁場量子揺らぎと温度揺らぎに対して、half-hot 制約下の Potts グラスモデルと SK モデルが同じ次数の相転移を示すことになる。

8.7.2 2 回目以降の最適化問題について

先程の結果は half-hot 制約下の Potts グラスモデルに対する 1 回目の最適化において、Potts グラスモデルと SK モデルの相転移の次数が一致することを示している。ここでは、2 回目以降の最適化問題について考察する。ただし、half-hot 最適化の繰り返しによって Potts グラスモデルの正しい基底状態に到達できるかはよく分かっておらず、これを解決するのは今後の課題として残っている。

強磁性 Potts モデルの場合と同様に、 $\hat{\mathcal{H}}_0$ [式 (8.49)] の第一項は Q 個の独立な SK モデルのハミルトニアン之和であり、 $\hat{\mathcal{H}}_0$ の基底状態は SK モデルの基底状態から構成される。しかしながら、SK モデルの基底状態はフラストレーションに起因する縮退が存在し得るため、強磁性 Potts モデルよりも状況は複雑である。最も簡単な基底状態の例を $Q = 4$ の場合に図 8.11 に示す。ここで、 GS_{SK} と $\overline{\text{GS}}_{\text{SK}}$ は SK モデルの基底状態を表しており、 $\overline{\text{GS}}_{\text{SK}}$ は GS_{SK} のスピンを全反転させたものである。図 8.11 の基底状態は \mathcal{H}_0 の第一項を最小化し、且つ half-hot 制約を満たしているため第二項も最小化される。さらに、もし SK モデルが GS_{SK} や $\overline{\text{GS}}_{\text{SK}}$ とは異なる基底状態 GS'_{SK} をもっている場合は、図 8.12 に示すスピン配位も \mathcal{H}_0 の基底状態となる。いずれの場合にしても、強磁性 Potts モデルと異なり、 μ_i^1 と ν_i^1 は i に依存して異なる値となる。

2 回目の最適化における隣接する整数変数間の相互作用を示したのが図 8.13 である。整数変数間の相互作用は以下の 3 つの場合に分けられる。

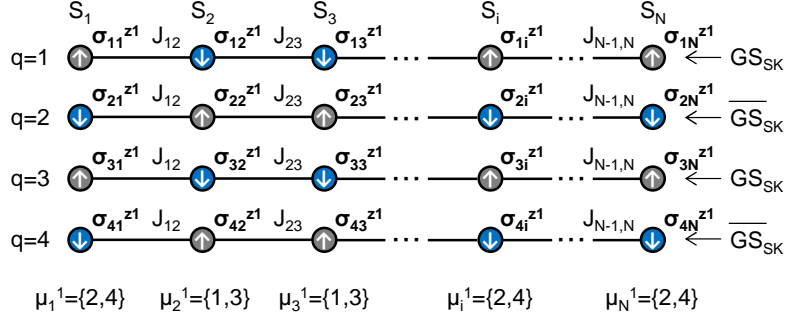


図 8.11: half-hot 制約下の全結合 Potts グラスモデルの基底状態の例 1

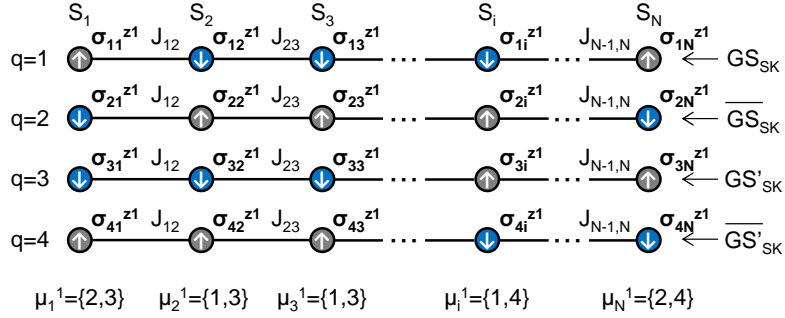


図 8.12: half-hot 制約下の全結合 Potts グラスモデルの基底状態の例 2

- 隣接する整数変数で同じ状態が選択された ($\mu_i^1 = \mu_j^1$) 場合は、2 回目の最適化問題と 1 回目の最適化問題の相互作用は状態数を除いて一致する。
- 隣接する整数変数で異なる状態が選択された ($\mu_i^1 = \nu_j^1$) 場合は、2 回目の最適化問題では S_i と S_j は独立になる。
- 隣接する整数変数で一部の状態を共通で選択しているときは、共有している状態間の相互作用のみが 2 回目の最適化問題に残る。

以上のように、1 回目の最適化で選択された Q 個の SK モデルの基底状態の組合せに依存して、2 回目の最適化問題は異なる相互作用をもつようになる。

half-hot 制約下の繰り返し最適化によって Potts グラスモデルの基底状態に到達できることを示すためには、1 回目の最適化で得られる SK モデルの基底状態の任意の組合せに対して、最終的に Potts グラスモデルの基底状態が得られることを示さなければならない。Potts グラスモデルを含めた一般の整数最適化問題に対して、half-hot 制約下の繰り返し最適化によって正しい基底状態へ到達できるかを検証するのは今後の課題である。

8.8 本章のまとめ

本章では、one-hot 表示した整数最適化問題を QA や SA を用いて効率的に解くための方法を検討し、half-hot 制約下の繰り返し最適化によって全結合強磁性 Potts モデルの 1 次相転移を回避できることを確認した。また、half-hot 制約下の $Q \rightarrow \infty$ における鞍点

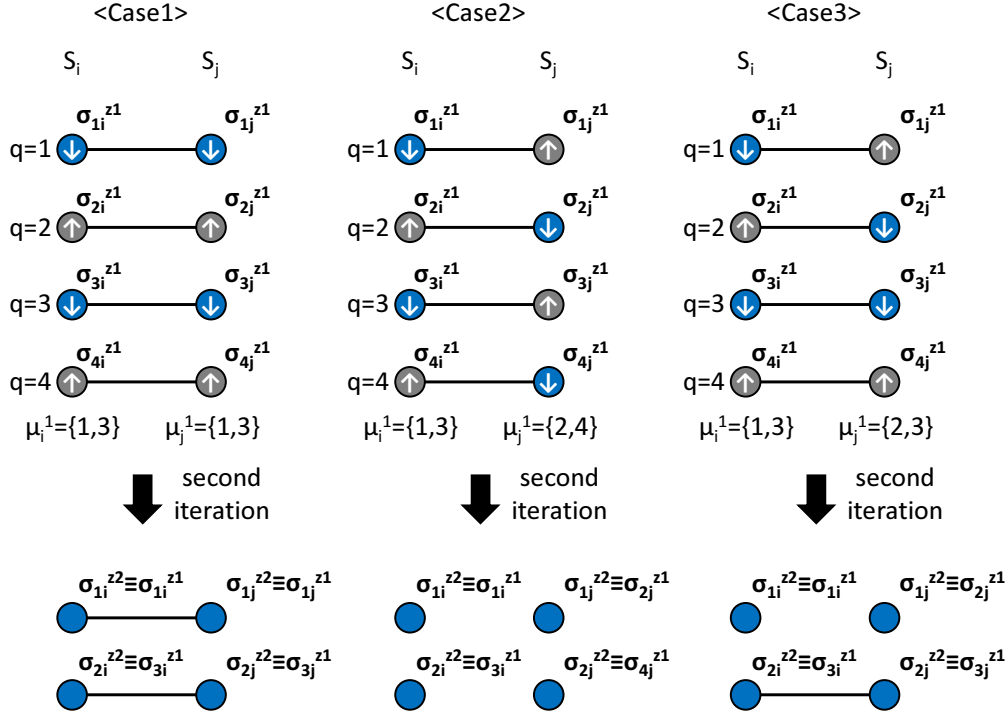


図 8.13: 2 回目の最適化問題における隣接する整数変数間の相互作用

方程式は強磁性 Ising モデルの鞍点方程式と一致することも示した．さらに，提案手法の Potts グラスモデルへの適用を検討し，少なくとも half-hot 制約下の 1 回目の最適化では， $Q \rightarrow \infty$ における鞍点方程式が SK モデルの鞍点方程式と一致することも確認できた．ただし，half-hot 制約下の繰り返し最適化によって，Potts グラスモデルを含む任意の整数最適化問題の正しい基底状態に到達できることは証明できておらず，今後の課題として残っている．

提案手法による正しい基底状態への到達を証明することができれば，提案手法を様々な形で発展させられると期待できる．まず，half-hot 制約下の繰り返し最適化を単純に捉えれば，1 回の最適化で選択枝を半分に絞っていく作業を繰り返していると解釈できる．この解釈に基づけば，提案手法は Ising モデルベースの最適化に限らず，オペレーションズリサーチ等で検討されている一般的な最適化手法とも組み合わせて利用できる．つまり，本章の研究は one-hot 表示した Ising 形式の最適化から出発したが，この形式での解析に基づいて提案した方法によって，広範な最適化手法の性能改善に寄与できる可能性がある．さらに，half-hot 制約下の強磁性 Potts モデルと Potts グラスモデルの鞍点方程式が，それぞれ強磁性 Ising モデルと SK モデルの鞍点方程式と一致することを考えると，Ising モデルと Potts モデルの基底状態の性質を互いに関連付けるような議論もできるようになるかもしれない．

第9章 結論と今後の展望

9.1 本論文の要約

本論文では、QA を用いた組合せ最適化問題の効率的な解法を検討してきた。QA は 20 年以上も前に提案された方法ではあるが、D-Wave マシンの登場によって近年非常に大きな注目を浴びることとなった。D-Wave マシンは QA を物理的に実装したマシンであり、Ising モデルの基底状態探索に特化したものである。NP 困難問題を含む多くの組合せ最適化問題は Ising モデルの基底状態探索として表現できることを考えると、Ising モデルの基底状態を効率的に探索できる方法は大きな意義をもつ。さらに、QA は従来の最適化手法とは全く異なる方法で局所最適解から抜け出すため、従来手法が苦手とする問題で D-Wave マシンが威力を発揮するのではないかと期待するのは自然な流れと言える。しかしながら、D-Wave マシンは取り扱える問題に強い制約があるため、解きたい問題を直接取り扱うのは現実的ではない。そこで、現在活発に研究されているのが従来の最適化手法と D-Wave マシンを組み合わせるハイブリッド手法である。本論文の前半では、ハイブリッド手法で不可欠となる部分問題の埋め込みアルゴリズムと整数最適化問題の効率的な分割方法を提案し、提案手法を用いることで高精度な解を効率的に得られることを確認した。本論文の後半では QA の高速化について理論的に検討しており、主に統計力学的な解析によって相転移の次数を求め、量子揺らぎの種類や one-hot 表示の工夫による QA の性能変化を調べている。以下では、それぞれの章について簡潔にまとめていく。

第 1 章では、本論文の背景と目的を述べた。

第 2 章では QA の理論的な概要を述べ、基本的な組合せ最適化問題を Ising モデルの基底状態探索として表現する方法を説明した。多くの組合せ最適化問題が Ising モデルの基底状態探索として表現できるという事実は、Ising モデルベースの最適化に特化したマシンの有用性を支える一つの根拠となっている。また、Ising モデルの基底状態探索の難しさについて、スピングラス理論の観点から簡単に説明した。

第 3 章では、D-Wave マシンの概要と制約について説明した。また、部分問題の埋め込みアルゴリズムに対する要件を検討するにあたって考慮しなければならない要素として、D-Wave マシンの将来的な発展についても簡単に説明されている。

第 4 章では、ハイブリッド手法で不可欠となる埋め込みアルゴリズムとして、部分問題サイズと処理時間を両立したアルゴリズムを提案した。提案アルゴリズムは将来的なハードウェアグラフの変更に対して柔軟に対応できるようになっており、処理時間の qubit 数依存性も $O(N_q)$ 程度に抑えられているため、将来的に D-Wave マシンが発展していった場合でも有効なアルゴリズムになり得ると考えられる。また、提案アルゴリズムを用いて大きな部分問題を埋め込むことで、完全グラフの埋め込みを用いた場合に対して高精度な解を効率的に得られるようになることも確認した。部分問題の埋め込みに特化して処理時

間を低減したアルゴリズムは従来にない新しい考え方であり、本研究成果を契機としてハイブリッド手法に適した多様な埋め込みアルゴリズムが研究されていくことが期待される。

第5章では、第4章で提案したアルゴリズムを発展させ、one-hot 表示した整数最適化問題から有効な部分問題を抜き出す方法を提案した。D-Wave マシンが直接取り扱えるのは2値変数であるが、多くの実問題が整数変数で定義されることを考えると、大規模な整数最適化問題を効率的に解く方法は重要な意味をもつ。本研究では整数分割と2値分割を提案し、一般的に解くのが難しいとされるフラストレーションを含む問題で、ランダム分割に対して提案手法の解精度が高くなることを確認した。第4章と第5章の成果によって、D-Wave マシンを用いて大規模な整数最適化問題を効率的に解くための基本的な枠組みを構築できたと考えている。

第6章の前半では、QA における効率的なスケジューリングを断熱定理に基づいて提案し、断熱的な時間発展を実現するために必要なアニーリング時間を低減できることを示した。それと同時にスケジューリングによる高速化の限界も認識することができ、エネルギーギャップが指数関数的に閉じる場合には、アニーリング時間を多項式的な増加に抑えることは一般的には難しいということが分かった。さらに、スケジューリングの工夫による高速化を実現するためには以下のハードルを越えなければならない。

- 高エネルギーの励起状態の固有値と固有ベクトルまで求める必要がある
- スケジューリングの微妙なずれに対して、QA 性能が悪化してしまう

これらのことを考慮すると、一般的な問題でスケジューリングの工夫による高速化を達成するのは難しく、第7章や第8章で議論するようなエネルギーギャップを広げる方法を検討していく方が建設的であると考えられる。本章の後半では、マスター方程式と虚時間シュレーディンガー方程式の関係に着目して、SA における効率的なスケジューリングについて考察した。QA-IT では励起状態の指数関数的な減衰を利用するのが効率的であることが分かり、この結果から SA では温度の減少速度を徐々に小さくしていくのが良いという予想がたてられる。

第7では、XX 量子揺らぎの導入による QA 性能の変化を解析的に調べた。SA における揺らぎの導入方法は温度の利用以外にないが、QA では多種多様な揺らぎを導入することができる。先行研究では1次相転移が発生するモデルに対して全結合反強磁性 XX 相互作用を導入していたが、本論文では2次相転移が発生するモデルに対して反強磁性と強磁性の全結合 XX 相互作用を印可したときの QA 性能を解析的に調べた。特に、強磁性と反強磁性の XX の相互作用の違いに関しては、数値計算によって調べた先行研究はあるが、解析計算によって調べた例はない。具体的なモデルとしては1次元 Ising モデルと1次元 XY モデルを採用し、両方のモデルで全結合強磁性 XX 相互作用を加えた場合に1次相転移が発生することが分かった。一方で、全結合反強磁性 XX 相互作用を導入した場合は、1次元 Ising モデルで2次相転移が消失し、1次元 XY モデルでは臨界振幅が小さくなるという結果が得られた。この結果は、全結合強磁性 XX 相互作用を用いると QA 性能が悪化するのに対して、全結合反強磁性 XX 相互作用を導入すると QA 性能が改善されることを示唆している。強磁性 XX 相互作用は x 方向の秩序を強める働きをするため相転移点における横磁化の変化が激しくなるのに対して、反強磁性 XX 相互作用を導入すると x 方向の秩序を弱める働きをするため相転移点の変化が緩やかになるというのが、強磁性と反強磁

性の XX 相互作用の違いに対する定性的な理解である．以上の結果から，QA 性能を改善するためには，一般的に反強磁性 XX 相互作用の方が望ましいと予想される．

第 8 章では，Ising モデルベースで整数最適化問題を解く際の高速解法を提案した．提案手法は one-hot 表示をベースに考えられたものであり，half-hot 制約下での最適化を繰り返して整数最適化問題を解く．全結合強磁性 Potts モデルの基底状態探索に関しては，half-hot 制約下での最適化の繰り返しによって最適解に到達できることを示すことができ，one-hot 制約下で発生する 1 次相転移を回避できることも解析的に確認した．しかしながら，Potts グラスモデル等の一般的なモデルに対して正しい最適解に到達できることは証明できていない．一般的な問題に対する提案手法の有用性を示すのは，今後の課題として残っている．

9.2 今後の展望

まず，D-Wave マシンのグラフ構造はキメラグラフからペガサスグラフに更新される予定であるため，第 4 章で提案したアルゴリズムの予約制度をペガサスグラフに合わせて修正する必要がある．また，本研究では与えられたグラフ構造における埋め込みアルゴリズムを検討してきたが，今後は埋め込みアルゴリズムの観点から，埋め込み処理の負荷が小さくなるグラフ構造を検討していきたいと考えている．マイナー埋め込み処理は D-Wave マシンのポテンシャルを引き出す際のボトルネックとなっているため，物理実装の容易性と埋め込み処理の負荷を両立したグラフ構造を検討していくことは重要な課題である．さらに，第 4 章と第 5 章の解精度評価では山登り法をベースとしたハイブリッド手法を用いていたが，今後は様々な最適化手法との組合せを視野に入れて高効率なハイブリッド手法を検討していく必要があると考えている．

第 8 章で提案した手法は多くの課題を残しており，特に一般的な整数最適化問題における最適解への収束を証明する必要がある．これを証明することができれば，提案手法は様々な方向に発展させていける可能性がある．まず，half-hot 制約下での最適化は選択枝を半分に絞っていく処理だと解釈できるため，この解釈のもとに一般化すれば Ising モデルベースの最適化のみならず汎用的な最適化手法として発展させることができる．さらに，Potts モデルの基底状態と Ising モデルの基底状態の性質を関連させて議論することも可能となるかもしれない．今後は提案手法の収束性を証明し，良好な結果が得られれば提案手法の適用範囲を広げていきたいと考えている．

付 録 A one-hot 表示におけるパラメータ λ の決め方

3次元 Potts モデルのハミルトニアンを one-hot 表示を用いて Ising 表現した際のパラメータ λ の決め方を説明する。Potts モデルのハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{potts}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \delta(S_i, S_j + \Delta_{ij}), \quad (\text{A.1})$$

で与えられる。ここで、 $S_i \in (1, 2, \dots, Q)$, J_{ij} は整数変数 S_i と S_j の相互作用を、 δ はクロネッカーのデルタを、 $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は 3次元格子上で隣接する整数変数ペアに対する和を表す。このハミルトニアンを one-hot 表示すると

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sum_{q=1}^Q x_{qi} x_{q-\Delta_{ij},j} + \lambda \sum_{i=1}^N \left(\sum_{q=1}^Q x_{qi} - 1 \right)^2, \quad (\text{A.2})$$

となる。ここで、 $x_{qi} \in (0, 1)$ であり、 N は整数変数の数を表す。

A.1 λ の下限を求める基本的な考え方

まず、式 (A.1) の基底状態が事前に分っている仮想的な状況において、 λ の下限を求めるための考え方を示す。ここで、以降の説明で必要となる量を以下のように定義する。

- $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\})$: 式 (A.2) の第一項
- $\mathcal{H}_{\text{pen}}(\{x_{qi}\})$: 式 (A.2) の第二項
- $\{x_{qi}\}_{\text{opt}}$: one-hot 制約を満たす組合せの中で $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\})$ を最小化するもの
- $\{x_{qi}\}_{\text{all}}$: 全ての組合せの中で $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\})$ を最小化するもの

$\{x_{qi}\}_{\text{opt}}$ は解きたい問題の最適解であり、 $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{opt}})$ は解きたい問題の評価関数の最小値を表す。また、 $\{x_{qi}\}_{\text{all}}$ は制約を満たさない組合せを含めた広い範囲で $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\})$ を最小化するので、明らかに $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{all}}) \leq \mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{opt}})$ となる。最も簡単に λ の下限を決められるのは $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{all}}) = \mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{opt}})$ の時で、この場合は $\lambda > 0$ とすれば式 (A.1) と式 (A.2) の基底状態は一致する。なぜなら、 $\{x_{qi}\}_{\text{opt}}$ は式 (A.2) の第一項と第二項を同時に最小化するため、one-hot 制約を満たさない組合せは式 (A.2) の基底状態にはなり得ないからである。一方で、 $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{all}}) < \mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{opt}})$ の場合は、 λ の下限 λ_{\min} は

0 より大きい有限の値となる． λ の下限を求めるためには， $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}) < \mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{opt}})$ を満たす全ての組合せに対して，

$$\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{opt}}) < \mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}) + \mathcal{H}_{\text{pen}}(\{x_{qi}\}) \quad (\text{A.3})$$

を満たすように λ_{\min} を決めなければならない．強磁性 Potts モデルと反強磁性 Potts モデルは自明な基底状態をもつため，この考え方をういて λ の下限を求めることができる．

A.2 反強磁性 Potts モデルに対する λ の下限

反強磁性 Potts モデルでは $J_{ij} = -|J| < 0, \Delta_{ij} = 0$ と設定される．元の Potts モデルのハミルトニアンと one-hot 表示したハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{potts}} = |J| \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(S_i, S_j), \quad (\text{A.4})$$

$$\mathcal{H}_0 = |J| \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{q=1}^Q x_{qi} x_{qj} + \lambda \sum_{i=1}^N \left(\sum_{q=1}^Q x_{qi} - 1 \right)^2, \quad (\text{A.5})$$

となる．式 (A.4) は自明な基底状態をもっており，例えば $S_i = 1$ となっている整数変数の隣接変数を $\{S_j = 2 | j \in \partial i\}$ とし， $S_j = 2$ となっている整数変数の隣接変数を $\{S_i = 1 | i \in \partial j\}$ とするればよい．ここで， $\partial i(\partial j)$ は整数変数 $S_i(S_j)$ に隣接する整数変数の添え字の集合を表す．3次元格子状では上記のように整数変数を設定することが可能である．この場合は，全ての隣接する整数変数のペアで $\delta(S_i, S_j) = 0$ となるので，

$$\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{opt}}) = 0, \quad (\text{A.6})$$

である．一方で， $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\})$ の和に含まれる各項は 0 以上なので，one-hot 制約を無視したとしても

$$\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{all}}) = 0, \quad (\text{A.7})$$

となる．以上より， $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{all}}) = \mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{opt}})$ となっているため， $\lambda_{\min} = 0$ であることが分かる．この結果を利用し，第 5 章の解精度評価では $\lambda = 1.0$ と設定した．

A.3 強磁性 Potts モデルに対する λ の下限

強磁性 Potts モデルでは $J_{ij} = J > 0, \Delta_{ij} = 0$ と設定される．元の Potts モデルのハミルトニアンと one-hot 表示したハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{potts}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(S_i, S_j), \quad (\text{A.8})$$

$$\mathcal{H}_0 = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{q=1}^Q x_{qi} x_{qj} + \lambda \sum_{i=1}^N \left(\sum_{q=1}^Q x_{qi} - 1 \right)^2, \quad (\text{A.9})$$

となる．強磁性 Potts モデルも自明な基底状態をもっており，例えば全ての整数変数に対して $S_i = 1$ と設定すればよい．この場合は，全ての隣接する整数変数のペアで $\delta(S_i, S_j) = 1$ となるので，

$$\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{opt}}) = -3N, \quad (\text{A.10})$$

である．一方で，one-hot 制約を無視した場合は，全てのブール変数を $x_{qi} = 1$ とすることで $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\})$ を最小化することができ，

$$\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{all}}) = -3QN, \quad (\text{A.11})$$

