

國立政治大學理學院應用物理研究所

碩士論文

Graduate Institute of Applied Physics, College of Science

National Chengchi University

Master Thesis

以模擬量子退火過程探索自旋系統的基態

Approaching ground states of spin systems via simulated
quantum annealing

黃湘喻

Hsiang-Yu Huang

指導教授：林瑜琿 博士

Advisor: Yu-Cheng Lin, Dr. rer. nat.

中華民國一零三年十月

October, 2014

謝辭

首先，感謝我的指導教授林瑜琿老師，在這兩年多以來，不辭辛勞地幫助我，不論在課業或是生活上，皆給予我無限大的指導與寬容，老師用盡心力協助我、訓練我，十分感激。感謝口試委員楊志開所長、清大資工李哲榮老師，給予我的論文指教。感謝政大應物所的教授們與行政人員敏霞姐、宜家姐，在我的課業、行政抑或生活上，時常給予我許多建議與指引。感謝學長姐們，凱鈞、哲仁、柏銘、嘉瑤、景婷、丁順，從我還未入學到畢業，一直給予的幫忙與鼓勵，特別感謝徐哲仁學長在論文研究之餘，仍花費許多時間給予我在程式以及整理資料上的指導與幫助。另外，也感謝張凱鈞學長時常抽空幫我加強觀念、解決問題，非常謝謝你們。感謝與我互相砥礪的同學們，你們真的超過一百分。最後，感謝我最親愛的家人，爸爸、媽媽、弟弟，謝謝你們不論我身處順境抑或逆境，都給予我支持、建議與安慰。



中文摘要

專為解決最佳化問題設計的程式化量子退火計算機——D-Wave 系統——已於近年問世。為瞭解 D-Wave 退火過程的性質，許多研究團隊進行各類型的測試，試圖將 D-Wave 計算機運算效能與其它古典及量子模擬退火演算法作比較。本論文利用量子蒙地卡羅 (quantum Monte Carlo) 計算模擬橫場下的易辛模型，並探討藉降低橫場（量子擾動）逼近量子臨界點的退火動力學之標度行為。我們的結果顯示，隨模擬時間進行退火的動力過程並不反應真實的量子動力現象。我們因此建議，比較量子退火與古典退火的計算測試待需更嚴謹的實驗設計。