となる． $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{all}}) < \mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{opt}})$ となっているため， λ_{\min} は式 (A.3) を満たすように決める必要がある．ここで注意しなければならないのは， $\{x_{qi}\}_{\text{all}}$ を式 (A.3) に代入した不等式から λ_{\min} が決まるわけではないということである． λ_{\min} を求めるためには， $\{x_{qi} = 1 | q = 1, 2, \forall i\}$ となり， $\{x_{q'i} = 0 | q' \neq 1, 2, \forall i\}$ となる組合せを用いる必要がある．この組合せを $\{x_{qi}\}_{\text{LB}}$ とおくと，

$$\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{LB}}) = -6N, \quad (\text{A.12})$$

$$\mathcal{H}_{\text{pen}}(\{x_{qi}\}_{\text{LB}}) = \lambda N, \quad (\text{A.13})$$

となる．式 (A.10)，(A.12)，(A.13) を式 (A.3) に代入すると， λ の下限として

$$\frac{\lambda_{\min}}{J} = 3, \quad (\text{A.14})$$

を得る．この結果を受けて，第 5 章の解精度評価では $\lambda = 3.3$ と設定した．

最後に， $\{x_{qi}\}_{\text{all}}$ を用いた場合に間違った下限が得られることを示す．ペナルティ項に $\{x_{qi}\}_{\text{all}}$ を代入すると

$$\mathcal{H}_{\text{pen}}(\{x_{qi}\}_{\text{all}}) = \lambda(Q-1)^2 N, \quad (\text{A.15})$$

となる．式 (A.10)，(A.11)，(A.15) を式 (A.3) を代入すると，間違った下限 λ'_{\min} として

$$\frac{\lambda'_{\min}}{J} = \frac{3}{Q-1}, \quad (\text{A.16})$$

が得られる． $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{all}}) < \mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{LB}})$ であるにも関わらず， $\{x_{qi}\}_{\text{all}}$ を用いると間違った下限が得られる理由として，ペナルティ項が 2 次式になっていることが挙げられる．one-hot 制約からのズレが大きくなると，ペナルティ項は急激に増加する．これに起因して，制約から大きく外れた組合せを用いて下限を計算すると λ_{\min} を過小評価してしまうことになる．

A.4 Potts グラスモデルに対する λ の下限

Potts グラスモデルでは J_{ij} は ± 1 が 50% の確率でランダムに割当てられ， $\Delta_{ij} = 0$ と設定される．元の Potts モデルのハミルトニアンと one-hot 表示したハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{potts}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \delta(S_i, S_j), \quad (\text{A.17})$$

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sum_{q=1}^Q x_{qi} x_{qj} + \lambda \sum_{i=1}^N \left(\sum_{q=1}^Q x_{qi} - 1 \right)^2, \quad (\text{A.18})$$

となる．Potts グラスモデルでは $\{x_{qi}\}_{\text{opt}}$ や $\{x_{qi}\}_{\text{all}}$ を事前に知ることはできないが，緩い下限であれば求めることができる．強磁性 Potts モデルでの議論から分かるように，one-hot 制約を破ることで $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}) < \mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{opt}})$ とできる場合に，ペナルティ項とのバランスを鑑みて λ_{\min} を求めればよい．また，ペナルティ項が 2 次式になっていることから，one-hot 制約から少しズレた組合せが重要であることも先程の計算で明らかになっている．そこで，以降では以下の 2 つの制約の破り方をしたときのエネルギー変化を考察する．

- zero-hot: S_i に割当てられた全てのブール変数で $x_{qi} = 0$ となる破り方
- two-hot: S_i に割当てられたブール変数の中で $x_{qi} = 1$ を 2 個含む破り方

それぞれの破り方をした組合せを $\{x_{qi}\}_{\text{zero}}, \{x_{qi}\}_{\text{two}}$ とおく．反強磁性 Potts モデルの $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\})$ の各項が 0 以上であることを考えると，反強磁性相互作用する整数変数ペアの局所エネルギーは zero-hot によって下がり得る．一方で，強磁性 Potts モデルの $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\})$ の各項が 0 以下であることを考えると，強磁性相互作用する整数変数ペアの局所エネルギーは two-hot によって下がり得る．つまり，それぞれの制約の破り方でエネルギーが下がり得る相互作用の種類は異なる．このため，ある整数変数 S_i に着目したときに，制約を破ることで S_i に関連する局所エネルギーを最も大きく減少させることができるのは，隣接変数 $\{S_j | j \in \partial i\}$ との相互作用が全て強磁性か反強磁性に偏っている場合である．緩い下限を求めるだけであれば，全ての相互作用が強磁性か反強磁性に偏った場合に限ってエネルギーの変化を計算すればよい．

まず， S_i が全ての隣接変数 $\{S_j | j \in \partial i\}$ と強磁性相互作用している場合について説明する．この場合は two-hot を考えれば良く，two-hot では整数変数 S_i の値を 2 つ選択していることに相当する．two-hot によって S_i に関連する局所エネルギーを最も下げられる状況を図 A.1 に示す．図 A.1(a) に示すように， $\{x_{qi}\}_{\text{opt}}$ において S_i に隣接する整数変数のうちで 3 個が $S_j = 1$ となっており，残りの 3 個が $S_j = 2$ となっているとする．one-hot 制約下で S_i に関連する局所エネルギーを最小化するためには $S_i = 1$ か 2 とすればよい．一方で，two-hot によって $S_i = 1$ と 2 を同時に選ぶことにすると， $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\})$ を $-3J$ だけ下げることができる [図 A.1(a) 参照]．このことから， S_i を two-hot とした場合の $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{two}})$ は

$$\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{two}}) = \mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{opt}}) - 3J, \quad (\text{A.19})$$

となる．また， S_i を two-hot とした場合のペナルティ項は

$$\mathcal{H}_{\text{pen}}(\{x_{qi}\}_{\text{two}}) = \lambda, \quad (\text{A.20})$$

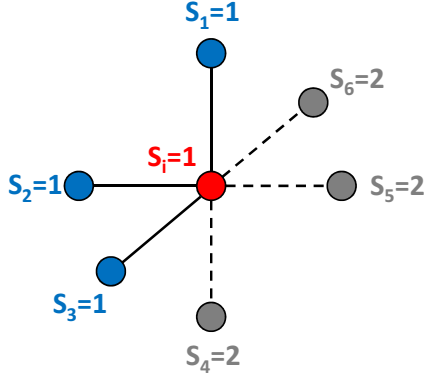
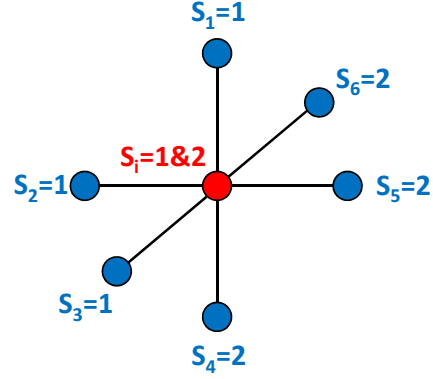
となる．式 (A.19) と (A.20) を式 (A.3) に代入すると， λ に対する緩い下限 $\tilde{\lambda}_{\min}$ として

$$\frac{\tilde{\lambda}_{\min}}{J} = 3, \quad (\text{A.21})$$

が得られる．

次に， S_i が全ての隣接変数 $\{S_j | j \in \partial i\}$ と反強磁性相互作用している場合について説明する．この場合は zero-hot を考えれば良く，zero-hot は整数変数の値が選ばれないことに相当する．zero-hot によって S_i に関連する局所エネルギーを最も下げられる状況を図 A.2 に示す．図 A.2(a) に示すように， $\{x_{qi}\}_{\text{opt}}$ において S_i に隣接する整数変数は $S_i = 1$ から

(a)one-hot制約下の基底状態

(b)two-hotによる $\mathcal{H}_{\text{cost}}$ の低下

-----: 局所エネルギーが最大化されている相互作用

図 A.1: two-hot による $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\})$ の低下

4 のバラバラな値になっているとする．one-hot 制約下で S_i に関連する局所エネルギーを最小化するためには $S_i = 1$ か 2 とすればよい．一方で，zero-hot によって S_i の値を選択しないことにすると， $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\})$ を $-J$ だけ下げることができる [図 A.2(b) 参照]．このことから， S_i を zero-hot とした場合の $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{zero}})$ は

$$\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{zero}}) = \mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\}_{\text{opt}}) - J, \quad (\text{A.22})$$

となる．また， S_i を zero-hot とした場合のペナルティ項は

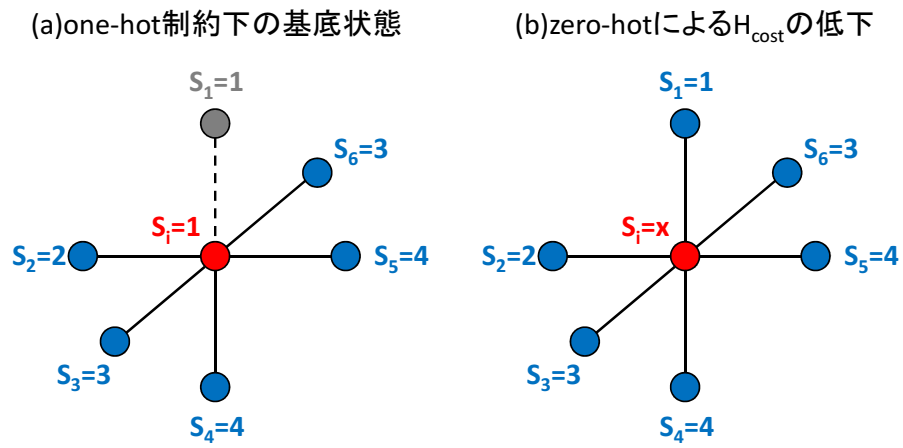
$$\mathcal{H}_{\text{pen}}(\{x_{qi}\}_{\text{zero}}) = \lambda, \quad (\text{A.23})$$

となる．式 (A.22) と (A.23) を式 (A.3) に代入すると， λ に対する緩い下限 $\tilde{\lambda}_{\min}$ として

$$\frac{\tilde{\lambda}_{\min}}{J} = 1, \quad (\text{A.24})$$

が得られる．

以上より，Potts グラスモデルでは $\lambda > 3$ と設定すれば十分である．また，Potts ゲージグラスについても同様の議論によって $\lambda > 3$ とすればよいことが分かる．この結果を受けて，第 5 章の解精度評価では，両方のモデルに対して $\lambda = 3.3$ と設定した．ここで得られた下限は強磁性 Potts モデルと一致しているが，フラストレーションが存在する Potts グラスモデルや Potts ゲージグラスモデルでは，制約を破ることによる $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\})$ の減少幅が強磁性 Potts モデルに対して小さくなるので，問題の構造を利用すればさらに小さい下限を導き出せる．



-----: 局所エネルギーが最大化されている相互作用

図 A.2: zero-hot による $\mathcal{H}_{\text{cost}}(\{x_{qi}\})$ の低下

付 録 B グローバー問題の QA-IT における $\Delta\phi_{10}(u)$ の近似

線形制御における位相 $\phi_{10}(u)$ に対する近似式 (6.201) を導く方法を示す．式 (6.88), (6.153), (6.158) より,

$$\Delta\phi_{10}(u) = \int_0^u du' \sqrt{1 - 4 \left(1 - \frac{1}{N}\right) u'(1-u')}, \quad (\text{B.1})$$

である．以下の積分公式:

$$\int dx \sqrt{x^2 + a^2} = \frac{1}{2} \left[x \sqrt{x^2 + a^2} + a^2 \log \left(x + \sqrt{x^2 + a^2} \right) \right] + \text{const.}, \quad (\text{B.2})$$

を利用すると,

$$\begin{aligned} \Delta\phi_{10}(u) &= \frac{1}{2} \left(u - \frac{1}{2} \right) \Delta\varepsilon_{10}(u) + \frac{1}{4} \\ &\quad + \frac{1}{4} \sqrt{\frac{1}{N(N-1)}} \log \left[\left(u - \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{N}{N-1}} \Delta\varepsilon_{10}(u) \right] \\ &\quad - \frac{1}{4} \sqrt{\frac{1}{N(N-1)}} \log \left[-\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{N}{N-1}} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

が得られる．第三項の \log の中身を

$$g(u) \equiv \left(u - \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{N}{N-1}} \Delta\varepsilon_{10}(u), \quad (\text{B.4})$$

とおき, 微分を計算すると

$$\frac{g(u)}{du} = 1 + 2 \sqrt{\frac{N-1}{N}} \left(u - \frac{1}{2} \right) \frac{1}{\Delta\varepsilon_{10}(u)}, \quad (\text{B.5})$$

となる．エネルギーギャップは

$$\Delta\varepsilon_{10}(u) = 2 \sqrt{\frac{N-1}{N}} \sqrt{\left(u - \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{1}{4} \frac{1}{N-1}}, \quad (\text{B.6})$$

$$\geq 2 \sqrt{\frac{N-1}{N}} \left| u - \frac{1}{2} \right|, \quad (\text{B.7})$$

を満たすので, $g(u) > 0$ となる. このことから, $0 < u < 1$ における $g(u)$ の最大値 g_{\max} と最小値 g_{\min} は

$$g_{\max} = \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{\frac{N}{N-1}} \right), \quad (\text{B.8})$$

$$g_{\min} = \frac{1}{4} \frac{1}{N-1}, \quad (\text{B.9})$$

となり, 式 (B.3) の第三項と四項の和を

$$\begin{aligned} h(u) \equiv & \frac{1}{4} \sqrt{\frac{1}{N(N-1)}} \log \left[\left(u - \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{N}{N-1}} \Delta \varepsilon_{10}(u) \right] \\ & - \frac{1}{4} \sqrt{\frac{1}{N(N-1)}} \log \left[-\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{N}{N-1}} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

とおくと, $N \gg 1$ で

$$h_{\min} \leq h(u) \leq h_{\max}, \quad (\text{B.11})$$

$$h_{\max} \simeq -\frac{1}{4N} \log \left(\frac{1}{4N} \right), \quad (\text{B.12})$$

$$h_{\min} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{1}{N(N-1)}} \log \left[\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{\frac{N}{N-1}} \right) \right], \quad (\text{B.13})$$

が得られる. h_{\max} と h_{\min} は $N \rightarrow \infty$ で 0 に収束するため, $h(u)$ を無視して

$$\Delta \phi_{10}(u) \simeq \frac{1}{2} \left(u - \frac{1}{2} \right) \Delta \varepsilon_{10}(u) + \frac{1}{4}, \quad (\text{B.14})$$

と近似する.

付 録 C 鈴木-トロッター展開

C.1 QA-TMF の有効ハミルトニアン

本文の式 (7.11) より, 有効ハミルトニアンは

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}(\boldsymbol{\sigma}_{\text{all}}^z) = \frac{1}{K} \sum_{\kappa=1}^K \mathcal{H}_0(\boldsymbol{\sigma}_{\kappa}^z) - \frac{1}{\beta} \sum_{\kappa=1}^K \log W'_{\kappa}(\boldsymbol{\sigma}_{\kappa}^z, \boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^z), \quad (\text{C.1})$$

$$W'_{\kappa}(\boldsymbol{\sigma}_{\kappa}^z, \boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^z) \equiv \left\langle \boldsymbol{\sigma}_{\kappa}^z \left| \exp \left(-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\boldsymbol{\sigma}}^x) \right) \right| \boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^z \right\rangle, \quad (\text{C.2})$$

で与えられる. ここで, $W'_{\kappa}(\boldsymbol{\sigma}_{\kappa}^z, \boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^z)$ はスピン配位 $\{\boldsymbol{\sigma}_{\kappa}^z, \boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^z\}$ を得る周辺化確率を表していると解釈する. 有効ハミルトニアンの具体的な形を求めるためには, $W'_{\kappa}(\boldsymbol{\sigma}_{\kappa}^z, \boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^z)$ を計算すればよい. 式 (C.2) に TMF-QA の $\hat{\mathcal{H}}_q$:

$$\hat{\mathcal{H}}_q = -\Gamma_1 \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_i^x, \quad (\text{C.3})$$

を代入し, $\hat{\sigma}_i^x$ と $\hat{\sigma}_{j \neq i}^x$ が可換であることを用いると

$$W'_{\kappa}(\boldsymbol{\sigma}_{\kappa}^z, \boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^z) = \left\langle \boldsymbol{\sigma}_{\kappa}^z \left| \prod_{i=1}^N \exp \left(\frac{\beta \Gamma_1}{K} \hat{\sigma}_i^x \right) \right| \boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^z \right\rangle, \quad (\text{C.4})$$

となる. また, $\hat{\sigma}_i^x$ が各スピンに対して独立に作用するので

$$W'_{\kappa}(\boldsymbol{\sigma}_{\kappa}^z, \boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^z) = \prod_{i=1}^N \left\langle \sigma_i^z(\kappa) \left| \exp \left(\frac{\beta \Gamma_1}{K} \hat{\sigma}_i^x \right) \right| \sigma_i^z(\kappa+1) \right\rangle, \quad (\text{C.5})$$

と変形できる. ここで, $\boldsymbol{\sigma}_{\kappa}^z \equiv \{\sigma_1^z(\kappa), \sigma_2^z(\kappa), \dots, \sigma_N^z(\kappa)\}$ とした. さらに, 式 (C.5) に含まれる指数関数に対してテーラー展開を適用し, $\hat{\sigma}_i^x$ に対して

$$(\hat{\sigma}_i^x)^n = \begin{cases} \hat{1} & n = \text{even}, \\ \hat{\sigma}_i^x & n = \text{odd}, \end{cases} \quad (\text{C.6})$$

が成り立つことを用いると

$$\exp \left(\frac{\beta \Gamma_1}{K} \hat{\sigma}_i^x \right) = \cosh \left(\frac{\beta \Gamma_1}{K} \right) + \hat{\sigma}_i^x \sinh \left(\frac{\beta \Gamma_1}{K} \right), \quad (\text{C.7})$$

と変形できる．式 (C.7) を式 (C.5) に代入すると

$$\begin{aligned}
& \left\langle \sigma_i^z(\kappa) \left| \exp \left(\frac{\beta \Gamma_1}{K} \hat{\sigma}_i^x \right) \right| \sigma_i^z(\kappa+1) \right\rangle \\
&= \left[\cosh \left(\frac{\beta \Gamma_1}{K} \right) \delta_{\sigma_i^z(\kappa), \sigma_i^z(\kappa+1)} + \sinh \left(\frac{\beta \Gamma_1}{K} \right) \delta_{\sigma_i^z(\kappa), -\sigma_i^z(\kappa+1)} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[\exp \left(\frac{\beta \Gamma_1}{K} \right) + \exp \left(-\frac{\beta \Gamma_1}{K} \right) \sigma_i^z(\kappa) \sigma_i^z(\kappa+1) \right] \\
&= e^{\beta J_T \sigma_i^z(\kappa) \sigma_i^z(\kappa+1) + C'}, \tag{C.8}
\end{aligned}$$

となる．ここで， δ はクロネッカーのデルタを表しており，

$$J_T \equiv \frac{1}{2\beta} \log \coth \left(\frac{\beta \Gamma_1}{K} \right), \tag{C.9}$$

$$C' \equiv \frac{1}{2} \log \left[\sinh \left(\frac{\beta \Gamma_1}{K} \right) \cosh \left(\frac{\beta \Gamma_1}{K} \right) \right], \tag{C.10}$$

とした．式 (C.8) を式 (C.5) に代入すると

$$W'_\kappa(\boldsymbol{\sigma}_\kappa^z, \boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^z) = \exp \left[\beta J_T \sum_{i=1}^N \sigma_i^z(\kappa) \sigma_i^z(\kappa+1) + K N C' \right] > 0, \tag{C.11}$$

が得られ，TMF-QA のハミルトニアンは確率的な解釈が可能であることが分かる．式 (C.11) を式 (C.1) に代入すると

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = -\frac{1}{K} \sum_{\kappa} \mathcal{H}_0(\boldsymbol{\sigma}_\kappa^z) - J_T \sum_{\kappa, i} \sigma_i^z(\kappa) \sigma_i^z(\kappa+1), \tag{C.12}$$

となる．

C.2 XX 相互作用を導入した場合

次に，XX 相互作用を用いた場合の $W'(\boldsymbol{\sigma}_{\text{all}}^z)$ を 2 スピン系で求める．量子揺らぎを導入するハミルトニアン $\hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\boldsymbol{\sigma}}^x)$ を

$$\hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\boldsymbol{\sigma}}^x) = -\Gamma_2 \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x, \tag{C.13}$$

として，式 (C.2) に代入し，

$$\exp \left(\frac{\beta \Gamma_2}{K} \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \right) = \cosh \left(\frac{\beta \Gamma_2}{K} \right) + \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \sinh \left(\frac{\beta \Gamma_2}{K} \right), \tag{C.14}$$

を用いると

$$W'_\kappa(\boldsymbol{\sigma}_\kappa^z, \boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^z) = \left\langle \boldsymbol{\sigma}_\kappa^z \left| \cosh \left(\frac{\beta \Gamma_2}{K} \right) + \hat{\sigma}_1^x \hat{\sigma}_2^x \sinh \left(\frac{\beta \Gamma_2}{K} \right) \right| \boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^z \right\rangle, \tag{C.15}$$

となる．行列表現の基底を $|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ の順にとって $W'(\boldsymbol{\sigma}_{\text{all}}^z)$ を行列表示すると

$$W'_{\kappa}(\boldsymbol{\sigma}_{\kappa}^z, \boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^z) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \sinh\left(\frac{\beta\Gamma_2}{K}\right) \\ 0 & 1 & \sinh\left(\frac{\beta\Gamma_2}{K}\right) & 0 \\ 0 & \sinh\left(\frac{\beta\Gamma_2}{K}\right) & 1 & 0 \\ \sinh\left(\frac{\beta\Gamma_2}{K}\right) & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{C.16})$$

となる． $W'_{\kappa}(\boldsymbol{\sigma}_{\kappa}^z, \boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^z)$ はスピン配位 $\{\boldsymbol{\sigma}_{\kappa}^z, \boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^z\}$ を得る確率として解釈したいのであるが，反強磁性の XX 相互作用 ($\Gamma_2 < 0$) では確率が負になる $\boldsymbol{\sigma}_{\kappa}^z$ と $\boldsymbol{\sigma}_{\kappa+1}^z$ の組合せが存在する．以上のことから，強磁性の XX 相互作用 ($\Gamma_2 > 0$) の場合は Stochastic Hamiltonian であり，反強磁性の XX 相互作用 ($\Gamma_2 < 0$) の場合は Non-stochastic Hamiltonian となることが分かる．

付 録 D 1次元 Ising モデルと XY モデルの 分配関数の導出

D.1 1次元強磁性 Ising モデルの分配関数

1次元横磁場 Ising モデルのハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}} = -J \sum_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z - \Gamma \sum_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^x, \quad (\text{D.1})$$

で与えられる。ただし、 $\hat{\sigma}_{N+1}^{z,x} = \hat{\sigma}_1^{z,x}$ の周期境界条件を課す。ここでは、以下の式で定義される Majorana 場:

$$\hat{\psi}_1(j \leq N) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{\sigma}_1^x \cdots \hat{\sigma}_{j-1}^x \hat{\sigma}_j^y, \quad (\text{D.2})$$

$$\hat{\psi}_2(j \leq N) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{\sigma}_1^x \cdots \hat{\sigma}_{j-1}^x \hat{\sigma}_j^z, \quad (\text{D.3})$$

を導入して分配関数を計算する方法を示す。スピン演算子の交換関係を用いると、Majorana 場は以下の反交換関係:

$$[\hat{\psi}_\alpha(j), \hat{\psi}_\beta(k)]_+ = \delta_{\alpha\beta} \delta_{jk}, \quad (\text{D.4})$$

を満たすことが分かる。ここで、 $[\hat{A}, \hat{B}]_+ \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ であり、 δ はクロネッカーのデルタを表す。式 (D.2) と (D.3) より、

$$\hat{\psi}_1(j) \hat{\psi}_2(j+1) = -\frac{i}{2} \hat{\sigma}_j^z \hat{\sigma}_{j+1}^z, \quad (\text{D.5})$$

$$\hat{\psi}_1(j) \hat{\psi}_2(j) = \frac{i}{2} \hat{\sigma}_j^x, \quad (\text{D.6})$$

が成り立つので、ハミルトニアン [式 (D.1)] は Majorana 場を用いて

$$\hat{\mathcal{H}} = -2iJ \sum_{j=1}^N \hat{\psi}_1(j) \hat{\psi}_2(j+1) + 2i\Gamma \sum_{j=1}^N \hat{\psi}_1(j) \hat{\psi}_2(j), \quad (\text{D.7})$$

と書くことができる。第一項の $j = N$ の場合については、

$$\hat{\psi}_1(N) \hat{\psi}_2(1) = \frac{i}{2} \left(\prod_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^x \right) \hat{\sigma}_N^z \hat{\sigma}_1^z, \quad (\text{D.8})$$

となることを考慮すると、以下の境界条件:

$$\hat{\psi}_2(N+1) = -\hat{\sigma}_{\text{prod}}^x \hat{\psi}_2(1), \quad (\text{D.9})$$

$$\hat{\sigma}_{\text{prod}}^x \equiv \prod_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^x, \quad (\text{D.10})$$

を課せば、式 (D.7) を用いて式 (D.1) の周期境界条件を含めて表現できることが分かる。 $\hat{\sigma}_{\text{prod}}^x = +1$ の場合は $\hat{\psi}_2(j)$ に反周期境界条件を課すことになり、

$$\hat{\psi}_\alpha(j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q \geq 0} \left[e^{iqj} \hat{C}_\alpha(q) + e^{-iqj} \hat{C}_\alpha^\dagger(q) \right], \quad (\text{D.11})$$

$$q = \frac{1}{N}\pi, \frac{3}{N}\pi, \dots, \frac{N-3}{N}\pi, \frac{N-1}{N}\pi, \quad (\text{D.12})$$

とフーリエ変換できる。ここで、 $\alpha = 1, 2$ であり、 $\hat{\psi}_1(j)$ に対しては $\hat{\psi}_2(j)$ と同じ周期境界条件を課した。また、 $\hat{C}_\alpha(q), \hat{C}_\alpha^\dagger(q)$ に対してフェルミ演算子と同じ反交換関係:

$$[\hat{C}_\alpha(q), \hat{C}_\beta^\dagger(q')]_+ = \delta_{\alpha\beta} \delta_{qq'}, \quad (\text{D.13})$$

$$[\hat{C}_\alpha(q), \hat{C}_\beta(q')]_+ = [\hat{C}_\alpha^\dagger(q), \hat{C}_\beta^\dagger(q')]_+ = 0, \quad (\text{D.14})$$

を課せば、式 (D.4) を満たすようになる。一方で、 $\hat{\sigma}_{\text{prod}}^x = -1$ の場合は周期境界条件を課すことになり、

$$\hat{\psi}_\alpha(j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q \geq 0} \left[e^{iqj} \hat{C}_\alpha(q) + e^{-iqj} \hat{C}_\alpha^\dagger(q) \right], \quad (\text{D.15})$$

$$q = 0, \frac{2}{N}\pi, \dots, \frac{N-2}{N}\pi, \pi, \quad (\text{D.16})$$

とフーリエ変換できる。式 (D.1) のハミルトニアンは

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\sigma}_{\text{prod}}^x] = 0, \quad (\text{D.17})$$

を満たすので、シュレーディンガー方程式による時間発展で $\hat{\sigma}_{\text{prod}}^x$ は保存する。QA の初期条件では $\hat{\sigma}_{\text{prod}}^x = +1$ と設定するので、反周期境界条件を採用して $\beta \rightarrow \infty$ の極限を取ればよい（ただし、以降の自由エネルギーの計算では周期境界条件による違いは表れてこない）。式 (D.11) を式 (D.7) に代入すると、

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = & -2iJ \sum_{q \geq 0} \left[e^{-iq} \hat{C}_1(q) \hat{C}_2^\dagger(q) + e^{iq} \hat{C}_1^\dagger(q) \hat{C}_2(q) \right] \\ & + 2i\Gamma \sum_{q \geq 0} \left[\hat{C}_1(q) \hat{C}_2^\dagger(q) + \hat{C}_1^\dagger(q) \hat{C}_2(q) \right], \end{aligned} \quad (\text{D.18})$$

となる。ハミルトニアンに含まれるフェルミ演算子の 2 次項は異なる q で可換なので、分配関数 Z は

$$Z = \text{Tr} \prod_{q \geq 0} \hat{V}(q), \quad (\text{D.19})$$

$$\begin{aligned} \hat{V}(q) \equiv & \exp \left[2i\beta J \left(e^{-iq} \hat{C}_1(q) \hat{C}_2^\dagger(q) + e^{iq} \hat{C}_1^\dagger(q) \hat{C}_2(q) \right) \right. \\ & \left. - 2i\beta\Gamma \left(\hat{C}_1(q) \hat{C}_2^\dagger(q) + \hat{C}_1^\dagger(q) \hat{C}_2(q) \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{D.20})$$

と q 毎に分離することができ、 4×4 行列 $\hat{V}(q)$ の固有値が分かれば分配関数を計算できることになる。フェルミ粒子の数演算子 $\hat{C}_1^\dagger(q)\hat{C}_1(q)$ と $\hat{C}_2^\dagger(q)\hat{C}_2(q)$ の固有状態を $|n_1, n_2\rangle$ とおき、 $\hat{V}(q)$ の肩を行列表示する。ここで、 $|n_1, n_2\rangle$ は

$$\hat{C}_1^\dagger(q)\hat{C}_1(q)|n_1, n_2\rangle = n_1|n_1, n_2\rangle, \quad (\text{D.21})$$

$$\hat{C}_2^\dagger(q)\hat{C}_2(q)|n_1, n_2\rangle = n_2|n_1, n_2\rangle, \quad (\text{D.22})$$

を満たす。 $|00\rangle, |11\rangle, |01\rangle, |10\rangle$ の順番に基底をとって $\hat{V}(q)$ の肩を行列表示すると

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2i\beta(Je^{iq} - \Gamma) \\ 0 & 0 & -2i\beta(Je^{-iq} - \Gamma) & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{D.23})$$

となり、固有値は 2 重縮退した 0 と $\pm 2\beta\sqrt{J^2 + \Gamma^2 - 2J\Gamma \cos q}$ であることが分かる。この結果と式 (D.19) より、

$$Z = \prod_{q \geq 0} \left(2 \cosh \beta \sqrt{J^2 + \Gamma^2 - 2J\Gamma \cos q} \right)^2, \quad (\text{D.24})$$

が得られる。1 スピンあたりの自由エネルギーは

$$-\beta f = \frac{2}{N} \sum_{q \geq 0} \log 2 \cosh \beta \sqrt{J^2 + \Gamma^2 - 2J\Gamma \cos q}, \quad (\text{D.25})$$

であり、 $N \rightarrow \infty$ として和を積分に書き換えると

$$-\beta f = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dq \log 2 \cosh \beta \sqrt{J^2 + \Gamma^2 - 2J\Gamma \cos q}, \quad (\text{D.26})$$

が得られる。 $\Gamma = -h'_q(m_x)$ とすれば式 (7.40) となる。

$\beta \rightarrow \infty$ の自由エネルギーは、

$$f = -\frac{2(J + \Gamma)}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\omega \sqrt{1 - k^2 \cos^2 \omega}, \quad (\text{D.27})$$

$$k \equiv \frac{4J\Gamma}{(J + \Gamma)^2}, \quad (\text{D.28})$$

となる。自由エネルギーに含まれる積分は第二種の完全楕円積分であり、 $\Gamma/J = 1 (k = 1)$ において特異性をもつ。 $\Gamma/J = 1$ 付近の振る舞いを調べるため、

$$\frac{\Gamma}{J} = 1 + \epsilon, \quad (\text{D.29})$$

とおくと、

$$k \simeq 1 - \frac{\epsilon^2}{4}, \quad (\text{D.30})$$

と書ける．式 (D.29) と (D.30) を式 (D.27) に代入し，特異性は被積分関数が 0 になるところで発生することを考慮して $\cos \omega$ を $\omega = 0$ で展開すると

$$\begin{aligned}
f &\simeq -\frac{2(J+\Gamma)}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\omega \sqrt{1 - \left(1 - \frac{\varepsilon^2}{4}\right) \left(1 - \frac{\omega^2}{2}\right)} \\
&\simeq -\frac{\sqrt{2}(J+\Gamma)}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\omega \sqrt{\omega^2 + \frac{\varepsilon^2}{2}}, \\
&= \frac{1}{2} \left[\omega \sqrt{\omega^2 + \frac{\varepsilon^2}{2}} + \frac{\varepsilon^2}{2} \log \left(\omega + \sqrt{\omega^2 + \frac{\varepsilon^2}{2}} \right) \right]_{\omega=0}^{\omega=\pi/2}, \\
&\sim \varepsilon^2 \log |\varepsilon|,
\end{aligned} \tag{D.31}$$

となり，式 (7.45) が得られる．

D.2 1次元 XY モデルの分配関数

1次元 XY モデルのハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{J}{2} \sum_{j=1}^N \left(\hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x + \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y \right) - \Gamma \sum_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^z, \tag{D.32}$$

で与えられる．ここで， $\hat{\sigma}_{N+1}^{x,y,z} = \hat{\sigma}_1^{x,y,z}$ の周期境界条件を課す．以降では，1次元 XY モデルの分配関数を計算する 2つの方法を示す．

D.2.1 Majorana 場を用いる方法

まず，下式で定義される Majorana 場:

$$\hat{\psi}_1(j) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{\sigma}_1^z \cdots \hat{\sigma}_{j-1}^z \hat{\sigma}_j^x, \tag{D.33}$$

$$\hat{\psi}_2(j) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \hat{\sigma}_1^z \cdots \hat{\sigma}_{j-1}^z \hat{\sigma}_j^y, \tag{D.34}$$

を用いて分配関数を求める方法を示す．Majorana 場について

$$\hat{\psi}_2(j) \hat{\psi}_1(j+1) = +\frac{i}{2} \hat{\sigma}_j^x \hat{\sigma}_{j+1}^x, \tag{D.35}$$

$$\hat{\psi}_1(j) \hat{\psi}_2(j+1) = -\frac{i}{2} \hat{\sigma}_j^y \hat{\sigma}_{j+1}^y, \tag{D.36}$$

$$\hat{\psi}_1(j) \hat{\psi}_2(j) = \frac{i}{2} \hat{\sigma}_j^z, \tag{D.37}$$

が成り立つことを用いると，ハミルトニアン [式 (D.32)] は Majorana 場を用いて

$$\hat{\mathcal{H}} = -iJ \sum_{j=1}^N \left(\hat{\psi}_1(j) \hat{\psi}_2(j+1) - \hat{\psi}_2(j) \hat{\psi}_1(j+1) \right) + 2i\Gamma \sum_j \hat{\psi}_1(j) \hat{\psi}_2(j), \tag{D.38}$$

と書くことができる．Majorana 場に対する境界条件については，1 次元 Ising モデルの場合と同様に考えると

$$\hat{\psi}_1(N+1) = - \left(\prod_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^z \right) \hat{\psi}_1(1), \quad (\text{D.39})$$

$$\hat{\psi}_2(N+1) = - \left(\prod_{j=1}^N \hat{\sigma}_j^z \right) \hat{\psi}_2(1), \quad (\text{D.40})$$

となる．Majorana 場をフーリエ変換:

$$\hat{\psi}_1(j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q \geq 0} \left[e^{iqj} \hat{C}_1(q) + e^{-iqj} \hat{C}_1^\dagger(q) \right], \quad (\text{D.41})$$

$$\hat{\psi}_2(j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q \geq 0} \left[e^{iqj} \hat{C}_2(q) + e^{-iqj} \hat{C}_2^\dagger(q) \right], \quad (\text{D.42})$$

して，式 (D.41) と (D.42) を式 (D.38) に代入すると

$$\hat{\mathcal{H}} = -2i \sum_{q \geq 0} (J \cos q - \Gamma) \left[\hat{C}_1(q) \hat{C}_2^\dagger(q) + \hat{C}_1^\dagger(q) \hat{C}_2(q) \right], \quad (\text{D.43})$$

が得られる．1 次元 Ising モデルの場合と同様に，分配関数は

$$Z = \text{Tr} \prod_{q \geq 0} \hat{V}(q), \quad (\text{D.44})$$

$$\hat{V}(q) \equiv \exp \left\{ 2i\beta (J \cos q - \Gamma) \left[\hat{C}_1(q) \hat{C}_2^\dagger(q) + \hat{C}_1^\dagger(q) \hat{C}_2(q) \right] \right\}, \quad (\text{D.45})$$

と q 毎に分離することができる．フェルミ粒子の数演算子 $\hat{C}_1^\dagger(q) \hat{C}_1(q)$ と $\hat{C}_2^\dagger(q) \hat{C}_2(q)$ の固有状態 $|n_1, n_2\rangle$ を基底として $\hat{V}(q)$ の肩を行列表示すると

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2i\beta (J e^{iq} - \Gamma) \\ 0 & 0 & -2i\beta (J e^{-iq} - \Gamma) & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{D.46})$$

となり，固有値は 2 重縮退した 0 と $\pm 2\beta |J \cos q - \Gamma|$ であることが分かる．この結果と式 (D.44) より，

$$Z = \prod_{q \geq 0} [2 \cosh \beta (J \cos q - \Gamma)]^2, \quad (\text{D.47})$$

が得られる．1 スピン当たりの自由エネルギーは

$$-\beta f = \frac{2}{N} \sum_{q \geq 0} \log 2 \cosh \beta (J \cos q - \Gamma), \quad (\text{D.48})$$

であり， $N \rightarrow \infty$ として和を積分に書き換えた後に $q \rightarrow \pi - q$ の変数変換をすると

$$\begin{aligned} -\beta f &= \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dq \log 2 \cosh \beta (J \cos q + \Gamma) \\ &= -\beta \Gamma + \frac{1}{\pi} \int_0^\pi dq \log \left[1 + e^{2\beta (J \cos q + \Gamma)} \right], \end{aligned} \quad (\text{D.49})$$

が得られる． $\Gamma = -h'_q(m_x)$ とすれば式 (7.61) となる．

D.2.2 Jordan-Wigner 変換を用いる方法

1次元 XY モデルのハミルトニアン [式 (D.32)] は、スピン 1/2 のスピン演算子 $\hat{S}_j^x, \hat{S}_j^y, \hat{S}_j^z$ を用いて

$$\hat{\mathcal{H}} = -2J \sum_{j=1}^N \left(\hat{S}_j^x \hat{S}_{j+1}^x + \hat{S}_j^y \hat{S}_{j+1}^y \right) - 2\Gamma \sum_{j=1}^N \hat{S}_j^z, \quad (\text{D.50})$$

と書くことができる．1次元上に並んだスピン演算子は，Jordan-Wigner 変換:

$$\hat{S}_{j \leq N}^+ = (1 - 2\hat{n}_1)(1 - 2\hat{n}_2) \cdots (1 - 2\hat{n}_{j-1}) \hat{a}_j^\dagger, \quad (\text{D.51})$$

$$\hat{S}_{j \leq N}^- = (1 - 2\hat{n}_1)(1 - 2\hat{n}_2) \cdots (1 - 2\hat{n}_{j-1}) \hat{a}_j, \quad (\text{D.52})$$

$$\hat{S}_{j \leq N}^z = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j - \frac{1}{2}, \quad (\text{D.53})$$

を用いてフェルミ演算子 $\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_j$ で表すことができる．ここで， \hat{S}_j^+ と \hat{S}_j^- は昇降演算子:

$$\hat{S}_j^+ \equiv \hat{S}_j^x + i\hat{S}_j^y, \quad (\text{D.54})$$

$$\hat{S}_j^- \equiv \hat{S}_j^x - i\hat{S}_j^y, \quad (\text{D.55})$$

であり， $\hat{n}_j \equiv \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j$ はフェルミ粒子の数演算子である．式 (D.50) を昇降演算子 \hat{S}_j^\pm と \hat{S}_j^z を用いて表すと

$$\hat{\mathcal{H}} = -J \sum_{j=1}^N \left(\hat{S}_j^+ \hat{S}_{j+1}^- + \hat{S}_j^- \hat{S}_{j+1}^+ \right) - 2\Gamma \sum_{j=1}^N \hat{S}_j^z, \quad (\text{D.56})$$

となる．また， $(1 - 2\hat{n}_j)^2 = 1$ を利用すると，式 (D.51) と (D.52) から

$$\hat{S}_j^+ \hat{S}_{j+1}^- = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j+1}, \quad (\text{D.57})$$

$$\hat{S}_j^- \hat{S}_{j+1}^+ = \hat{a}_{j+1}^\dagger \hat{a}_j, \quad (\text{D.58})$$

となることが分かり，これらを式 (D.56) に代入すると

$$\hat{\mathcal{H}} = -J \sum_{j=1}^N \left(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j+1} + \hat{a}_{j+1}^\dagger \hat{a}_j \right) - 2\Gamma \sum_{j=1}^N \left(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j - \frac{1}{2} \right), \quad (\text{D.59})$$

と変形できる．第一項の $j = N$ の場合については，

$$\hat{S}_N^+ \hat{S}_1^- = - \left(\prod_{j=1}^N (1 - 2\hat{n}_j) \right) \hat{a}_N^\dagger \hat{a}_1, \quad (\text{D.60})$$

$$\hat{S}_N^- \hat{S}_1^+ = - \left(\prod_{j=1}^N (1 - 2\hat{n}_j) \right) \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_N, \quad (\text{D.61})$$

であることを考慮すると，以下の境界条件:

$$\hat{S}_{N+1}^\pm = -\hat{\sigma}_{\text{prod}} \hat{S}_1^\pm, \quad (\text{D.62})$$

$$\hat{\sigma}_{\text{prod}} \equiv \prod_{j=1}^N (1 - 2\hat{n}_j) \quad (\text{D.63})$$

を課せば、式 (D.59) によって式 (D.32) の周期境界条件を含めて表現できることが分かる。
また、以下の交換関係:

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\sigma}_{\text{prod}}] = 0, \quad (\text{D.64})$$

を満たすことも簡単に示すことができる。フェルミ演算子をフーリエ変換すると

$$\hat{a}_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{iqj} \hat{a}_q, \quad (\text{D.65})$$

$$\hat{a}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{-iqj} \hat{a}_q^\dagger, \quad (\text{D.66})$$

となり、これを式 (D.59) に代入すると

$$\hat{\mathcal{H}} = -2 \sum_q (J \cos q + \Gamma) \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q + N\Gamma, \quad (\text{D.67})$$

が得られ、 q 毎に分離した形となる。 $\hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q$ の固有値が 0 と 1 であることを用いると、分配関数は

$$Z = e^{-\beta N\Gamma} \prod_q \left[1 + e^{2\beta(J \cos q + \Gamma)} \right], \quad (\text{D.68})$$

となり、1 スピンあたりの自由エネルギーとして

$$-\beta f = -\beta\Gamma + \frac{1}{N} \sum_q \log \left[1 + e^{2\beta(J \cos q + \Gamma)} \right], \quad (\text{D.69})$$

が得られる。 $N \rightarrow \infty$ として和を積分に変換すると

$$-\beta f = -\beta\Gamma + \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} dq \log \left[1 + e^{2\beta(J \cos q + \Gamma)} \right], \quad (\text{D.70})$$

となり、式 (7.61) が導出できる。

付 録 E one-hot 表示した Potts モデルの自由エネルギーの導出

E.1 one-hot 制約下の全結合強磁性 Potts モデルの自由エネルギーの導出

全結合強磁性 Potts モデルの one-hot 制約下の QA のハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) + \hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x), \quad (\text{E.1})$$

$$\hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) = -\frac{J}{2N} \sum_{q=1}^Q \left(\sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_{qi}^z \right)^2 + \frac{\lambda}{2Q} \sum_{i=1}^N \left[\left(\sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_{qi}^z \right)^2 - 2(Q-2) \sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_{qi}^z \right], \quad (\text{E.2})$$

$$\hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x) = -\Gamma \sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_{qi}^x, \quad (\text{E.3})$$

であり、分配関数 Z は

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}}, \quad (\text{E.4})$$

で与えられる。鈴木-トロッター展開を適用して完全性:

$$\sum_{\sigma^z(\kappa)} |\sigma^z(\kappa)\rangle \langle \sigma^z(\kappa)| = \hat{1}, \quad (\text{E.5})$$

を $K-1$ 回挿入すると、分配関数は

$$Z = \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{\sigma^z(1)} \cdots \sum_{\sigma^z(K)} \prod_{\kappa=1}^K \exp \left(-\frac{\beta}{K} \mathcal{H}_0(\sigma^z(\kappa)) \right) \times \left\langle \sigma^z(\kappa) \left| \exp \left(-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x) \right) \right| \sigma^z(\kappa+1) \right\rangle, \quad (\text{E.6})$$

と変形できる。ここで、 $\sigma^z(\kappa)$ は κ 番目のトロッタースライスに属するスピンの集合 $\{\sigma_{qi}^z(\kappa) | i = 1, 2, \dots, N, q = 1, 2, \dots, Q\}$ を表す。 $\mathcal{H}_0(\sigma^z)$ の第一項は、以下に示すガウス積分の公式:

$$e^{\frac{1}{2}ax^2} = \sqrt{\frac{aN}{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dm e^{-\frac{1}{2}Nam^2 + \sqrt{N}amx}, \quad (\text{E.7})$$

において, $a = \beta J/K, x = \sum_{i=1}^N \sigma_{qi}^z / \sqrt{N}$ とおくと

$$\begin{aligned} & \exp \left[\frac{\beta J}{2NK} \sum_{q=1}^Q \left(\sum_{i=1}^N \sigma_{qi}^z \right)^2 \right] \\ &= \int \prod_{q=1}^Q dm_q \exp \left(-\frac{\beta NJ}{2K} \sum_{q=1}^Q m_q^2 + \frac{\beta J}{K} \sum_{q=1}^Q m_q \sum_{i=1}^N \sigma_{qi}^z \right), \quad (\text{E.8}) \end{aligned}$$

と変形できる. 左辺の指数関数の肩には 2 体相互作用が含まれていたのに対して, 右辺ではスピン変数が独立になっているので Tr を実行するのが容易になる. 右辺ではスピン変数が独立になる代わりに積分が追加されるが, $N \rightarrow \infty$ では鞍点法により積分を評価できるので問題ない. 鞍点法では指数関数の肩が最大になる点の値で積分を代表させるが, これは揺らぎの影響を無視して平均値のみを考慮することに相当している. $N \rightarrow \infty$ では中心極限定理によって平均値からの揺らぎを考えなくてよくなるので, 鞍点法による積分の評価が厳密な結果を与える. 式 (E.8) を用いると式 (E.6) は

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{\sigma^z(1)} \cdots \sum_{\sigma^z(K)} \int \prod_{q,\kappa} dm_q(\kappa) \exp \left(-\frac{\beta NJ}{2K} \sum_{q,\kappa} m_q(\kappa)^2 \right) \\ &\quad \times \prod_{\kappa} \left\langle \sigma^z(\kappa) \left| \exp \left(-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_0^{(\text{eff})}(\hat{\sigma}^z, \{m_q(\kappa)\}) \right) \exp \left(-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x) \right) \right| \sigma^z(\kappa+1) \right\rangle, \quad (\text{E.9}) \end{aligned}$$

と変形でき, 完全性 [式 (E.5)] を逆方向に適用すると

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{K \rightarrow \infty} \int \prod_{q,\kappa} dm_q(\kappa) \exp \left(-\frac{\beta NJ}{2K} \sum_{q,\kappa} m_q(\kappa)^2 \right) \\ &\quad \times \text{Tr} \left[\prod_{\kappa} \exp \left(-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_0^{(\text{eff})}(\hat{\sigma}^z, \{m_q(\kappa)\}) \right) \exp \left(-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x) \right) \right], \quad (\text{E.10}) \end{aligned}$$

となる. ここで,

$$\hat{\mathcal{H}}_0^{(\text{eff})}(\hat{\sigma}^z, \{m_q(\kappa)\}) \equiv \sum_i \left[\frac{\lambda}{2Q} \left(\sum_q \hat{\sigma}_{qi}^z \right)^2 - \sum_q \left(Jm_q(\kappa) + \frac{Q-2}{Q} \lambda \right) \hat{\sigma}_{qi}^z \right], \quad (\text{E.11})$$

であり, 以降の計算では和や積の上限と下限は注意が必要な場合を除いて省略することにする. さらに, 静的近似:

$$m_q \equiv m_q(\kappa), \quad (\text{E.12})$$

を適用すると

$$\begin{aligned} Z &= \int \prod_q dm_q \exp \left(-\frac{\beta NJ}{2} \sum_q m_q^2 \right) \\ &\quad \times \text{Tr} \lim_{K \rightarrow \infty} \left[\exp \left(-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_0^{(\text{eff})}(\hat{\sigma}^z, \{m_q\}) \right) \exp \left(-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x) \right) \right]^K, \quad (\text{E.13}) \end{aligned}$$

と変形でき、鈴木-トロッター展開を逆方向に適用すると

$$Z = \int \prod_q dm_q e^{-\beta N f(\{m_q\})}, \quad (\text{E.14})$$

$$f(\{m_q\}) = \frac{J}{2} \sum_q m_q^2 - \frac{1}{\beta} \log \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}^{(\text{eff})}(\hat{\sigma}^z, \{m_q\})}, \quad (\text{E.15})$$

が得られる。ここで、

$$\hat{\mathcal{H}}^{(\text{eff})}(\hat{\sigma}^z, \{m_q\}) \equiv \frac{\lambda}{2Q} \left(\sum_q \hat{\sigma}_q^z \right)^2 - \sum_q \left(Jm_q + \frac{Q-2}{Q} \lambda \right) \hat{\sigma}_q^z - \Gamma \sum_q \hat{\sigma}_q^x, \quad (\text{E.16})$$

である。 $N \rightarrow \infty$ では積分を鞍点法により評価することができ、 $\{m_q\}$ は自由エネルギー $f(\{m_q\})$ が最小となるように決めればよい。 $\beta \rightarrow \infty$ では $\hat{\mathcal{H}}^{(\text{eff})}(\hat{\sigma}^z, \{m_q\})$ の最小固有値 $\varepsilon_{\min}^{(\text{eff})}(\{m_q\})$ のみが自由エネルギーに寄与し、

$$f(\{m_q\}) = \frac{J}{2} \sum_q m_q^2 + \varepsilon_{\min}^{(\text{eff})}(\{m_q\}), \quad (\text{E.17})$$

となる。これで、本文中の式 (8.16) と (8.17) が得られたことになる。

E.2 half-hot 制約下の全結合強磁性 Potts モデルの自由エネルギーの導出

half-hot 制約下の強磁性 Potts モデルのハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) = -\frac{J}{2N} \sum_{q=1}^Q \left(\sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_{qi}^z \right)^2 + \frac{\lambda}{2Q} \sum_{i=1}^N \left(\sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_{qi}^z \right)^2, \quad (\text{E.18})$$

で与えられる。 $Q \rightarrow \infty$ の場合は、 $\hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z)$ [式 (E.18)] の第二項も平均場理論によって取り扱うことができるようになる。ディラックの δ 関数とそのフーリエ変換:

$$h(x) = \int dy \delta(y-x) f(y), \quad (\text{E.19})$$

$$\delta(y-x) = \int \frac{d\tilde{y}}{2\pi} e^{-\tilde{y}(y-x)}, \quad (\text{E.20})$$

を用いると

$$\begin{aligned} & \exp \left[-\frac{\beta\lambda}{2QK} \sum_i \left(\sum_q \sigma_{qi}^z \right)^2 \right] \\ & \propto \int \prod_i dM_i \exp \left(-\frac{\beta Q\lambda}{2K} \sum_i M_i^2 \right) \prod_i \delta \left(\frac{\beta Q\lambda}{K} M_i - \frac{\beta\lambda}{K} \sum_q \sigma_{qi}^z \right) \\ & \propto \int \prod_i dM_i \int \prod_i d\tilde{M}_i \exp \left(-\frac{\beta Q\lambda}{2K} \sum_i M_i^2 - \frac{\beta Q\lambda}{K} \sum_i \tilde{M}_i M_i + \frac{\beta\lambda}{K} \sum_i \tilde{M}_i \sum_q \sigma_{qi}^z \right), \end{aligned} \quad (\text{E.21})$$

と一体化できる． $Q \rightarrow \infty$ の場合は M_i と \tilde{M}_i に関する積分は鞍点法を用いて評価すればよい．鞍点条件の一つが

$$\tilde{M}_i = -M_i, \quad (\text{E.22})$$

であることを用いて \tilde{M}_i の積分を評価すると

$$\begin{aligned} & \exp \left[-\frac{\beta\lambda}{2QK} \sum_i \left(\sum_q \sigma_{qi}^z \right)^2 \right] \\ & \propto \int \prod_i dM_i \exp \left(\frac{\beta Q\lambda}{2K} \sum_i M_i^2 - \frac{\beta\lambda}{K} \sum_i M_i \sum_q \sigma_{qi}^z \right), \quad (\text{E.23}) \end{aligned}$$

が得られる．式 (E.8) と (E.23) を用いると

$$\begin{aligned} \exp \left(-\frac{\beta}{K} \mathcal{H}_0(\boldsymbol{\sigma}^z) \right) &= \int \prod_q dm_q \int \prod_i dM_i \exp \left(-\frac{\beta NJ}{2K} \sum_q m_q^2 + \frac{\beta Q\lambda}{2K} \sum_i M_i^2 \right) \\ &\times \exp \left[-\frac{\beta}{K} \sum_{q,i} (-Jm_q + \lambda M_i) \sigma_{qi}^z \right], \quad (\text{E.24}) \end{aligned}$$

と一体化できる．式 (E.24) を式 (E.6) に代入して，E.1 節と同様の計算を実行すると

$$Z = \int \prod_q dm_q \int \prod_i dM_i e^{-\beta N Q f(\{m_q\}, \{M_i\})}, \quad (\text{E.25})$$

$$f(\{m_q\}, \{M_i\}) = \frac{J}{2Q} \sum_q m_q^2 - \frac{\lambda}{2N} \sum_i M_i^2 - \frac{1}{\beta N Q} \sum_{q,i} \log \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}^{(\text{eff})}(\hat{\sigma}^{z,x}, m_q, M_i)}, \quad (\text{E.26})$$

が得られる．ここで，

$$\hat{\mathcal{H}}^{(\text{eff})}(\hat{\sigma}^{z,x}, m_q, M_i) \equiv -(Jm_q - \lambda M_i) \hat{\sigma}^z - \Gamma \hat{\sigma}^x, \quad (\text{E.27})$$

である． $\hat{\mathcal{H}}^{(\text{eff})}(\hat{\sigma}^{z,x}, m_q, M_i)$ を行列表示すると

$$\begin{bmatrix} -(Jm_q - \lambda M_i) & -\Gamma \\ -\Gamma & Jm_q - \lambda M_i \end{bmatrix}, \quad (\text{E.28})$$

となり，固有値 $\varepsilon_{\pm}(m_q, M_i)$ が

$$\varepsilon_{\pm}(m_q, M_i) = \pm \sqrt{(Jm_q - \lambda M_i)^2 + \Gamma^2} \quad (\text{E.29})$$

であることが分かる．以上より，自由エネルギーとして

$$f(\{m_q\}, \{M_i\}) = \frac{J}{2Q} \sum_q m_q^2 - \frac{\lambda}{2N} \sum_i M_i^2 - \frac{1}{\beta N Q} \sum_{q,i} \log 2 \cosh \beta \Xi_{qi}, \quad (\text{E.30})$$

$$\Xi_{qi} \equiv \sqrt{(Jm_q - \lambda M_i)^2 + \Gamma^2}, \quad (\text{E.31})$$

が得られ，本文中の式 (8.39) と (8.40) を導出できた．

E.3 half-hot 制約下の全結合 Potts グラスモデルの自由エネルギーの導出

half-hot 制約下における全結合 Potts グラスモデルの QA のハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_q, \quad (\text{E.32})$$

$$\hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) = - \sum_{i < j} J_{ij} \sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_{qi}^z \sigma_{qj}^z + \frac{\lambda}{2Q} \sum_{i=1}^N \left(\sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_{qi}^z \right)^2, \quad (\text{E.33})$$

$$\hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x) = -\Gamma \sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^Q \hat{\sigma}_{qi}^x, \quad (\text{E.34})$$

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \exp \left[-\frac{N}{2J^2} \left(J_{ij} - \frac{J_0}{N} \right)^2 \right], \quad (\text{E.35})$$

で与えられる．ここで， $P(J_{ij})$ は相互作用の確率分布を表す．レプリカ法によると，自由エネルギーの配位平均 $[f]_J$ は

$$-\beta[f]_J = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{[Z^n]_J - 1}{n}, \quad (\text{E.36})$$

によって求めることができるため， $[Z^n]_J$ を計算すればよい．鈴木-トロッター展開（付録 C.1 参照）を用いると，以下に示すように分配関数を z 方向のスピンのみを用いて表現することができる．

$$Z = \lim_{K \rightarrow \infty} \text{Tr} \exp \left[-\frac{\beta}{K} \sum_{\kappa=1}^K \mathcal{H}_0(\sigma^z(\kappa)) + \frac{1}{2} \log \coth \left(\frac{\beta\Gamma}{K} \right) \sum_{i=1}^N \sum_{q=1}^Q \sum_{\kappa=1}^K \sigma_{qi}^z(\kappa) \sigma_{qi}^z(\kappa+1) + NQC \right]. \quad (\text{E.37})$$

ここで，

$$C \equiv \frac{K}{2} \log \sinh \left(\frac{\beta\Gamma}{K} \right) \cosh \left(\frac{\beta\Gamma}{K} \right), \quad (\text{E.38})$$

である．分配関数の n 乗の配位平均は

$$\begin{aligned} [Z^n]_J &= \lim_{K \rightarrow \infty} e^{nNQC} \\ &\times \text{Tr} \exp \left[-\frac{\beta\lambda}{2KQ} \sum_{\kappa, \alpha} \sum_i \left(\sum_q \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 + \frac{1}{2} \ln \coth \left(\frac{\beta\Gamma}{K} \right) \sum_{q,i} \sum_{\kappa, \alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa+1, \alpha} \right] \\ &\times \prod_{i < j} \int dJ_{ij} P(J_{ij}) \exp \left(\frac{\beta}{K} J_{ij} \sum_q \sum_{\kappa, \alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qj}^{\kappa\alpha} \right), \end{aligned} \quad (\text{E.39})$$

と書くことができる．ここで， $\sigma_{qi}^{\kappa\alpha}$ はトロッタースライスの番号が κ で， α 番目のレプリカに属し，整数変数 S_i の q 番目の状態に割当てられたスピン変数を表す．また，以降の

計算では和や積の上限と下限は注意が必要な場合を除いて省略する．被積分関数の指数の肩には κ, α に加えて q に関する和が含まれており，後の計算では静的近似とレプリカ対称性に加えて， q 方向の対称性に関しても何かしらの仮定を導入する必要がある． J_{ij} の積分は容易に実行することができ，

$$\begin{aligned} \int dJ_{ij} P(J_{ij}) \exp \left(\frac{\beta}{K} J_{ij} \sum_q \sum_{\kappa, \alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qj}^{\kappa\alpha} \right) \\ = \exp \left[\frac{\beta J_0}{NK} \sum_q \sum_{\kappa, \alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qj}^{\kappa\alpha} + \frac{\beta^2 J^2}{2NK^2} \left(\sum_q \sum_{\kappa, \alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qj}^{\kappa\alpha} \right)^2 \right], \quad (\text{E.40}) \end{aligned}$$

となる．指数関数の肩の第二項は $O(Q^2)$ の量に見えるが， $q \neq q'$ の寄与が $O(Q^{-1})$ となり，最終的に $q = q'$ の寄与のみが残って $O(Q)$ の量になることを後に示す．指数関数の肩の第一項と第二項を

$$\sum_{i < j} \sum_q \sum_{\kappa, \alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qj}^{\kappa\alpha} = \frac{1}{2} \sum_q \sum_{\kappa, \alpha} \left[\left(\sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 - N \right], \quad (\text{E.41})$$

$$\begin{aligned} \sum_{i < j} \left(\sum_q \sum_{\kappa, \alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qj}^{\kappa\alpha} \right)^2 \\ = \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} \left[\sum_{q \neq q'} \left(\sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha'} \right)^2 + \sum_q \left(\sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa'\alpha'} \right)^2 - NQ^2 \right] \\ + \frac{1}{2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha} \left[\sum_{q \neq q'} \left(\sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha} \right)^2 + \sum_q \left(\sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa'\alpha} \right)^2 - NQ^2 \right]. \quad (\text{E.42}) \end{aligned}$$

と変形できることを用いると

$$\begin{aligned} \prod_{i < j} \int dJ_{ij} P(J_{ij}) \exp \left(\frac{\beta}{K} J_{ij} \sum_q \sum_{\kappa, \alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qj}^{\kappa\alpha} \right) \simeq \exp \left[\frac{\beta J_0}{2NK} \sum_q \sum_{\kappa, \alpha} \left(\sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 \right. \\ + \frac{\beta^2 J^2}{2NK^2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} \sum_q \left(\sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha'} \right)^2 + \frac{\beta^2 J^2}{2NK^2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} \sum_{q \neq q'} \left(\sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha'} \right)^2 \\ \left. + \frac{\beta^2 J^2}{4NK^2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha} \sum_q \left(\sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha} \right)^2 + \frac{\beta^2 J^2}{4NK^2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha} \sum_{q \neq q'} \left(\sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha} \right)^2 \right], \quad (\text{E.43}) \end{aligned}$$

となる．右辺の各項に含まれる 2 乗の項を 1 乗に落とすためにガウス積分の公式 [式 (E.7)] を用いると，第一項から第五項は

$$\begin{aligned} & \exp \left[\frac{\beta J_0}{2NK} \sum_{q,\kappa,\alpha} \left(\sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 \right] \\ & \propto \int \prod_{q,\kappa,\alpha} dm_{q\kappa}^\alpha \exp \left[-\frac{\beta J_0 N}{2K} \sum_{q,\kappa,\alpha} (m_{q\kappa}^\alpha)^2 + \frac{\beta J_0}{K} \sum_{q,\kappa,\alpha} m_{q\kappa}^\alpha \sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right], \quad (\text{E.44}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{2NK^2} \sum_q \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} \left(\sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa'\alpha'} \right)^2 \right] \propto \int \prod_q \prod_{\kappa,\kappa'} \prod_{\alpha < \alpha'} d\xi_{q,\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'} \\ & \times \exp \left[-\frac{\beta^2 J^2 N}{2K^2} \sum_q \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} (\xi_{q,\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'})^2 + \frac{\beta^2 J^2}{K^2} \sum_q \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} \xi_{q,\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'} \sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa'\alpha'} \right], \quad (\text{E.45}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{2NK^2} \sum_{q \neq q'} \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} \left(\sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha'} \right)^2 \right] \propto \int \prod_{q \neq q'} \prod_{\kappa,\kappa'} \prod_{\alpha < \alpha'} d\theta_{qq',\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'} \\ & \times \exp \left(-\frac{\beta^2 J^2 N}{2K^2} \sum_{q \neq q'} \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} (\theta_{qq',\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'})^2 + \frac{\beta^2 J^2}{K^2} \sum_{q \neq q'} \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} \theta_{qq',\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'} \sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha'} \right), \quad (\text{E.46}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{4NK^2} \sum_{q,\alpha} \sum_{\kappa,\kappa'} \left(\sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa'\alpha} \right)^2 \right] \propto \int \prod_{q,\alpha} \prod_{\kappa,\kappa'} d\eta_{q,\kappa\kappa'}^\alpha \\ & \times \exp \left(-\frac{\beta^2 J^2 N}{4K^2} \sum_{q,\alpha} \sum_{\kappa,\kappa'} (\eta_{q,\kappa\kappa'}^\alpha)^2 + \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \sum_{q,\alpha} \sum_{\kappa,\kappa'} \eta_{q,\kappa\kappa'}^\alpha \sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa'\alpha} \right), \quad (\text{E.47}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{4NK^2} \sum_{q \neq q'} \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha} \left(\sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha} \right)^2 \right] \propto \int \prod_{q \neq q'} \prod_{\kappa,\kappa'} \prod_{\alpha} d\varphi_{qq',\kappa\kappa'}^\alpha \\ & \times \exp \left(-\frac{\beta^2 J^2 N}{4K^2} \sum_{q \neq q'} \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha} (\varphi_{qq',\kappa\kappa'}^\alpha)^2 + \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \sum_{q \neq q'} \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha} \varphi_{qq',\kappa\kappa'}^\alpha \sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha} \right), \quad (\text{E.48}) \end{aligned}$$

と変形できる．また，ディラックの δ 関数とそのフーリエ変換 [式 (E.19) と (E.20)] を用いると，式 (E.33) の第二項は

$$\exp \left[-\frac{\beta\lambda}{2QK} \sum_{i,\kappa,\alpha} \left(\sum_q \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 \right] \propto \int \prod_{i,\kappa,\alpha} dM_{i\kappa}^\alpha \int \prod_{i,\kappa,\alpha} d\tilde{M}_{i\kappa}^\alpha \\ \times \exp \left(-\frac{\beta\lambda Q}{2K} \sum_{i,\kappa,\alpha} (M_{i\kappa}^\alpha)^2 - \frac{\beta\lambda Q}{K} \sum_{i,\kappa,\alpha} \tilde{M}_{i\kappa}^\alpha M_{i\kappa}^\alpha \right) \exp \left(\frac{\beta\lambda}{K} \sum_{i,\kappa,\alpha} \tilde{M}_{i\kappa}^\alpha \sum_q \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right), \quad (\text{E.49})$$

と一体化でき， $\tilde{M}_{i\kappa}^\alpha$ の積分を鞍点法により評価すると，鞍点条件: $\tilde{M}_{i\kappa}^\alpha = -M_{i\kappa}^\alpha$ を代入して

$$\exp \left[-\frac{\beta\lambda}{2QK} \sum_{i,\kappa,\alpha} \left(\sum_q \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 \right] \\ \propto \int \prod_{i,\kappa,\alpha} dM_{i\kappa}^\alpha \exp \left(\frac{\beta\lambda Q}{2K} \sum_{i,\kappa,\alpha} (M_{i\kappa}^\alpha)^2 - \frac{\beta\lambda}{K} \sum_{i,\kappa,\alpha} M_{i\kappa}^\alpha \sum_q \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right), \quad (\text{E.50})$$

が得られる．式 (E.43) から (E.48) と式 (E.50) を式 (E.39) に代入すると，分配関数は

$$[Z^n]_J = \lim_{K \rightarrow \infty} e^{nNQ} \int d\mathbf{m} \int d\xi \int d\theta \int d\eta \int d\varphi \int d\mathbf{M} \\ \times \exp \left[NQ \left(-\frac{\beta J_0}{2QK} \sum_{q,\kappa,\alpha} (m_{q\kappa}^\alpha)^2 - \frac{\beta^2 J^2}{2QK^2} \sum_q \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} (\xi_{q,\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'})^2 \right. \right. \\ - \frac{\beta^2 J^2}{2QK^2} \sum_{q \neq q'} \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} (\theta_{qq',\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'})^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4QK^2} \sum_{q,\alpha} \sum_{\kappa,\kappa'} (\eta_{q,\kappa\kappa'}^\alpha)^2 \\ \left. \left. - \frac{\beta^2 J^2}{4QK^2} \sum_{q \neq q'} \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha} (\varphi_{qq',\kappa\kappa'}^\alpha)^2 + \frac{\beta\lambda}{2NK} \sum_{i,\kappa,\alpha} (M_{i\kappa}^\alpha)^2 \right) \right] \prod_i \text{Tre}^{L_i}, \quad (\text{E.51})$$

となる．ここで，

$$L_i \equiv \frac{\beta^2 J^2}{K^2} \sum_q \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} \xi_{q,\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'} \sigma_{q\kappa}^{\kappa\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa'\alpha'} + \frac{\beta^2 J^2}{K^2} \sum_{q \neq q'} \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} \theta_{qq',\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha'} \\ + \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \sum_{q,\alpha} \sum_{\kappa,\kappa'} \eta_{q,\kappa\kappa'}^\alpha \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa'\alpha} + \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \sum_{q \neq q'} \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha} \varphi_{qq',\kappa\kappa'}^\alpha \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha} \\ + \frac{\beta}{K} \sum_{q,t,\kappa} (J_0 m_{q\kappa}^\alpha - \lambda M_{i\kappa}^\alpha) \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} + \frac{1}{2} \log \coth \left(\frac{\beta\Gamma}{K} \right) \sum_{q,\kappa,\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa+1,\alpha}, \quad (\text{E.52})$$

であり,

$$d\mathbf{m} \equiv \prod_{q,\kappa,\alpha} dm_{q\kappa}^\alpha, \quad (\text{E.53})$$

$$d\xi \equiv \prod_q \prod_{\kappa,\kappa'} \prod_{\alpha < \alpha'} d\xi_{q,\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'}, \quad (\text{E.54})$$

$$d\theta \equiv \prod_{q \neq q'} \prod_{\kappa,\kappa'} \prod_{\alpha < \alpha'} d\theta_{qq',\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'}, \quad (\text{E.55})$$

$$d\eta \equiv \prod_{q,\alpha} \prod_{\kappa,\kappa'} d\eta_{q,\kappa\kappa'}^\alpha, \quad (\text{E.56})$$

$$d\varphi \equiv \prod_{q \neq q'} \prod_{\kappa,\kappa'} \prod_{\alpha} d\varphi_{qq',\kappa\kappa'}^\alpha, \quad (\text{E.57})$$

$$dM \equiv \prod_{i,\kappa,\alpha} dM_{i\kappa}^\alpha, \quad (\text{E.58})$$

とした．積分は $N \rightarrow \infty, Q \rightarrow \infty$ において鞍点法によって評価することができ，鞍点条件は

$$m_{q\kappa}^\alpha = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right\rangle_{L_i}, \quad (\text{E.59})$$

$$\xi_{q,\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'} = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa'\alpha'} \right\rangle_{L_i}, \quad (\text{E.60})$$

$$\theta_{qq',\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'} = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha'} \right\rangle_{L_i}, \quad (\text{E.61})$$

$$\eta_{q,\kappa\kappa'}^\alpha = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa'\alpha} \right\rangle_{L_i}, \quad (\text{E.62})$$

$$\varphi_{qq',\kappa\kappa'}^\alpha = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha} \right\rangle_{L_i}, \quad (\text{E.63})$$

$$M_{i\kappa}^\alpha = \left\langle \frac{1}{Q} \sum_q \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right\rangle_{L_i}, \quad (\text{E.64})$$

で与えられる．ここで,

$$\langle A \rangle_{L_i} \equiv \frac{\text{Tr} A e^{-L_i}}{\text{Tr} e^{-L_i}}, \quad (\text{E.65})$$

と定義した．

次に、静的近似とレプリカ対称性:

$$m_q \equiv m_{q\kappa}^\alpha, \quad (\text{E.66})$$

$$\xi_q \equiv \xi_{q,\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'}, \quad (\text{E.67})$$

$$\theta_{qq'} \equiv \theta_{qq',\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'}, \quad (\text{E.68})$$

$$\eta_q \equiv \eta_{q,\kappa\kappa'}^\alpha, \quad (\text{E.69})$$

$$\varphi_{qq'} \equiv \varphi_{qq',\kappa\kappa'}^\alpha, \quad (\text{E.70})$$

$$M_i \equiv M_{i\kappa}^\alpha, \quad (\text{E.71})$$

を仮定した場合の自由エネルギーを計算していく．式 (E.66) から (E.71) を式 (E.51) と (E.52) に代入すると

$$\begin{aligned} [Z^n]_J = & \lim_{K \rightarrow \infty} e^{nNQ C} \int \prod_q dm_q \int \prod_q d\xi_q \int \prod_{q,q'} d\theta_{qq'} \int \prod_q d\eta_q \int \prod_{q,q'} d\varphi_{qq'} \int \prod_i dM_i \\ & \times \exp \left[nNQ \left(-\frac{\beta J_0}{2Q} \sum_q m_q^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4Q} (n-1) \sum_q \xi_q^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4Q} (n-1) \sum_{q \neq q'} \theta_{qq'}^2 \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{\beta^2 J^2}{4Q} \sum_q \eta_q^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4Q} \sum_{q \neq q'} \varphi_{qq'}^2 + \frac{\beta \lambda}{2N} \sum_i M_i^2 + \frac{1}{nNQ} \sum_i \log \text{Tre}^{L_i} \right) \right], \quad (\text{E.72}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} L_i = & \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \sum_q \xi_q \left(\sum_{\kappa,\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 + \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \sum_q (\eta_q - \xi_q) \sum_\alpha \left(\sum_\kappa \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 \\ & + \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \sum_{q \neq q'} \theta_{qq'} \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha,\alpha'} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha'} + \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \sum_{q \neq q'} (\varphi_{qq'} - \theta_{qq'}) \sum_\alpha \sum_{\kappa,\kappa'} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha} \\ & + \frac{\beta}{K} \sum_{q,\kappa,\alpha} (J_0 m_q - \lambda M_i) \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} + \frac{1}{2} \log \coth \left(\frac{\beta \Gamma}{K} \right) \sum_{q,\kappa,\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa+1,\alpha}, \quad (\text{E.73}) \end{aligned}$$

となり、 Tre^{L_i} を計算することが残る仕事である．さらに、式 (E.32) から (E.34) のハミルトニアンでは全ての q が対等に表れており、 $\theta_{qq'}$ と $\varphi_{qq'}$ は (q, q') のペアの選び方に依存しないと考えられるため

$$\theta \equiv \theta_{qq'}, \quad (\text{E.74})$$

$$\varphi \equiv \varphi_{qq'}, \quad (\text{E.75})$$

とおく．式 (E.74) と (E.75) を用いると、 L_i の第三項と第四項は

$$\sum_{q \neq q'} \theta_{qq'} \sum_{\kappa,\kappa'} \sum_{\alpha,\alpha'} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha'} = \theta \left(\sum_{q,\kappa,\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 - \theta \sum_q \left(\sum_{\kappa,\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2, \quad (\text{E.76})$$

$$\sum_{q \neq q'} (\varphi_{qq'} - \theta_{qq'}) \sum_\alpha \sum_{\kappa,\kappa'} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{q'i}^{\kappa'\alpha} = (\varphi - \theta) \sum_\alpha \left(\sum_{q,\kappa} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 - (\varphi - \theta) \sum_{q,\alpha} \left(\sum_\kappa \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2, \quad (\text{E.77})$$

と変形でき,

$$\begin{aligned}
L_i = & \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \sum_q (\xi_q - \theta) \left(\sum_{\kappa, \alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 + \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \sum_q [(\eta_q - \xi_q) - (\varphi - \theta)] \sum_{\alpha} \left(\sum_{\kappa} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 \\
& + \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \theta \left(\sum_{q, \kappa, \alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 + \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} (\varphi - \theta) \sum_{\alpha} \left(\sum_{q, \kappa} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 \\
& + \frac{\beta}{K} \sum_{q, \kappa, \alpha} (J_0 m_q - \lambda M_i) \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} + \frac{1}{2} \log \coth \left(\frac{\beta \Gamma}{\tau} \right) \sum_{q, \kappa, \alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \sigma_{qi}^{\kappa+1, \alpha}, \tag{E.78}
\end{aligned}$$

が得られる. L_i の第一項と第二項はガウス積分の公式 [式 (E.7)] を用いると

$$\exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \sum_q (\xi_q - \theta) \left(\sum_{\kappa, \alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 \right] = \int D\mathbf{u}_i \exp \left(\frac{\beta J}{K} \sum_q \sqrt{\xi_q - \theta} u_q \sum_{\kappa, \alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right), \tag{E.79}$$

$$\begin{aligned}
& \exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \sum_q [(\eta_q - \xi_q) - (\varphi - \theta)] \sum_{\alpha} \left(\sum_{\kappa} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 \right] \\
& = \int D\mathbf{v}_i \exp \left(\frac{\beta J}{K} \sum_q \sqrt{(\eta_q - \xi_q) - (\varphi - \theta)} \sum_{\alpha} v_q^{\alpha} \sum_{\kappa} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right), \tag{E.80}
\end{aligned}$$

と一体化できる. ここで,

$$D\mathbf{u}_i \equiv \prod_q \frac{du_{qi}}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{u_{qi}^2}{2} \right), \tag{E.81}$$

$$D\mathbf{v}_i \equiv \prod_q \frac{dv_{qi}}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{v_{qi}^2}{2} \right), \tag{E.82}$$

とした. さらに, L_i の第三項と第四項の和はディラックの δ 関数とそのフーリエ変換 [式 (E.19) と (E.20)] を用いて

$$\begin{aligned}
& \exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \theta \left(\sum_{q, \kappa, \alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 + \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} (\varphi - \theta) \sum_{\alpha} \left(\sum_{q, \kappa} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 \right] \\
& = \int d\mathbf{W}_i \int d\tilde{\mathbf{W}}_i \exp \left(\frac{\beta^2 J^2 Q}{K^2} \sum_{\kappa, \alpha} \tilde{W}_{i\kappa}^{\alpha} \sum_q \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right) \\
& \times \exp \left[\frac{\beta^2 J^2 Q^2}{2K^2} \theta \left(\sum_{\kappa, \alpha} W_{i\kappa}^{\alpha} \right)^2 + \frac{\beta^2 J^2 Q^2}{2K^2} (\varphi - \theta) \sum_{\alpha} \left(\sum_{\kappa} W_{i\kappa}^{\alpha} \right)^2 - \frac{\beta^2 J^2 Q^2}{K^2} \sum_{\kappa, \alpha} \tilde{W}_{i\kappa}^{\alpha} W_{i\kappa}^{\alpha} \right], \tag{E.83}
\end{aligned}$$

と一体化できる. ここで,

$$d\mathbf{W}_i \equiv \prod_{\kappa, \alpha} dW_{i\kappa}^{\alpha}, \tag{E.84}$$

$$d\tilde{\mathbf{W}}_i \equiv \prod_{\kappa, \alpha} d\tilde{W}_{i\kappa}^{\alpha}, \tag{E.85}$$

である． \mathbf{W}_i と $\tilde{\mathbf{W}}_i$ に関する積分は鞍点法を用いて評価できる．鞍点条件の一つは

$$\tilde{\mathbf{W}}_{i\kappa}^\alpha = \varphi \sum_{\kappa, \alpha} W_{i\kappa}^\alpha, \quad (\text{E.86})$$

であり， $\tilde{W}_{i\kappa}^\alpha$ が Trotter 番号 κ や レプリカ番号 α に依存しない．これは先程仮定した静的近似とレプリカ対称性の過程と矛盾しない．式 (E.86) の鞍点条件を用いて，式 (E.83) の $\tilde{\mathbf{W}}_i$ に関する積分を評価すると

$$\begin{aligned} & \exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \theta \left(\sum_{q, \kappa, \alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 + \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} (\varphi - \theta) \sum_{\alpha} \left(\sum_{q, \kappa} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right)^2 \right] \\ &= \int d\mathbf{W}_i \exp \left[\frac{\beta^2 J^2 Q}{K^2} \varphi \left(\sum_{\kappa, \alpha} W_{i\kappa}^\alpha \right) \sum_{q, \kappa, \alpha} \sigma_{qi}^{\kappa\alpha} \right] \\ & \times \exp \left[\frac{\beta^2 J^2 Q^2}{2K^2} (\theta - 2\varphi) \left(\sum_{\kappa, \alpha} W_{i\kappa}^\alpha \right)^2 + \frac{\beta^2 J^2 Q^2}{2K^2} (\varphi - \theta) \sum_{\alpha} \left(\sum_{\kappa} W_{i\kappa}^\alpha \right)^2 \right], \quad (\text{E.87}) \end{aligned}$$

となる．式 (E.79), (E.80), (E.87) を用いると

$$\begin{aligned} \text{Tre}^{L_i} &= \int d\mathbf{W}_i \exp \left[\frac{\beta^2 J^2 Q^2}{2K^2} (\theta - 2\varphi) \left(\sum_{\kappa, \alpha} W_{i\kappa}^\alpha \right)^2 \right. \\ & \left. + \frac{\beta^2 J^2 Q^2}{2K^2} (\varphi - \theta) \sum_{\alpha} \left(\sum_{\kappa} W_{i\kappa}^\alpha \right)^2 + n \sum_q \int Du_{qi} \log \int Dv_{qi} \text{Tre}^{L_{qi}} \right], \quad (\text{E.88}) \end{aligned}$$

と変形できる．ただし，

$$L_{qi} \equiv \frac{\beta J_{\text{T}}}{K} \sum_{\kappa} \sigma_{qi}^{\kappa} \sigma_{qi}^{\kappa+1} + \frac{\beta H_{qi}}{K} \sum_{\kappa} \sigma_{qi}^{\kappa}, \quad (\text{E.89})$$

$$\frac{\beta J_{\text{T}}}{K} \equiv \frac{1}{2} \log \coth \left(\frac{\beta \Gamma}{K} \right), \quad (\text{E.90})$$

$$\begin{aligned} H_{qi} &\equiv J \left[\sqrt{\xi_q - \theta} u_{qi} + \sqrt{(\eta_q - \xi_q) - (\varphi - \theta) v_{qi}} \right] \\ &+ (J_0 m_q - \lambda M_i) + \frac{\beta J^2 Q}{K} \varphi \left(\sum_{\kappa, \alpha} W_{i\kappa}^\alpha \right), \quad (\text{E.91}) \end{aligned}$$

である．ここで，静的近似とレプリカ対称性:

$$W_i \equiv W_{i\kappa}^\alpha, \quad (\text{E.92})$$

を再度適用し， $n \rightarrow 0$ で残る項だけを書き下すと

$$\text{Tre}^{L_i} = \int dW_i \exp \left[nQ \left(\frac{\beta^2 J^2 Q}{2} (\varphi - \theta) W_i^2 + \frac{1}{Q} \sum_q \int Du_{qi} \log \int Dv_{qi} \text{Tre}^{L_{qi}} \right) \right], \quad (\text{E.93})$$

$$H_{qi} = J \left[\sqrt{\xi_q - \theta} u_{qi} + \sqrt{(\eta_q - \xi_q) - (\varphi - \theta) v_{qi}} \right] + (J_0 m_q - \lambda M_i), \quad (\text{E.94})$$

となる． W_i の積分は鞍点法を用いて評価することができ， L_{qi} が W_i を含んでいないことから鞍点条件は

$$W_i = 0, \quad (\text{E.95})$$

であることが分かる．式 (E.95) を式 (E.93) に代入すると

$$\text{Tre}^{L_i} = \exp \left(n \sum_q \int Du_{qi} \log \int Dv_{qi} \text{Tre}^{L_{qi}} \right), \quad (\text{E.96})$$

が得られる．式 (E.89) の L_{qi} の定義から， $\text{Tre}^{L_{qi}}$ は 1 次元 Ising モデルの分配関数であり，

$$\text{Tre}^{L_{qi}} = \lambda_+^K + \lambda_-^K, \quad (\text{E.97})$$

で与えられる．ここで，

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &\equiv e^{\frac{\beta J_T}{K}} \left[\cosh \left(\frac{\beta H_{qi}}{K} \right) \pm \sqrt{\sinh^2 \left(\frac{\beta H_{qi}}{K} \right) + \exp \left(-\frac{4\beta J_T}{K} \right)} \right] \\ &= e^{\frac{\beta J_T}{K}} \left[\cosh \left(\frac{\beta H_{qi}}{K} \right) \pm \sqrt{\sinh^2 \left(\frac{\beta H_{qi}}{K} \right) + \tanh^2 \left(\frac{\beta \Gamma}{K} \right)} \right], \end{aligned} \quad (\text{E.98})$$

である． $K \rightarrow \infty$ では λ_{\pm}^K を

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm}^K &= \exp \left\{ \beta J_T + K \log \left[\cosh \left(\frac{\beta H_{qi}}{K} \right) \pm \sqrt{\sinh^2 \left(\frac{\beta H_{qi}}{K} \right) + \tanh^2 \left(\frac{\beta \Gamma}{K} \right)} \right] \right\} \\ &\simeq \exp \left[\beta J_T + K \log \left(1 \pm \frac{\beta}{K} \sqrt{H_{qi}^2 + \Gamma^2} \right) \right] \\ &\simeq \exp \left(\beta J_T \pm \beta \sqrt{H_{qi}^2 + \Gamma^2} \right), \end{aligned} \quad (\text{E.99})$$

と変形できるので， $\text{Tre}^{L_{qi}}$ は

$$\text{Tre}^{L_{qi}} = 2e^{\beta J_T} \cosh \beta \Xi_{qi}, \quad (\text{E.100})$$

$$\Xi_{qi} \equiv \sqrt{H_{qi}^2 + \Gamma^2}, \quad (\text{E.101})$$

となる．式 (E.100) を式 (E.96) に代入すると

$$\log \text{Tre}^{L_i} = \frac{1}{2} n Q K \log \coth \left(\frac{\beta \Gamma}{K} \right) + n \sum_q \int Du_{qi} \log \int Dv_{qi} 2 \cosh \beta \Xi_{qi}, \quad (\text{E.102})$$

となり, $\text{Tr} e^{L_i}$ の計算が完了した. 式 (E.102) を式 (E.72) に代入すると, 分配関数として

$$\begin{aligned}
[Z^n]_J = & \lim_{K \rightarrow \infty} \int \prod_q dm_q \int \prod_q d\xi_q \int \prod_{q,q'} d\theta_{qq'} \int \prod_q d\eta_q \int \prod_{q,q'} d\varphi_{qq'} \int \prod_i dM_i \\
& \times \exp \left\{ nNQ \left[-\frac{\beta J_0}{2Q} \sum_q m_q^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4Q} (n-1) \sum_q \xi_q^2 \right. \right. \\
& - \frac{\beta^2 J^2}{4Q} (n-1) \sum_{q \neq q'} \theta_{qq'}^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4Q} \sum_q \eta_q^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4Q} \sum_{q \neq q'} \varphi_{qq'}^2 + \frac{\beta \lambda}{2N} \sum_i M_i^2 \\
& \left. \left. + \frac{1}{NQ} \sum_{q,i} \int Du_{qi} \log \int Dv_{qi} 2 \cosh \beta \Xi_{qi} + K \log \cosh \left(\frac{\beta \Gamma}{K} \right) \right] \right\}, \quad (\text{E.103})
\end{aligned}$$

が得られる. ここで, $K \rightarrow \infty$ では

$$\begin{aligned}
K \log \cosh \left(\frac{\beta \Gamma}{K} \right) & \simeq K \log \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\beta \Gamma}{K} \right)^2 \right] \\
& \simeq \frac{\beta \Gamma}{2} \left(\frac{\beta \Gamma}{K} \right) \\
& \rightarrow 0
\end{aligned} \quad (\text{E.104})$$

となる. $m_q, \xi_q, \theta_{qq'}, \eta_q, \varphi_{qq'}, M_i$ に関する積分は鞍点法により評価できるため積分記号を省略し, $n \ll 1$ として式 (E.103) の指数関数を展開すると

$$\begin{aligned}
\frac{[Z^n]_J - 1}{nNQ} & \simeq -\frac{\beta J_0}{2Q} \sum_q m_q^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4Q} (n-1) \sum_q \xi_q^2 \\
& - \frac{\beta^2 J^2}{4Q} (n-1) \sum_{q \neq q'} \theta_{qq'}^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4Q} \sum_q \eta_q^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4Q} \sum_{q \neq q'} \varphi_{qq'}^2 + \frac{\beta \lambda}{2N} \sum_i M_i^2 \\
& + \frac{1}{NQ} \sum_{q,i} \int Du_{qi} \log \int Dv_{qi} 2 \cosh \beta \Xi_{qi} + K \log \cosh \left(\frac{\beta \Gamma}{K} \right), \quad (\text{E.105})
\end{aligned}$$

と変形できる. 式 (E.36) と比較すれば, 右辺で $n \rightarrow 0$ としたものが $-\beta[f]_J$ に等しく

$$\begin{aligned}
-\beta[f]_J = & -\frac{\beta J_0}{2Q} \sum_q m_q^2 + \frac{\beta^2 J^2}{4Q} \sum_q \xi_q^2 + \frac{\beta^2 J^2}{4Q} \sum_{q \neq q'} \theta_{qq'}^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4Q} \sum_q \eta_q^2 \\
& - \frac{\beta^2 J^2}{4Q} \sum_{q \neq q'} \varphi_{qq'}^2 + \frac{\beta \lambda}{2N} \sum_i M_i^2 + \frac{1}{NQ} \sum_{q,i} \int Du_{qi} \log \int Dv_{qi} 2 \cosh \beta \Xi_{qi}, \quad (\text{E.106})
\end{aligned}$$

が得られる. $m_q, \xi_q, \theta_{qq'}, \eta_q, \varphi_{qq'}, M_i$ は自由エネルギーを最小化するように決定され, 鞍

点方程式は

$$m_q = \frac{1}{N} \sum_i \int Du_{qi} \frac{\int Dv_{qi} \frac{H_{qi}}{\Xi_{qi}} \sinh \beta \Xi_{qi}}{\int Dv_{qi} \cosh \beta \Xi_{qi}}, \quad (\text{E.107})$$

$$\xi_q = \frac{1}{N} \sum_i \int Du_{qi} \left(\frac{\int Dv_{qi} \frac{H_{qi}}{\Xi_{qi}} \sinh \beta \Xi_{qi}}{\int Dv_{qi} \cosh \beta \Xi_{qi}} \right)^2, \quad (\text{E.108})$$

$$\eta_q = \frac{1}{N} \sum_i \int Du_{qi} \frac{\int Dv_{qi} \left(\frac{H_{qi}^2}{\Xi_{qi}^2} \cosh \beta \Xi_{qi} + \frac{\Gamma^2}{\beta \Xi_{qi}^3} \sinh \beta \Xi_{qi} \right)}{\int Dv_{qi} \cosh \beta \Xi_{qi}}, \quad (\text{E.109})$$

$$M_i = \frac{1}{Q} \sum_q \int Du_{qi} \frac{\int Dv_{qi} \frac{H_{qi}}{\Xi_{qi}} \sinh \beta \Xi_{qi}}{\int Dv_{qi} \cosh \beta \Xi_{qi}}, \quad (\text{E.110})$$

$$\theta = -\frac{1}{Q^2} \sum_q \xi_q \sim O\left(\frac{1}{Q}\right), \quad (\text{E.111})$$

$$\varphi = -\frac{1}{Q^2} \sum_q \eta_q \sim O\left(\frac{1}{Q}\right), \quad (\text{E.112})$$

である。\$\theta\$ と \$\varphi\$ は \$Q \rightarrow \infty\$ で 0 となることが分かる。また、強磁性全結合 Potts モデルの場合と同様に

$$\frac{1}{N} \sum_i M_i = \frac{1}{Q} \sum_q m_q, \quad (\text{E.113})$$

が成り立っており、本文中で導入した以下の対称性:

- \$M_i\$ は \$i\$ に依存しない (\$M \equiv M_i\$) .
- \$\{m_q\}\$ は \$Q/2\$ 個の \$m^{(+)}\$ と \$Q/2\$ 個の \$m^{(-)}\$ に分類される.
- \$m^{(+)}\$ と \$m^{(-)}\$ の絶対値は等しい (\$|m^{(+)}| = |m^{(-)}|\$) .

を導入すると、\$M_i = 0\$ となることを容易に示すことができる。\$M_i = \theta = \varphi = 0\$ を代入すると、自由エネルギーは

$$\begin{aligned} -\beta[f]_J = & -\frac{\beta J_0}{2Q} \sum_q m_q^2 + \frac{\beta^2 J^2}{4Q} \sum_q \xi_q^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4Q} \sum_q \eta_q^2 \\ & + \frac{1}{Q} \sum_q \int Du_q \log \int Dv_q 2 \cosh \beta \Xi_q, \end{aligned} \quad (\text{E.114})$$

$$\Xi_q = \sqrt{H_q^2 + \Gamma^2}, \quad (\text{E.115})$$

$$H_q = J \left[\sqrt{\xi_q} u_q + \sqrt{\eta_q - \xi_q} v_q \right] + J_0 m_q, \quad (\text{E.116})$$

となり，鞍点方程式として

$$m_q = \int Du_q \frac{\int Dv_q \frac{H_q}{\Xi_q} \sinh \beta \Xi_q}{\int Dv_q \cosh \beta \Xi_q}, \quad (\text{E.117})$$

$$\xi_q = \int Du_q \left(\frac{\int Dv_q \frac{H_q}{\Xi_q} \sinh \beta \Xi_q}{\int Dv_q \cosh \beta \Xi_q} \right)^2, \quad (\text{E.118})$$

$$\eta_q = \int Du_q \frac{\int Dv_q \left(\frac{H_q^2}{\Xi_q^2} \cosh \beta \Xi_q + \frac{\Gamma^2}{\beta \Xi_q^3} \sinh \beta \Xi_q \right)}{\int Dv_q \cosh \beta \Xi_q}, \quad (\text{E.119})$$

が得られる．以上で，本文中の鞍点方程式 (8.59)，(8.60)，(8.61) が導かれたことになる．

付 録 F 全結合 XX 相互作用を導入した全結合強磁性 Potts モデルの QA

全結合強磁性 Potts モデルでは全結合 XX 相互作用を導入しても 1 次相転移を回避できないことを示す．ここで取り扱うハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_q, \quad (\text{F.1})$$

$$\hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) = -\frac{J}{2N} \sum_q \left(\sum_i \hat{\sigma}_{qi}^z \right)^2 + \frac{\lambda}{2Q} \sum_i \left[\left(\sum_q \hat{\sigma}_{qi}^z \right)^2 - 2(1-2\alpha)Q \sum_q \hat{\sigma}_{qi}^z \right], \quad (\text{F.2})$$

$$\hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x) = -\Gamma_1 \sum_{q,i} \hat{\sigma}_{qi}^x + \frac{\Gamma_h}{2N} \sum_q \left(\sum_i \hat{\sigma}_{qi}^x \right)^2 + \frac{\Gamma_v}{2Q} \sum_i \left(\sum_q \hat{\sigma}_{qi}^x \right)^2 + \frac{\Gamma_2}{2NQ} \left(\sum_{q,i} \hat{\sigma}_{qi}^x \right)^2, \quad (\text{F.3})$$

である．式 (F.2) の第二項は以下のペナルティ項:

$$\frac{\lambda}{2Q} \sum_i \left(\sum_q \hat{\sigma}_{qi}^z - \alpha Q \right)^2, \quad (\text{F.4})$$

を展開して定数項を無視したものであり， αQ -hot 制約と呼ぶことにする．以降では， $\alpha \neq 1/2$ の場合は $\Gamma_v, \Gamma_h, \Gamma_2$ の値に依らずに 1 次相転移が発生することを $N \rightarrow \infty, Q \rightarrow \infty$ で示す．

分配関数 Z は

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) - \beta \hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x)}, \quad (\text{F.5})$$

であり，鈴木-トロッター展開を適用した後に完全性:

$$\sum_{\sigma^z(\kappa)} |\sigma^z(\kappa)\rangle \langle \sigma^z(\kappa)| = \hat{1}, \quad (\text{F.6})$$

$$\sum_{\sigma^x(\kappa)} |\sigma^x(\kappa)\rangle \langle \sigma^x(\kappa)| = \hat{1}, \quad (\text{F.7})$$

をそれぞれ $K-1$ 回挿入すると

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{\sigma^z(1)} \cdots \sum_{\sigma^z(K)} \sum_{\sigma^x(1)} \cdots \sum_{\sigma^x(K)} \\ &\times \prod_{\kappa=1}^K \exp \left(-\frac{\beta}{K} \mathcal{H}_0(\sigma^z(\kappa)) \right) \exp \left(-\frac{\beta}{K} \mathcal{H}_q(\sigma^x(\kappa)) \right) \\ &\times \langle \sigma^z(\kappa) | \sigma^x(\kappa) \rangle \langle \sigma^x(\kappa) | \sigma^z(\kappa+1) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{F.8})$$

と変形できる． $\mathcal{H}_0(\boldsymbol{\sigma}^z)$ の第一項に関してはガウス積分の公式 [式 (E.7)] を用いて

$$\begin{aligned} \exp \left[\frac{\beta J}{2NK} \sum_q \left(\sum_i \sigma_{qi}^z \right)^2 \right] \\ \propto \int \prod_q dm_q^z \exp \left(-\frac{\beta NJ}{2K} \sum_q (m_q^z)^2 + \frac{\beta J}{K} \sum_q m_q^z \sum_i \sigma_{qi}^z \right), \quad (\text{F.9}) \end{aligned}$$

と一体化できる．また， $\mathcal{H}_0(\boldsymbol{\sigma}^z)$ と $\mathcal{H}_q(\boldsymbol{\sigma}^x)$ に含まれるその他の項はディラックの δ 関数とそのフーリエ変換 [式 (E.19) と (E.20)] を用いて

$$\begin{aligned} \exp \left\{ -\frac{\beta \lambda}{2QK} \sum_i \left[\left(\sum_q \sigma_{qi}^z \right)^2 - 2(1-2\alpha)Q \sum_q \sigma_{qi}^z \right] \right\} \propto \int \prod_i dM_i^z \int \prod_i d\tilde{M}_i^z \\ \times \exp \left[-\frac{\beta Q \lambda}{K} \sum_i \left(\frac{1}{2} (M_i^z)^2 - (1-2\alpha)M_i^z + \tilde{M}_i^z M_i^z \right) \right] \exp \left(\frac{\beta \lambda}{K} \sum_i \tilde{M}_i^z \sum_q \sigma_{qi}^z \right), \quad (\text{F.10}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \exp \left[\frac{\beta \Gamma_1}{K} \sum_{q,i} \sigma_{qi}^x - \frac{\beta \Gamma_2}{2NQK} \left(\sum_{q,i} \sigma_{qi}^x \right)^2 \right] \propto \int d\phi^x \int d\tilde{\phi}^x \\ \times \exp \left[\frac{\beta NQ}{K} \left(-\frac{\gamma_2}{2} (\phi^x)^2 + \Gamma_1 \phi^x - \tilde{\phi}^x \phi^x \right) \right] \exp \left(\frac{\beta}{K} \tilde{\phi}^x \sum_{q,i} \sigma_{qi}^x \right), \quad (\text{F.11}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \exp \left[-\frac{\beta \Gamma_h}{2NK} \sum_q \left(\sum_i \sigma_{qi}^x \right)^2 \right] \propto \int \prod_q dm_q^x \int \prod_q d\tilde{m}_q^x \\ \times \exp \left[\frac{\beta N}{K} \sum_q \left(-\frac{\Gamma_h}{2} (m_q^x)^2 - \tilde{m}_q^x m_q^x \right) \right] \exp \left(\frac{\beta}{K} \sum_q \tilde{m}_q^x \sum_i \sigma_{qi}^x \right), \quad (\text{F.12}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \exp \left[-\frac{\beta \Gamma_v}{2QK} \sum_i \left(\sum_q \sigma_{qi}^x \right)^2 \right] \propto \int \prod_i dM_i^x \int \prod_i d\tilde{M}_i^x \\ \times \exp \left[\frac{\beta Q}{K} \sum_i \left(-\frac{\Gamma_v}{2} (M_i^x)^2 - \tilde{M}_i^x M_i^x \right) \right] \exp \left(\frac{\beta}{K} \sum_i \tilde{M}_i^x \sum_q \sigma_{qi}^x \right), \quad (\text{F.13}) \end{aligned}$$

と変形でき，共役変数の積分を鞍点法により評価すると

$$\begin{aligned} \exp \left\{ -\frac{\beta \lambda}{2QK} \sum_i \left[\left(\sum_q \sigma_{qi}^z \right)^2 - 2(1-2\alpha)Q \sum_q \sigma_{qi}^z \right] \right\} \\ \propto \int \prod_i dM_i^z \exp \left(\frac{\beta Q \lambda}{2K} \sum_i (M_i^z)^2 - \frac{\beta \lambda}{K} \sum_i (M_i^z - 1 + 2\alpha) \sum_q \sigma_{qi}^z \right), \quad (\text{F.14}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \exp \left[\frac{\beta \Gamma_1}{K} \sum_{q,i} \sigma_{qi}^x - \frac{\beta \Gamma_2}{2NQK} \left(\sum_{q,i} \sigma_{qi}^x \right)^2 \right] \\ & \propto \int d\phi^x \exp \left(\frac{\beta N Q \Gamma_2}{2K} (\phi^x)^2 - \frac{\beta}{K} (\Gamma_2 \phi^x - \Gamma_1) \sum_{q,i} \sigma_{qi}^x \right), \quad (\text{F.15}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \exp \left[-\frac{\beta \Gamma_h}{2NK} \sum_q \left(\sum_i \sigma_{qi}^x \right)^2 \right] \\ & \propto \int \prod_q dm_q^x \exp \left(\frac{\beta N \Gamma_h}{2K} \sum_q (m_q^x)^2 - \frac{\beta \Gamma_h}{K} \sum_q m_q^x \sum_i \sigma_{qi}^x \right), \quad (\text{F.16}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \exp \left[-\frac{\beta \Gamma_v}{2QK} \sum_i \left(\sum_q \sigma_{qi}^x \right)^2 \right] \\ & \propto \int \prod_i dM_i^x \exp \left(\frac{\beta Q \Gamma_v}{2K} \sum_i (M_i^x)^2 - \frac{\beta \Gamma_h}{K} \sum_i M_i^x \sum_q \sigma_{qi}^x \right), \quad (\text{F.17}) \end{aligned}$$

が得られる． 式 (F.9) と (F.14) より

$$\begin{aligned} & \exp \left(-\frac{\beta}{K} \mathcal{H}_0(\boldsymbol{\sigma}^z) \right) \propto \int \prod_q dm_q^z \int \prod_i dM_i^z \\ & \times \exp \left[-\frac{\beta N Q}{K} \left(\frac{J}{2Q} \sum_q (m_q^z)^2 - \frac{\lambda}{2N} \sum_i (M_i^z)^2 \right) \right] \exp \left(-\frac{\beta}{K} \mathcal{H}_0^{(\text{eff})}(\boldsymbol{\sigma}^z) \right), \quad (\text{F.18}) \end{aligned}$$

$$\mathcal{H}_0^{(\text{eff})}(\boldsymbol{\sigma}^z) \equiv - \sum_{q,i} [J m_q^z - \lambda (M_i^z - 1 + 2\alpha)] \sigma_{qi}^z, \quad (\text{F.19})$$

と変形でき， 式 (F.15) から (F.17) を用いると

$$\begin{aligned} & \exp \left(-\frac{\beta}{K} \mathcal{H}_q(\boldsymbol{\sigma}^x) \right) \propto \int d\phi^x \int \prod_q dm_q^x \int \prod_i dM_i^x \\ & \times \exp \left[\frac{\beta N Q}{K} \left(\frac{\Gamma_2}{2} (\phi^x)^2 + \frac{\Gamma_h}{2Q} \sum_q (m_q^x)^2 + \frac{\Gamma_v}{2N} \sum_i (M_i^x)^2 \right) \right] \exp \left(-\frac{\beta}{K} \mathcal{H}_q^{(\text{eff})}(\boldsymbol{\sigma}^x) \right), \quad (\text{F.20}) \end{aligned}$$

$$\mathcal{H}_q^{(\text{eff})}(\boldsymbol{\sigma}^x) \equiv - \sum_{q,i} (\Gamma_1 - \Gamma_2 \phi^x - \Gamma_h m_q^x - \Gamma_v M_i^x) \sigma_{qi}^x, \quad (\text{F.21})$$

となる．式 (F.18) と (F.20) を式 (F.8) に代入すると

$$\begin{aligned}
Z = & \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{\sigma^z(1)} \cdots \sum_{\sigma^z(K)} \sum_{\sigma^x(1)} \cdots \sum_{\sigma^x(K)} \int d\mathbf{m}^z \int d\mathbf{M}^z \int d\phi^x \int d\mathbf{m}^x \int d\mathbf{M}^x \\
& \times \exp \left[-\frac{\beta N Q}{K} \left(\frac{J}{2Q} \sum_{q,\kappa} (m_q^z(\kappa))^2 - \frac{\lambda}{2N} \sum_{i,\kappa} (M_i^z(\kappa))^2 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{\Gamma_2}{2} \sum_{\kappa} (\phi^x(\kappa))^2 - \frac{\Gamma_h}{2Q} \sum_{q,\kappa} (m_q^x(\kappa))^2 - \frac{\Gamma_v}{2N} \sum_{i,\kappa} (M_i^x(\kappa))^2 \right) \right] \\
& \times \left\langle \sigma^z(\kappa) \left| \exp \left(-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_0^{(\text{eff})}(\hat{\sigma}^z) \right) \right| \sigma^x(\kappa) \right\rangle \left\langle \sigma^x(\kappa) \left| \exp \left(-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_q^{(\text{eff})}(\hat{\sigma}^x) \right) \right| \sigma^z(\kappa+1) \right\rangle,
\end{aligned} \tag{F.22}$$

が得られる．ここで，

$$d\mathbf{m}^z \equiv \prod_{q,\kappa} dm_q^z(\kappa), \tag{F.23}$$

$$d\mathbf{M}^z \equiv \prod_{i,\kappa} dM_i^z(\kappa), \tag{F.24}$$

$$d\phi^x \equiv \prod_{\kappa} d\phi^x(\kappa), \tag{F.25}$$

$$d\mathbf{m}^x \equiv \prod_{q,\kappa} dm_q^x(\kappa), \tag{F.26}$$

$$d\mathbf{M}^x \equiv \prod_{i,\kappa} dM_i^x(\kappa), \tag{F.27}$$

である．さらに，静的近似:

$$m_q^z \equiv m_q^z(\kappa), \tag{F.28}$$

$$M_i^z \equiv M_i^z(\kappa), \tag{F.29}$$

$$\phi^x \equiv \phi^x(\kappa), \tag{F.30}$$

$$m_q^x \equiv m_q^x(\kappa), \tag{F.31}$$

$$M_i^x \equiv M_i^x(\kappa), \tag{F.32}$$

を仮定して完全性 [式 (F.6) と (F.7)] を逆方向に用いると

$$\begin{aligned}
Z = & \int d\mathbf{m}^z \int d\mathbf{M}^z \int d\phi^x \int d\mathbf{m}^x \int d\mathbf{M}^x \\
& \times \exp \left[-\beta N Q \left(\frac{J}{2Q} \sum_q (m_q^z)^2 - \frac{\lambda}{2N} \sum_i (M_i^z)^2 \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{\Gamma_2}{2} (\phi^x)^2 - \frac{\Gamma_h}{2Q} \sum_q (m_q^x)^2 - \frac{\Gamma_v}{2N} \sum_i (M_i^x)^2 \right) \right] \\
& \times \lim_{K \rightarrow \infty} \text{Tr} \left[\exp \left(-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_0^{(\text{eff})}(\hat{\sigma}^z) \right) \exp \left(-\frac{\beta}{K} \hat{\mathcal{H}}_q^{(\text{eff})}(\hat{\sigma}^z) \right) \right]^K,
\end{aligned} \tag{F.33}$$

となる．鈴木-トロッター展開を逆方向に適用すると，

$$Z = \int d\mathbf{m}^z \int d\mathbf{M}^z \int d\phi^x \int d\mathbf{m}^x \int d\mathbf{M}^x e^{-\beta N Q f}, \quad (\text{F.34})$$

$$f = \frac{J}{2Q} \sum_q (m_q^z)^2 - \frac{\lambda}{2N} \sum_i (M_i^z)^2 - \frac{\Gamma_2}{2} (\phi^x)^2 - \frac{\Gamma_h}{2Q} \sum_q (m_q^x)^2 - \frac{\Gamma_v}{2N} \sum_i (M_i^x)^2 - \frac{1}{\beta N Q} \sum_{q,i} \log \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{qi}^{(\text{eff})}}, \quad (\text{F.35})$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{qi}^{(\text{eff})} \equiv - [Jm_q^z - \lambda(M_i^z - 1 + 2\alpha)] \hat{\sigma}^z - (\Gamma_1 - \Gamma_2 \phi^x - \Gamma_h m_q^x - \Gamma_v M_i^x) \hat{\sigma}^x, \quad (\text{F.36})$$

と変形できる． $\hat{\mathcal{H}}_{qi}^{(\text{eff})}$ は 1 スピンのハミルトニアンなので容易に対角化することができる． $\hat{\mathcal{H}}_{qi}^{(\text{eff})}$ の行列表示は

$$\begin{bmatrix} -[Jm_q^z - \lambda(M_i^z - 1 + 2\alpha)] & -(\Gamma_1 - \Gamma_2 \phi^x - \Gamma_h m_q^x - \Gamma_v M_i^x) \\ -(\Gamma_1 - \Gamma_2 \phi^x - \Gamma_h m_q^x - \Gamma_v M_i^x) & [Jm_q^z - \lambda(M_i^z - 1 + 2\alpha)] \end{bmatrix}, \quad (\text{F.37})$$

であるので，固有値 ε_{\pm} は

$$\varepsilon_{\pm} = \sqrt{(h_{qi}^z)^2 + (h_{qi}^x)^2}, \quad (\text{F.38})$$

$$h_{qi}^z \equiv Jm_q^z - \lambda(M_i^z - 1 + 2\alpha), \quad (\text{F.39})$$

$$h_{qi}^x \equiv \Gamma_1 - \Gamma_2 \phi^x - \Gamma_h m_q^x - \Gamma_v M_i^x, \quad (\text{F.40})$$

と求まる．この結果を用いると式 (F.35) の Tr を計算することができ，自由エネルギーとして

$$f = \frac{J}{2Q} \sum_q (m_q^z)^2 - \frac{\lambda}{2N} \sum_i (M_i^z)^2 - \frac{\Gamma_2}{2} (\phi^x)^2 - \frac{\Gamma_h}{2Q} \sum_q (m_q^x)^2 - \frac{\Gamma_v}{2N} \sum_i (M_i^x)^2 - \frac{1}{\beta N Q} \sum_{q,i} \log 2 \cosh \beta \sqrt{(h_{qi}^z)^2 + (h_{qi}^x)^2}, \quad (\text{F.41})$$

が得られ， $\beta \rightarrow \infty$ では

$$f = \frac{J}{2Q} \sum_q (m_q^z)^2 - \frac{\lambda}{2N} \sum_i (M_i^z)^2 - \frac{\Gamma_2}{2} (\phi^x)^2 - \frac{\Gamma_h}{2Q} \sum_q (m_q^x)^2 - \frac{\Gamma_v}{2N} \sum_i (M_i^x)^2 - \frac{1}{N Q} \sum_{q,i} \sqrt{(h_{qi}^z)^2 + (h_{qi}^x)^2}, \quad (\text{F.42})$$

となる．鞍点方程式は

$$m_q^z = \frac{1}{N} \sum_i \frac{h_{qi}^z}{\sqrt{(h_{qi}^z)^2 + (h_{qi}^x)^2}}, \quad (\text{F.43})$$

$$M_i^z = \frac{1}{Q} \sum_q \frac{h_{qi}^z}{\sqrt{(h_{qi}^z)^2 + (h_{qi}^x)^2}}, \quad (\text{F.44})$$

$$\phi^x = \frac{1}{NQ} \sum_{q,i} \frac{h_{qi}^x}{\sqrt{(h_{qi}^z)^2 + (h_{qi}^x)^2}}, \quad (\text{F.45})$$

$$m_q^x = \frac{1}{N} \sum_i \frac{h_{qi}^x}{\sqrt{(h_{qi}^z)^2 + (h_{qi}^x)^2}}, \quad (\text{F.46})$$

$$M_i^x = \frac{1}{Q} \sum_q \frac{h_{qi}^x}{\sqrt{(h_{qi}^z)^2 + (h_{qi}^x)^2}}, \quad (\text{F.47})$$

で与えられる．系の対称性から $M_i^{z,x}$ は i に依存しないと考えられるので，

$$M^z \equiv M_i^z, \quad (\text{F.48})$$

$$M^x \equiv M_i^x, \quad (\text{F.49})$$

とおくと，自由エネルギーは

$$f = \frac{J}{2Q} \sum_q (m_q^z)^2 - \frac{\lambda}{2} (M^z)^2 - \frac{\Gamma_2}{2} (\phi^x)^2 - \frac{\Gamma_h}{2Q} \sum_q (m_q^x)^2 - \frac{\Gamma_v}{2} (M^x)^2 - \frac{1}{Q} \sum_q \sqrt{(h_q^z)^2 + (h_q^x)^2}, \quad (\text{F.50})$$

$$h_q^z \equiv Jm_q^z - \lambda(M^z - 1 + 2\alpha), \quad (\text{F.51})$$

$$h_q^x \equiv \Gamma_1 - \Gamma_2\phi^x - \Gamma_h m_q^x - \Gamma_v M^x, \quad (\text{F.52})$$

となり，鞍点方程式として

$$m_q^z = \frac{h_q^z}{\sqrt{(h_q^z)^2 + (h_q^x)^2}}, \quad (\text{F.53})$$

$$M^z = \frac{1}{Q} \sum_q \frac{h_q^z}{\sqrt{(h_q^z)^2 + (h_q^x)^2}}, \quad (\text{F.54})$$

$$\phi^x = \frac{1}{Q} \sum_q \frac{h_q^x}{\sqrt{(h_q^z)^2 + (h_q^x)^2}}, \quad (\text{F.55})$$

$$m_q^x = \frac{h_q^x}{\sqrt{(h_q^z)^2 + (h_q^x)^2}}, \quad (\text{F.56})$$

$$M^x = \frac{1}{Q} \sum_q \frac{h_q^x}{\sqrt{(h_q^z)^2 + (h_q^x)^2}}, \quad (\text{F.57})$$

が得られる．第 8.4 節と 8.5 節での議論から，1 次相転移を回避するためには量子揺らぎが大きい領域で鞍点方程式 (F.53) が $m_q^z = 0$ の解をもっていなければならない．式 (F.53) が $m_q^z = 0$ の解をもつためには右边が奇関数となればよく， $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_h, \Gamma_v$ の値に依存せずに $M^z = 1 - 2\alpha$ となっている必要がある．一方で， $m_q^z = 0$ と $M^z = 1 - 2\alpha$ を式 (F.54) に代入すると $M^z = 0$ という矛盾した結果が得られてしまう．以上のことから， $\alpha = 1/2$ の場合を除いて，式 (F.53) が $m_q^z = 0$ の解をもつことはあり得ず，全結合 XX 相互作用を導入しても 1 次相転移を回避できないことが示された．

最後に，今回の評価関数 $\hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z)$ では， $\hat{\mathcal{H}}_q(\hat{\sigma}^x)$ の第四項の

$$\frac{\Gamma_2}{2NQ} \left(\sum_{q,i} \hat{\sigma}_{qi}^x \right)^2, \quad (\text{F.58})$$

は第三項の

$$\frac{\Gamma_v}{2Q} \sum_i \left(\sum_q \hat{\sigma}_{qi}^x \right)^2, \quad (\text{F.59})$$

と同じ効果をもたらすことを指摘しておく．式 (F.55) と (F.57) から ϕ^x と M^x は同じ鞍点方程式を満たしており，系の対称性から考えても $\phi^x = M^x$ であると考えられる． $\phi^x = M^x$ を式 (F.52) に代入すると

$$h_q^x = \Gamma_1 - \Gamma_h m_q^x - (\Gamma_2 + \Gamma_v) M^x, \quad (\text{F.60})$$

となる．この式は，実効的な横磁場の強さに対する第四項の影響は，第三項を用いて表現できることを示している．以上より，全スピン間で全結合相互作用する第四項を敢えて導入する必要はなく， q 方向で全結合する量子揺らぎを用いれば十分であることが分かる．

付 録 G 横磁場を印可した SK モデルの自由エネルギーの導出

横磁場を印可した SK モデルの自由エネルギーと鞍点方程式を導出する．ここで取り扱うハミルトニアンは

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) - \Gamma \sum_i \hat{\sigma}_i^x, \quad (\text{G.1})$$

$$\hat{\mathcal{H}}_0(\hat{\sigma}^z) = - \sum_{i < j} J_{ij} \hat{\sigma}_i^z \hat{\sigma}_j^z - h \sum_i \hat{\sigma}_i^z, \quad (\text{G.2})$$

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{J} \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \exp \left[-\frac{N}{2J^2} \left(J_{ij} - \frac{J_0}{N} \right)^2 \right], \quad (\text{G.3})$$

である．ここで、 $P(J_{ij})$ は相互作用の確率分布を表す．

全結合 Potts グラスモデルの場合と同様に、レプリカ法 [式 (E.36)] を用いて自由エネルギーの配位平均 $[f]_J$ を計算する．鈴木-トロッター展開を適用すると、分配関数は z 方向のスピンのみを用いて

$$Z = \lim_{K \rightarrow \infty} \text{Tr} \exp \left[-\frac{\beta}{K} \sum_{\kappa} \mathcal{H}_0(\sigma^{\kappa}) + \frac{1}{2} \log \coth \left(\frac{\beta \Gamma}{K} \right) \sum_{i, \kappa} \sigma_i^{\kappa} \sigma_i^{\kappa+1} + NC \right], \quad (\text{G.4})$$

$$C \equiv \frac{K}{2} \log \sinh \left(\frac{\beta \Gamma}{K} \right) \cosh \left(\frac{\beta \Gamma}{K} \right), \quad (\text{G.5})$$

と表すことができる．ここで、 σ_i^{κ} は κ 番目のトロッタースライスに属する i 番目のスピンを表す． Z^n の配位平均は

$$\begin{aligned} [Z^n]_J &= \lim_{K \rightarrow \infty} e^{nNC} \text{Tr} \exp \left[\frac{\beta h}{K} \sum_{i, \kappa, \alpha} \sigma_i^{\kappa \alpha} + \frac{1}{2} \log \coth \left(\frac{\beta \Gamma}{K} \right) \sum_{i, \kappa, \alpha} \sigma_i^{\kappa \alpha} \sigma_i^{\kappa+1, \alpha} \right] \\ &\quad \times \prod_{i < j} \int dJ_{ij} P(J_{ij}) \exp \left(\frac{\beta J_{ij}}{K} \sum_{\kappa, \alpha} \sigma_i^{\kappa \alpha} \sigma_j^{\kappa \alpha} \right), \end{aligned} \quad (\text{G.6})$$

となる． J_{ij} に関する積分を実行すると

$$\begin{aligned} &\int dJ_{ij} P(J_{ij}) \exp \left(\frac{\beta J_{ij}}{K} \sum_{\kappa, \alpha} \sigma_i^{\kappa \alpha} \sigma_j^{\kappa \alpha} \right) \\ &= \exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{2NK^2} \left(\sum_{\kappa, \alpha} \sigma_i^{\kappa \alpha} \sigma_j^{\kappa \alpha} \right)^2 + \frac{\beta J_0}{NK} \sum_{\kappa, \alpha} \sigma_i^{\kappa \alpha} \sigma_j^{\kappa \alpha} \right] \end{aligned} \quad (\text{G.7})$$

となり，さらに整理すると

$$\int dJ_{ij} P(J_{ij}) \exp \left(\frac{\beta J_{ij}}{K} \sum_{\kappa, \alpha} \sigma_i^{\kappa \alpha} \sigma_j^{\kappa \alpha} \right) \simeq \exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{2NK^2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} \left(\sum_i \sigma_i^{\kappa \alpha} \sigma_i^{\kappa' \alpha'} \right)^2 \right. \\ \left. + \frac{\beta^2 J^2}{4NK^2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha} \left(\sum_i \sigma_i^{\kappa \alpha} \sigma_i^{\kappa' \alpha} \right)^2 + \frac{\beta J_0}{2NK} \sum_{\kappa, \alpha} \left(\sum_i \sigma_i^{\kappa \alpha} \right)^2 \right], \quad (\text{G.8})$$

となる．上式の第一項から第三項は，それぞれガウス積分の公式 [式 (E.7)] を用いて

$$\exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{2NK^2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} \left(\sum_i \sigma_i^{\kappa \alpha} \sigma_i^{\kappa' \alpha'} \right)^2 \right] \\ \propto \int d\xi \exp \left(-\frac{\beta^2 J^2 N}{2K^2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} (\xi_{\kappa \kappa'}^{\alpha \alpha'})^2 + \frac{\beta^2 J^2}{K^2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} \xi_{\kappa \kappa'}^{\alpha \alpha'} \sum_i \sigma_i^{\kappa \alpha} \sigma_i^{\kappa' \alpha'} \right), \quad (\text{G.9})$$

$$\exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{4NK^2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha} \left(\sum_i \sigma_i^{\kappa \alpha} \sigma_i^{\kappa' \alpha} \right)^2 \right] \\ \propto \int d\eta \exp \left(-\frac{\beta^2 J^2 N}{4K^2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha} (\eta_{\kappa \kappa'}^{\alpha})^2 + \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha} \eta_{\kappa \kappa'}^{\alpha} \sum_i \sigma_i^{\kappa \alpha} \sigma_i^{\kappa' \alpha} \right), \quad (\text{G.10})$$

$$\exp \left[\frac{\beta J_0}{2NK} \sum_{\kappa, \alpha} \left(\sum_i \sigma_i^{\kappa \alpha} \right)^2 \right] \\ \propto \int d\mathbf{m} \exp \left(-\frac{\beta J_0 N}{2K} \sum_{\kappa, \alpha} (m_{\kappa}^{\alpha})^2 + \frac{\beta J_0}{K} \sum_{\kappa, \alpha} m_{\kappa}^{\alpha} \sum_i \sigma_i^{\kappa \alpha} \right), \quad (\text{G.11})$$

と i 毎に分離することができる．ここで，

$$d\xi \equiv \prod_{\kappa, \kappa'} \prod_{\alpha < \alpha'} d\xi_{\kappa \kappa'}^{\alpha \alpha'}, \quad (\text{G.12})$$

$$d\eta \equiv \prod_{\kappa, \kappa'} \prod_{\alpha} d\eta_{\kappa \kappa'}^{\alpha}, \quad (\text{G.13})$$

$$d\mathbf{m} \equiv \prod_{\kappa} \prod_{\alpha} dm_{\kappa}^{\alpha}, \quad (\text{G.14})$$

である．式 (G.8) から (G.11) を式 (G.6) に代入すると，分配関数は

$$[Z^n]_J \propto \lim_{K \rightarrow \infty} e^{nNC} \int d\mathbf{m} \int d\xi \int d\eta \exp \left[N \left(-\frac{\beta J_0}{2K} \sum_{\kappa, \alpha} (m_{\kappa}^{\alpha})^2 \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} (\xi_{\kappa \kappa'}^{\alpha \alpha'})^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4K^2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha} (\eta_{\kappa \kappa'}^{\alpha})^2 + \log \text{Tr} e^L \right) \right], \quad (\text{G.15})$$

$$L \equiv \frac{\beta^2 J^2}{K^2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha < \alpha'} \xi_{\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'} \sigma^{\kappa\alpha} \sigma^{\kappa'\alpha'} + \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \sum_{\kappa, \kappa'} \sum_{\alpha} \eta_{\kappa\kappa'}^{\alpha} \sigma^{\kappa\alpha} \sigma^{\kappa'\alpha} \\ + \frac{\beta}{K} \sum_{\kappa, \alpha} (J_0 m_{\kappa}^{\alpha} + h) \sigma^{\kappa\alpha} + \frac{1}{2} \log \coth \left(\frac{\beta\Gamma}{K} \right) \sum_{\kappa, \alpha} \sigma^{\kappa\alpha} \sigma^{\kappa+1, \alpha}, \quad (\text{G.16})$$

となる．次に，静的近似とレプリカ対称性を仮定し，

$$m \equiv m_{\kappa}^{\alpha}, \quad (\text{G.17})$$

$$\xi \equiv \xi_{\kappa\kappa'}^{\alpha\alpha'}, \quad (\text{G.18})$$

$$\eta \equiv \eta_{\kappa\kappa'}^{\alpha}, \quad (\text{G.19})$$

とおくと

$$[Z^n]_J \propto \lim_{K \rightarrow \infty} e^{nNC} \int dm \int d\xi \int d\eta \\ \times \exp \left[nN \left(-\frac{\beta J_0}{2} m^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4} (n-1) \xi^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4} \eta^2 + \log \text{Tre}^L \right) \right], \quad (\text{G.20})$$

$$L = \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \xi \left(\sum_{\kappa, \alpha} \sigma^{\kappa\alpha} \right)^2 + \frac{\beta^2 J^2}{2K^2} (\eta - \xi) \sum_{\alpha} \left(\sum_{\kappa} \sigma^{\kappa\alpha} \right)^2 \\ + \frac{\beta}{K} \sum_{\kappa, \alpha} (J_0 m + h) \sigma^{\kappa\alpha} + \frac{1}{2} \log \coth \left(\frac{\beta\Gamma}{K} \right) \sum_{\kappa, \alpha} \sigma^{\kappa\alpha} \sigma^{\kappa+1, \alpha}, \quad (\text{G.21})$$

となる．再度ガウス積分の公式 [式 (E.7)] を用いると， L の第二項と第三項は

$$\exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{2K^2} \xi \left(\sum_{\kappa, \alpha} \sigma^{\kappa\alpha} \right)^2 \right] = \int Du \exp \left(\frac{\beta J}{K} \sqrt{\xi} u \sum_{\kappa, \alpha} \sigma^{\kappa\alpha} \right), \quad (\text{G.22})$$

$$\exp \left[\frac{\beta^2 J^2}{2K^2} (\eta - \xi) \sum_{\alpha} \left(\sum_{\kappa} \sigma^{\kappa\alpha} \right)^2 \right] = \int Dv \exp \left(\frac{\beta J}{K} \sqrt{\eta - \xi} \sum_{\alpha} v_{\alpha} \sum_{\kappa} \sigma^{\kappa\alpha} \right), \quad (\text{G.23})$$

と変形できる．ここで，

$$Du \equiv \frac{du}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{u^2}{2} \right), \quad (\text{G.24})$$

$$Dv \equiv \prod_{\alpha} \frac{dv_{\alpha}}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{v_{\alpha}^2}{2} \right), \quad (\text{G.25})$$

である．式 (G.22) と (G.23) を用いると

$$\text{Tre}^L = \int Du \left(\int Dv \text{Tre}^{L_T} \right)^n \\ = \int Du \exp \left(n \log \int Dv \text{Tre}^{L_T} \right) \\ \simeq 1 + n \int Du \log \int Dv \text{Tre}^{L_T}, \quad (\text{G.26})$$

と変形できる．ここで，

$$L_{\text{T}} \equiv \frac{\beta J_{\text{T}}}{K} \sum_{\kappa} \sigma^{\kappa} \sigma^{\kappa+1} + \frac{\beta H_{\text{T}}}{K} \sum_{\kappa} \sigma^{\kappa}, \quad (\text{G.27})$$

$$\frac{\beta J_{\text{T}}}{K} \equiv \frac{1}{2} \log \coth \left(\frac{\beta \Gamma}{K} \right), \quad (\text{G.28})$$

$$H_{\text{T}} \equiv J \left(\sqrt{\xi} u + \sqrt{\eta - \xi} v \right) + J_0 m + h, \quad (\text{G.29})$$

$$D_v \equiv \frac{dv}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{v^2}{2} \right), \quad (\text{G.30})$$

とした．さらに，

$$\log \text{Tre}^L \simeq n \int Du \log \int Dv \text{Tre}^{L_{\text{T}}}, \quad (\text{G.31})$$

として式 (G.20) に代入すると，分配関数は

$$\begin{aligned} [Z^n]_J &\propto \lim_{K \rightarrow \infty} \int dm \int d\xi \int d\eta \\ &\times \exp \left[nN \left(-\frac{\beta J_0}{2} m^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4} (n-1) \xi^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4} \eta^2 + \int Du \log \int Dv \text{Tre}^{L_{\text{T}}} + C \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{G.32})$$

と変形できる． $\text{Tre}^{L_{\text{T}}}$ は相互作用と外部磁場が一樣な 1 次元 Ising モデルの分配関数であり， $K \rightarrow \infty$ で

$$\text{Tre}^{L_{\text{T}}} \simeq 2e^{\beta J_{\text{T}}} \cosh \beta \Xi_{\text{T}}, \quad (\text{G.33})$$

$$\Xi_{\text{T}} \equiv \sqrt{H_{\text{T}}^2 + \Gamma^2} \quad (\text{G.34})$$

と書くことができる．式 (G.33) を式 (G.32) に代入すると

$$\begin{aligned} [Z^n]_J &\propto \lim_{K \rightarrow \infty} \int dm \int d\xi \int d\eta \exp \left[nN \left(-\frac{\beta J_0}{2} m^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{\beta^2 J^2}{4} (n-1) \xi^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4} \eta^2 + \int Du \log \int Dv 2 \cosh \beta \Xi_{\text{T}} + \beta J_{\text{T}} + C \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{G.35})$$

となる．指数の肩に含まれる最後の 2 項は $K \rightarrow \infty$ で

$$\beta J_{\text{T}} + C = K \log \cosh \left(\frac{\beta \Gamma}{K} \right) \rightarrow 0, \quad (\text{G.36})$$

となるので，

$$\begin{aligned} [Z^n]_J &\propto \int dm \int d\xi \int d\eta \exp \left[nN \left(-\frac{\beta J_0}{2} m^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{\beta^2 J^2}{4} (n-1) \xi^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4} \eta^2 + \int Du \log \int Dv 2 \cosh \beta \Xi_{\text{T}} \right) \right], \end{aligned} \quad (\text{G.37})$$

が得られる． m, ξ, η に関する積分は鞍点法により評価できるため積分記号を省略し， $n \ll 1$ として式 (G.37) の指数関数を展開すると

$$\frac{[Z^n]_J - 1}{Nn} \simeq -\frac{\beta J_0}{2} m^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4} (n-1) \xi^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4} \eta^2 + \int Du \log \int Dv 2 \cosh \beta \Xi_T, \quad (\text{G.38})$$

と変形できる．式 (E.36) と比較すれば，右辺で $n \rightarrow 0$ としたものが $-\beta[f]_J$ に等しく

$$-\beta[f]_J = -\frac{\beta J_0}{2} m^2 + \frac{\beta^2 J^2}{4} \xi^2 - \frac{\beta^2 J^2}{4} \eta^2 + \int Du \log \int Dv 2 \cosh \beta \Xi_T, \quad (\text{G.39})$$

が得られる．また，鞍点方程式は

$$m = \int Du \frac{\int Dv \frac{H_T}{\Xi_T} \sinh \beta \Xi_T}{\int Dv \cosh \beta \Xi_T}, \quad (\text{G.40})$$

$$\xi = \int Du \left(\frac{\int Dv \frac{H_T}{\Xi_T} \sinh \beta \Xi_T}{\int Dv \cosh \beta \Xi_T} \right)^2, \quad (\text{G.41})$$

$$\eta = \int Du \frac{\int Dv \left(\frac{H_T^2}{\Xi_T^2} \cosh \beta \Xi_T + \frac{\Gamma^2}{\beta \Xi_T^3} \sinh \beta \Xi_T \right)}{\int Dv \cosh \beta \Xi_T}, \quad (\text{G.42})$$

で与えられる．これらの鞍点方程式は，本文中の式 (8.59) から (8.61) と一致している．

謝辞

博士論文を書き上げるにあたって、ご多忙のところ審査員として貴重なご意見を頂きました東北大学大学院情報科学研究科の木下賢吾教授、張山昌論教授に心より御礼申し上げます。また、本研究を進めるにあたり、研究テーマの設定、研究の進め方、発表や論文における研究のまとめ方等に関してご指導頂きました田中和之教授、大関真之准教授に深く感謝致します。社会人博士という形で研究室に滞在する時間を多く取れませんでした、お忙しい中、研究議論のための時間を多く調整して頂けたことで有意義な研究生活を送ることができたと思っております。さらに、奥山真佳助教授、舘山正道特任助教には審査会の発表練習で有益なご意見を多く頂くと共に、普段から研究の議論をさせて頂き深く感謝しております。田中・大関研究室の先生方及び学生の方々には研究や発表について様々なご指導を頂き、また研究室の皆様が活躍する姿に多くの刺激を受ける中で充実した3年間を過ごすことができました。研究室生活でお世話になった全ての方々に厚く御礼申し上げます。

元株式会社デンソーの田口慎一郎課長（現 株式会社シグマアイ）と株式会社デンソーの寺部雅能担当係長には、社会人博士として快く送り出して頂き、会社と大学の研究を両立できるような環境を整えて頂きました。多くの国際会議にも積極的に参加させて頂き、お陰様で実りのある3年間を過ごすことができました。心より御礼申し上げます。

最後に、平日の就業後や休日に自宅で研究に集中する環境を整えて頂き、博士号の取得に協力して頂いた家族に感謝致します。

参考文献

- [1] D. Pisinger, and S. Ropke: “Large Neighborhood Search”, In M. Gendreau, & J. Y. Potvin (Eds.), Handbook of metaheuristics (2nd ed., vol. 10, pp. 399-420). Springer (2010).
- [2] R. K. Ahuja, Ö. Ergun, J. B. Orlin, A. P. Punnen: “A survey of very large-scale neighborhood search techniques”, *Descr. Appl. Math.* **123**, 75-102 (2002).
- [3] F. Barahona: “On the computational complexity of Ising spin glass models”, *Physica A* **388**, 2821-2838 (2009).
- [4] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi: “Optimization by Simulated Annealing”, *Science* **220**, 671-680 (1983),
- [5] E. Marinari, and G. Parisi: “Simulated Tempering: A New Monte Carlo Scheme”, *Eur. Phys. Lett.* **19**, 451 (1992).
- [6] K. Hukushima, and K. Nemoto: “Exchange Monte Carlo Method and Application to Spin Glass Simulations”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 1604-1608 (1996).
- [7] T. Kadowaki, and H. Nishimori: “Quantum annealing in the transverse Ising model”, *Phys. Rev. E* **58**, 5355 (1998).
- [8] J. Houdayer, and O. C. Martin: “Renormalization for Discrete Optimization”, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1030-1033 (1999).
- [9] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, and M. Sipser: “Quantum Computation by Adiabatic Evolution”, *arXiv:quant-ph/0001106* (2000).
- [10] F. Romá, S. Risau-Gusman, A. J. Ramirez-Pastor, F. Nieto, and E. E. Vogel: “The ground state energy of the Edwards-Anderson spin glass model with a parallel tempering Monte Carlo algorithm”, *Physica A* **388**, 2821-2838 (2009).
- [11] W. Wang, J. Machta, and H. G. Katzgraber: “Comparing Monte Carlo methods for finding ground states of Ising spin glasses: Population annealing, simulated annealing, and simulated tempering”, *Phys. Rev. E* **92**, 013303 (2015).
- [12] I. Zintchenko, M. B. Hastings, and M. Troyer: “From local to global ground states in Ising spin glasses”, *Phys. Rev. B* **91**, 024201 (2015).

- [13] S. Geman, and D. Geman: “Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions, and the Bayesian Restoration of Images”, IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell. **6**, 721 (1984).
- [14] G. E. Santoro, R. Martoňák, E. Tosatti, and R. Car: “Theory of Quantum Annealing of an Ising Spin Glass”, Science **295**, 2427 (2002).
- [15] R. Martoňák, G. E. Santoro, and E. Tosatti: “Quantum annealing of traveling-salesman problem”, Phys. Rev. E **70**, 057701 (2004).
- [16] L. Stella, G. E. Santoro, and E. Tosatti: “Optimization by Quantum Annealing: Lessons from Simple Cases”. Phys. Rev. B **72**, 014303 (2005).
- [17] D. A. Battaglia, G. E. Santoro, and E. Tosatti: “Optimization by quantum annealing: Lessons from hard satisfiability problems”, Phys. Rev. E **71**, 066707 (2005).
- [18] H. G. Katzgraber, F. Hamze, and R. S. Andrist: “Glassy Chimeras Could Be Blind to Quantum Speedup: Designing Better Benchmarks for Quantum Annealing Machines”, Phys. Rev. X **4**, 021008 (2014).
- [19] T. Zanca, and G. E. Santoro: “Quantum annealing speedup over simulated annealing on random Ising chains”, Phys. Rev. B **93**, 224431 (2016).
- [20] M. M. Wauters, R. Fazio, H. Nishimori, and G. E. Santoro: “Direct comparison of quantum and simulated annealing on a fully connected Ising ferromagnet”, Phys. Rev. A **96**, 022326 (2017).
- [21] C. Baldassi and R. Zecchina: “Efficiency of quantum vs. classical annealing in nonconvex learning problems”, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **115**, 1457 (2018).
- [22] M. W. Johnson *et al.*: “Quantum annealing with manufactured spins”, Nature **473**, 194-198 (2011).
- [23] A. Lucas: “Ising formulations of many NP problems”, Front. Phys. **2**, 5 (2014).
- [24] Rønnow, T. F. *et al.*: “Defining and detecting quantum speedup”, Science **345**, 420-424 (2014).
- [25] V. S. Denchev, S. Boixo, S. V. Isakov, N. Ding, R. Babbush, V. Smelyanskiy, J. Martinis, and H. Neven: “What is the Computational Value of Finite-Range Tunneling?”, Phys. Rev. X **6**, 031015 (2016).
- [26] H. G. Katzgraber, F. Hamze, Z. Zhu, A. J. Ochoa, and H. Munoz-Bauza: “Seeking Quantum Speedup Through Spin Glasses: The Good, the Bad, and the Ugly”, Phys. Rev. X **5**, 031026 (2016).

- [27] S. Mandrà, Z. Zhu, W. Wang, A. Perdomo-Ortiz, and H. G. Katzgraber: “Strengths and weaknesses of weak-strong cluster problems: A detailed overview of state-of-the-art classical heuristics versus quantum”, *Phys. Rev. A* **94**, 022337 (2016).
- [28] W. Wang, S. Mandrà, and H. G. Katzgraber: “Patch-planting spin-glass solution for benchmarking”, *Phys. Rev. E* **96**, 023312 (2017).
- [29] Z. Bian, F. Chudak, R. Israel, B. Lackey, W. G. Macready, and A. Roy: “Discrete optimization using quantum annealing on sparse Ising models”, *Front. Phys.* **2**, 56 (2014).
- [30] D. Venturelli, D. J.J. Marchand, and G. Rojo: “Quantum Annealing Implementation of Job-Shop Scheduling”, *arXiv:1506.08479* (2015).
- [31] Z. Bian, F. Chudak, R. B. Israel, B. Lackey, W. G. Macready and A. Roy: “Mapping Constrained Optimization Problems to Quantum Annealing with Application to Fault Diagnosis”, *Frontiers in ICT* **3**, 15 (2016).
- [32] C. Wang, H. Chen, and E. Jonckheere: “Quantum versus simulated annealing in wireless interference network optimization”, *Sci. Rep.* **6**, 25797 (2016).
- [33] G. Rosenberg, P. Haghnegahdar, P. Goddard, P. Carr, K. Wu, and M. L. de Prado: “Solving the Optimal Trading Trajectory Problem Using a Quantum Annealer”, *IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing* **10**(6), 1053-1060 (2016).
- [34] E. Boyda, S. Basu, S. Ganguly, A. Michaelis, S. Mukhopadhyay, and R. R. Nemani: “Deploying a quantum annealing processor to detect tree cover in aerial imagery of California”, *PLOS ONE* **12**(2): e0172505 (2017).
- [35] F. Neukart, D. V. Dollen, G. Compostella, C. Seidel, D. V. Dollen, S. Yarkoni, and B. Parney: “Traffic Flow Optimization Using a Quantum Annealer”, *Frontiers in ICT* **4**, 29 (2017).
- [36] D. O’Malley, V. V. Vesselinov, B. S. Alexandrov, and L. B. Alexandrov: “Non-negative/Binary matrix factorization with a D-Wave quantum annealer”, *PLOS ONE* **13**(12): e02067653 (2018).
- [37] S. Yarkoni, A. Plaat, and T. Back: “First results solving arbitrarily structured Maximum Independent Set problems using quantum annealing”, 2018 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC).
- [38] N. Nishimura, K. Tanahashi, K. Suganuma, M. J. Miyama, and M. Ohzeki: “Item Listing Optimization for E-Commerce Websites Based on Diversity”, *Frontiers in Computer Science* **1**, 2 (2019).

- [39] M. Streif, F. Neukart, and M. Lieb: “Solving Quantum Chemistry Problems with a D-Wave Quantum Annealer”, International Workshop on Quantum Technology and Optimization Problems; pp. 111-122 (2019).
- [40] H. Irie, G. Wongpaisarnsin, M. Terabe, A. Miki, and S. Taguchi: “Quantum annealing of vehicle routing problem with time, state and capacity, in Quantum Technology and Optimization Problems; pp. 145-156 (2019).
- [41] M. Ohzeki, A. Miki, M. J. Miyama, and M. Terabe: “Control of automated guided vehicles without collision by quantum annealer and digital devices”, *Front. Comput. Sci.*, **1**, 9 (2019).
- [42] K. Kitai, J. Guo, S. Ju, S. Tanaka, K. Tsuda, J. Shiomi, and R. Tamura: “Expanding the horizon of automated metamaterials discovery via quantum annealing”, arXiv:1902.06573 (2019).
- [43] K. Ikeda, Y. Nakamura, and T. S. Humble: “Application of Quantum Annealing to Nurse Scheduling Problem”, *Sci. Rep.* **9**, 12837 (2019).
- [44] G. Rosenberg, M. Vazifeh, B. Woods, and E. Haber: “Building an iterative heuristic solver for a quantum annealer”, *Comput. Optim. Appl.* **65**, 845 (2016).
- [45] M. Booth, S. P. Reinhardt, and A. Roy: “Partitioning Optimization Problems for Hybrid Classical/Quantum Execution”, http://www.dwavesys.com/sites/default/files/partitioning_QUBOs_for_quantum_acceleration-2.pdf (2017).
- [46] A. Narimani, S. S. C. Rezaei, and A. Zaribafian: “Combinatorial Optimization by Decomposition on Hybrid CPU-nonCPU Solver Architectures”, arXiv:1708.03439 (2017).
- [47] A. Perdomo-Ortiz, S. E. Venegas-Andraca, and A. Aspuru-Guzik: “A study of heuristic guesses for adiabatic quantum computation”, *Quantum Inf. Process.* **10**(1), 33 (2011).
- [48] N. Chancellor: “Modernizing quantum annealing using local searches”, *New J. Phys.* **19**, 023024 (2017).
- [49] “Reverse Quantum Annealing for Local Refinement of Solutions”, https://www.dwavesys.com/sites/default/files/14-1018A-A-Reverse_Quantum_Annealing_for_Local_Refinement_of_Solutions.pdf (2017).
- [50] M. Ohkuwa, H. Nishimori, and D.A. Lidar: “Reverse annealing for the fully connected p-spin model”, *Phys. Rev. A* **98**, 022314 (2018).
- [51] Y. Yamashiro, M. Ohkuwa, H. Nishimori, and D. A. Lidar: “Dynamics of reverse annealing for the fully-connected p-spin model”, arXiv:1906.10889 (2019).

- [52] H. Karimi, and G. Rosenberg: “Boosting quantum annealer performance via sample persistence”, *Quantum Inf. Process.* **16**(7), 166 (2017).
- [53] H. Karimi, G. Rosenberg, and H. G. Katzgraber: “Effective optimization using sample persistence: A case study on quantum annealers and various Monte Carlo optimization methods”, *Phys. Rev. E* **96**, 043312 (2017).
- [54] T. Graß, and M. Lewenstein: “Hybrid annealing: Coupling a quantum simulator to a classical computer”, *Phys. Rev. A* **95**, 052309 (2017).
- [55] B. Lackey: “A belief propagation algorithm based on domain decomposition”, *arXiv:1810.10005* (2018).
- [56] J. King, M. Mohseni, W. Bernoudy, A. Fréchet, H. Sadeghi, S. V. Isakov, H. Neven, and M. H. Amin: “Quantum-Assisted Genetic Algorithm”, *arXiv:1907.00707* (2019).
- [57] D. Pastorello, and E. Blanzieri: “Quantum Annealing Learning Search for solving QUBO problems”, *Quantum Inf. Process.* **18**(10), 303 (2019).
- [58] M. Ohzeki, S. Okada, M. Terabe, and S. Taguchi: “Optimization of neural networks via finite-value quantum fluctuations”, *Sci. Rep.* **8**, 9950 (2018).
- [59] S. Morita, and H. Nishimori: “Mathematical Foundation of Quantum Annealing”, *J. Math. Phys.* **49**, 125210 (2008).
- [60] G. Toulouse: “Theory of the frustration effect in spin glasses: I”, *Commun. Phys.* **2**, 115-119 (1977).
- [61] K. H. Fisher, and J. A. Hertz: “Spin Glasses”, Cambridge University Press (1991).
- [62] D. Sherrington, and S. Kirkpatrick: “Solvable Model of a Spin-Glass”, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1792 (1975).
- [63] D. Sherrington, and S. Kirkpatrick: “Infinite-ranged models of spin-glasses”, *Phys. Rev. B* **17**, 4384 (1978).
- [64] J-S. Wang, R. H. Swendsen: “CLUSTER MONTE CARLO ALGORITHM”, *Physica A* **167**, 565 (1990).
- [65] N. Kawashima, and M. Suzuki: “Replica optimization method for ground-state search of random spin systems”, *J. Phys. A: Math. Gen.* **25**, 1055-1070 (1992).
- [66] J. Houdayer: “A cluster Monte Carlo algorithm for 2-dimensional spin glasses”, *Eur. Phys. J. B* **22**, 479-484 (2001).
- [67] Z. Zhu, A. J. Ochoa, and H. G. Katzgraber: “Efficient Cluster Algorithm for Spin Glasses in Any Space Dimension”, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 077201 (2015).

- [68] Z. Zhu, C. Fang, and H. G. Katzgraber: “borealis- A generalized global update algorithm for Boolean optimization problems”, arXiv:1605.09399 (2016).
- [69] P. I. Bunyk *et al.*: “Architectural considerations in the design of a superconducting quantum annealing processor”, IEEE Transactions Appl. Supercond. **24**, 1700110 (2014).
- [70] N. Robertson, and P. D. Seymour: “Graph Minors .XIII. The Disjoint Paths Problem”, J. Comb. Theory, Ser. B **63**, 65-110 (1995).
- [71] D. Venturelli, S. Mandrà, S. Knysh, B. O’Gorman, R. Biswas, and V. Smelyanskiy: “Quantum Optimization of Fully Connected Spin Glasses”, Phys. Rev. X **5**, 031040 (2015).
- [72] M. H. Amin: “Searching for quantum speedup in quasistatic quantum annealers”, Phys. Rev. A **92**, 052323 (2015).
- [73] S. H. Adachi, M. P. Henderson: “Application of Quantum Annealing to Training of Deep Neural Networks”, arXiv:1510.06356 (2015).
- [74] M. Benedetti, J. Realpe-Gómez, R. Biswas, and A. Perdomo-Ortiz: “Estimation of effective temperatures in quantum annealers for sampling applications: A case study with possible applications in deep learning”, Phys. Rev. A **94**, 022308 (2016).
- [75] M. Benedetti, J. Realpe-Gómez, R. Biswas, and A. Perdomo-Ortiz: “Quantum-Assisted Learning of Hardware-Embedded Probabilistic Graphical Models”, Phys. Rev. X **7**, 041052 (2017).
- [76] M. H. Amin, E. Andriyash, J. Rolfe, B. Kulchytskyy, and R. Melko: “Quantum Boltzmann Machine”, Phys. Rev. X **8**, 021050 (2018).
- [77] R. Harris, Y. Sato, A. J. Berkley, M. Reis, F. Altomare, M. H. Amin, K. Boothby, P. Bunyk, D. Deng, C. Enderud, S. Huang, E. Hoskinson, M. W. Johnson, E. Ladizinsky, N. Ladizinsky, T. Lanting, R. Li, T. Medina, R. Molavi, R. Neufeld, T. Oh, I. Pavlov, I. Perminov, G. Poulin-Lamarre, C. Rich, A. Smirnov, L. Swenson, N. Tsai, M. Volkmann, J. Whittaker, J. Yao: “Phase transitions in a programmable quantum spin glass simulator”, Science **361**, 162-165 (2018).
- [78] A. D. King, J. Carrasquilla, I. Ozfidan, J. Raymond, E. Andriyash, A. Berkley, M. Reis, T. M. Lanting, R. Harris, G. Poulin-Lamarre, A. Y. Smirnov, C. Rich, F. Altomare, P. Bunyk, J. Whittaker, L. Swenson, E. Hoskinson, Y. Sato, M. Volkmann, E. Ladizinsky, M. W. Johnson, J. Hilton, and M. H. Amin: “Observation of topological phenomena in a programmable lattice of 1,800 qubits”, Nature **560**, 456-460 (2018).

- [79] M. Streif, F. Neukart, and M. Leib: “Solving Quantum Chemistry Problems with a D-Wave Quantum Annealer”, International Workshop on Quantum Technology and Optimization Problems; pp 111-122 (2019).
- [80] A. D. King, and C. C. McGeoch: “Algorithm engineering for a quantum annealing platform”, arXiv:1410.2628 (2014).
- [81] A. Perdomo-Ortiz, J. Fluegemann, R. Biswas, and V. N. Smelyanskiy: “A Performance Estimator for Quantum Annealers: Gauge selection and Parameter Setting”, arXiv:1503.01083 (2015).
- [82] K. Boothby, P. Bunyk, J. Raymond, and A. Roy: “Next-Generation Topology of D-Wave Quantum Processors”, https://www.dwavesys.com/sites/default/files/14-1026A-C_Next-Generation-Topology-of-DW-Quantum-Processors.pdf (2019).
- [83] N. Dattani, S. Szalay, and N. Chancellor: “Pegasus: The second connectivity graph for large-scale quantum annealing hardware”, arXiv:1901.07636 (2019).
- [84] F. Hamze, and N. de Freitas: “From Fields to Trees”, Proceedings of the 20th conference on Uncertainty in Artificial Intelligence (AUAI Press, Arlington, Virginia, 2004), pp. 243-250 (2014).
- [85] A. Fix, J. Chen, E. Boros, and R. Zabih: “Approximation MRF Inference Using Bounded Treewidth Subgraphs”, Lecture Notes in Computer Science **7572**, pp 385-398 (2012).
- [86] A. Decelle and F. Krzakala: “Belief-propagation-guided Monte-Carlo sampling”, Phys. Rev. B **89**, 214421 (2014).
- [87] A. Selby: “Efficient subgraph-based sampling of Ising-type models with frustration”, arXiv:1409.3934 (2014).
- [88] V. Choi: “Minor-Embedding in Adiabatic Quantum Computation: I. The Parameter Setting Problems”, Quantum Inf. Process. **7**(5), 193-209 (2008).
- [89] V. Choi: “Minor-Embedding in Adiabatic Quantum Computation: II. Minor-universal graph design”, Quantum Inf. Process. **10**(3), 343-353 (2011).
- [90] J. Cai, B. Macready, and A. Roy: “A practical heuristic for finding graph minors”, arXiv:1406.2741 (2014).
- [91] C. Klymko, B. D. Sullivan, and T. S. Humble: “Adiabatic Quantum Programming: Minor Embedding With Hard Faults”, Quantum Inf. Process. **13**(3), 709 (2014).
- [92] T. Boothby, A. D. King, and A. Roy: “Fast clique minor generation in Chimera qubit connectivity graphs”, Quantum Inf. Process. **15**(1), 495 (2016).

- [93] K. E. Hamilton, and T. S. Humble: “Identifying the minor set cover of dense connected bipartite graphs via random matching edge sets”, *Quantum Inf. Process.* **16**(4), 94 (2017).
- [94] A. Zaribafian, D. J. J. Marchand, and S. S. C. Rezaei: “Systematic and Deterministic Graph Minor Embedding for Cartesian Products of Graphs”, *Quantum Inf. Process.* **16**(5), 136 (2017).
- [95] T. D. Goodrich, B. D. Sullivan, and T. S. Humble: “Optimizing Adiabatic Quantum Program Compilation using a Graph-Theoretic Framework”, *Quantum Inf. Process.* **17**(5), 118 (2018).
- [96] F. Y. Wu: “The Potts model”, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 235 (1982).
- [97] D. J. Gross, I. Kanter and H. Sompolinsky: “Mean-Field Theory of the Potts Glass”, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 304 (1985).
- [98] H. Nishimori and M. J. Stephen: “Gauge-invariant frustrated Potts spin-glass”, *Phys. Rev. B* **27**, 5644-5652 (1983).
- [99] T. Çağlar, and A. N. Berker: “Chiral Potts spin glass in d=2 and 3 dimensions”, *Phys. Rev. E* **94**, 032121 (2016).
- [100] M. Aramon, G. Rosenberg, E. Valiante, T. Miyazawa, H. Tamura, and H. G. Katzgraber: “Physics-Inspired Optimization for Quadratic Unconstrained Problems Using a Digital Annealer”, *Front Phys.* **7**, 48 (2019).
- [101] J. Roland and N. J. Cerf: “Quantum search by local adiabatic evolution”, *Phys. Rev. A* **65**, 042308 (2002).
- [102] R. D. Wilson, A. M. Zagoskin, S. Savel’ev, and M. J. Everitt: “Feedback-controlled adiabatic quantum computation”, *Phys. Rev. A* **86**, 052306 (2012).
- [103] S. Martínez-Garaot, A. Ruschhaupt, J. Gillet, Th. Busch, and J. G. Muga: “Fast quasiadiabatic dynamics”, *Phys. Rev. A* **92**, 043406 (2015).
- [104] R. D. Somma, D. Magaj, and M. Kieferová: “Quantum Speedup by Quantum Annealing”, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 050501 (2012).
- [105] C. Zener: “Non-Adiabatic Crossing of Energy levels”, *Proc. Royal Soc. A* **137**, 696 (1932).
- [106] L. K. Grover: “Quantum Mechanics Helps in Searching for a Needle in a Haystack”, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 325 (1997).
- [107] I. P. Gent, and T. Walsh: “Analysis of heuristics for number partitioning”, *Computational Intelligence* **14**, 356-364 (1998).

- [108] S. Mertens: “Phase Transition in the Number Partitioning Problem”, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4281 (1998).
- [109] S. Mertens: “A physicist’s approach to number partitioning”, *Theor. Comput. Sci.* **265**, 79 (2001).
- [110] H. Nishimori, J. Tsuda, and S. Knysh: “Comparative study of the performance of quantum annealing and simulated annealing”, *Phys. Rev. E* **91**, 012104 (2015).
- [111] R. D. Somma, and C. D. Batista: “Quantum Approach to Classical Statistical Mechanics”, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 030603 (2007).
- [112] K. Kaneko, and H. Nishimori: “Adiabatic Approximation for the Imaginary-Time Schrödinger Equation and Its Application to Simulated Annealing”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 094001 (2015).
- [113] J. Tsuda, Y. Yamanaka, and H. Nishimori: “Energy Gap at First-Order Quantum Phase Transitions: An Anomalous Case”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **82**, 114004 (2013).
- [114] T. Jörg, F. Krzakala, J. Kurchan, and A. C. Maggs: “Simple Glass Models and Their Quantum Annealing”, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 147204 (2008).
- [115] T. Jörg, F. Krzakala, G. Semerjian, and F. Zamponi: “First-Order Transitions and the Performance of Quantum Algorithms in Random Optimization Problems”, *Phys. Rev. Lett* **104**, 207206 (2010).
- [116] T. Jörg, F. Krzakala, J. Kurchan, A. C. Maggs, and J. Pujos: “Energy gaps in quantum first-order mean-field-like transitions: The problems that quantum annealing cannot solve”, *Europhys. Lett.* **89**, 40004 (2010).
- [117] Y. Seki, and H. Nishimori: “Quantum annealing with antiferromagnetic fluctuations”, *Phys. Rev. E* **85**, 051112 (2012).
- [118] M. Ohkuwa, and H. Nishimori: “Exact Expression of the Energy Gap at First-Order Quantum Phase Transitions of the Fully Connected p-Body Transverse-Field Ising Model with Transverse Interactions”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 114004 (2017).
- [119] Y. Seki, and H. Nishimori: “Quantum annealing with antiferromagnetic transverse interactions for the Hopfield model”, *J. Phys. A* **48**, 335301 (2015).
- [120] S. Suzuki, and H. Nishimori: “Quantum annealing of the random-field Ising model by transverse ferromagnetic interactions”, *Phys. Rev. E* **75**, 051112 (2007).
- [121] L. Hormozi, E. W. Brown, G. Carleo, and M. Troyer: “Nonstoquastic Hamiltonians and quantum annealing of an Ising spin glass”, *Phys. Rev. B* **95**, 184416 (2017).
- [122] S. Arai, M. Ohzeki, and K. Tanaka: “Dynamics of order parameters of nonstoquastic Hamiltonians in the adaptive quantum Monte Carlo method”, *Phys. Rev. E* **99**, 032120 (2019).

- [123] M. Suzuki: “Relationship between d -Dimensional Quantal Spin Systems and $(d+1)$ -Dimensional Ising Systems: Equivalence, Critical Exponents and Systematic Approximants of the Partition Function and Spin Correlations”, *Prog. Theor. Phys.* **56**, 1454 (1976).
- [124] M. Ohzeki: “Quantum Monte Carlo simulation of a particular class of non-stoquastic Hamiltonians in quantum annealing”, *Sci. Rep.* **7**, 41186 (2017).
- [125] P. Pfeuty: “The One-Dimensional Ising Model with a Transverse Field”, *Ann. Phys.* **57**, 79-90 (1970).
- [126] M. Suzuki: “Relationship among Exactly Soluble Models of Critical Phenomena. I): 2D Ising Model, Dimer Problem and the Generalized XY-Model”, *Prog. Theor. Phys.* **46**, 1337 (1971).
- [127] I. Hen, and F. M. Spedalieri: “Quantum Annealing for Constrained Optimization”, *Phys. Rev. Appl.* **5**, 034007 (2016).
- [128] I. Hen, and M. S. Sarandy: “Driver Hamiltonians for constrained optimization in quantum annealing”, *Phys. Rev. A* **93**, 062312 (2016).
- [129] K. Kudo: “Constrained quantum annealing of graph coloring”, *Phys. Rev. A* **98**, 022301 (2018).
- [130] D. Thirumalai, Q. Li and T. R. Kirkpatrick, “Infinite-range Ising spin glass in a transverse field”, *J. Phys. A* **22**, 3339 (1989).
- [131] S. F. Edwards, and P. W. Anderson: “Theory of spin glasses”, *J. Phys. F: Met. Phys.* **5**, 965 (1975).

研究業績

学術論文

(査読有り 7 件)

1. Masayuki Ohzeki, Shuntaro Okada, Masayoshi Terabe, and Shinichiro Taguchi: “Optimization of neural networks via finite-value quantum fluctuations”, Scientific Reports, Vol.8, July 2018, Article number:9950 (10 pages) (DOI:10.1038/s41598-018-28212-4)
2. Masayuki Ohzeki, Chako Takahashi, Shuntaro Okada, Masayoshi Terabe, Shinichiro Taguchi and Kazuyuki Tanaka: “Quantum annealing: next-generation computation and how to implement it when information is missing”, Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE, Vol.9, No.4, October 2018, pp.392-405 (DOI: 10.1587/nolta.9.392)
3. Chako Takahashi, Masayuki Ohzeki, Shuntaro Okada, Masayoshi Terabe, Shinichiro Taguchi, and Kazuyuki Tanaka: “Statistical-mechanical analysis of compressed sensing for Hamiltonian estimation of Ising spin glass”, Journal of the Physical Society of Japan, Vol.87, No.7, June 2018, Article ID.074001 (7 pages) (DOI: 10.7566/JPSJ.87.074001)
4. Shuntaro Okada, Masayuki Ohzeki and Kazuyuki Tanaka: “Phase diagrams of one-dimensional Ising and XY models with fully connected ferromagnetic and anti-ferromagnetic quantum fluctuations”, Journal of the Physical Society of Japan, Vol.88, No.2, January 2019, Article ID.024802 (6 pages) (10.7566/JPSJ.88.024802)
5. Shuntaro Okada, Masayuki Ohzeki and Kazuyuki Tanaka: “Difference between quantum annealing by imaginary-time and real-time Schrödinger equations of Grover’s search”, Journal of the Physical Society of Japan, Vol.88, No.2, January 2019, Article ID.024803 (6 pages) (DOI: 10.7566/JPSJ.88.024803)
6. Shuntaro Okada, Masayuki Ohzeki, Masayoshi Terabe and Shinichiro Taguchi: “Improving solutions by embedding larger subproblems in a D-Wave quantum annealer”, Scientific Reports, Vol.9, February 2019, Article number:2098 (10 pages) (DOI: 10.1038/s41598-018-38388-4)
7. Shuntaro Okada, Masayuki Ohzeki and Shinichiro Taguchi: “Efficient partition of integer optimization problems with one-hot encoding”, Scientific Reports, Vol.9,

September 2019, Article number:13036 (12 pages) (DOI: 10.1038/s41598-019-49539-6)

国際会議 口頭発表

(査読無し 4 件)

1. Shuntaro Okada, Masayuki Ohzeki, Masayoshi Terabe and Shinichiro Taguchi: “Our target application and embedding algorithm of subproblems”, Qubits North America 2018, The Park Pavilion and Tennessean Hotel, Knoxville, TN, 79023, United States, September 26, 2018
2. Shuntaro Okada, Masayuki Ohzeki, Masayoshi Terabe and Shinichiro Taguchi: “Improving solutions by embedding larger subproblems in a D-Wave quantum annealer”, 2018 Workshop on Statistical Physics of Disordered Systems and Its Applications, Akiu Resort Hotel Sakan, Sendai, Japan, November 7, 2018
3. Shuntaro Okada, Masayuki Ohzeki and Shinichiro Taguchi: “Partition of Large optimization problems with one-hot constraint”, Qubits Europe 2019, Exelsior Hotel Gallia, Milano, MI, 20124, Italy, March 27, 2019
4. Shuntaro Okada and Masayuki Ohzeki: “Efficient iterative method solving hard constraint in quantum annealing”, Adiabatic Quantum Computing Conference 2019, University of Innsbruck, Innsbruck, Austria, June 28, 2019

国際会議 ポスター発表

(査読無し 3 件)

1. Shuntaro Okada, Shu Tanaka, Masayuki Ohzeki, Masayoshi Terabe and Shinichiro Taguchi: “Reconsideration of adiabatic theorem toward efficient quantum annealing”, Adiabatic Quantum Computing Conference 2017, No.44, GranTokyo South Tower, Tokyo, Japan, June 27, 2017
2. Shuntaro Okada, Masayuki Ohzeki and Kazuyuki Tanaka: “Analytical investigation of effect of relaxation in quantum annealing”, Quantum Machine Learning Biomimetic Quantum Technologies, University of the Basque Country, Leioa, Spain, March 19, 2018
3. Shuntaro Okada, Masayuki Ohzeki, Shu Tanaka, Masayoshi Terabe and Shinichiro Taguchi: “Fast algorithm to embed bigger subproblem to D-Wave machine”, Adiabatic Quantum Computing Conference 2018, NASA Conference Center, Building 3 Moffett Field, CA 94035, June 25, 2018

国内会議 口頭発表

(査読無し 1 件)

1. 岡田 俊太郎, 田中 宗, 大関 真之, 寺部 雅能, 田口 慎一郎:”量子アニーリングの高速化に向けた断熱定理の再考”, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 講演番号 24pJ16-6, 岩手大学, 2017 年 9 月 24 日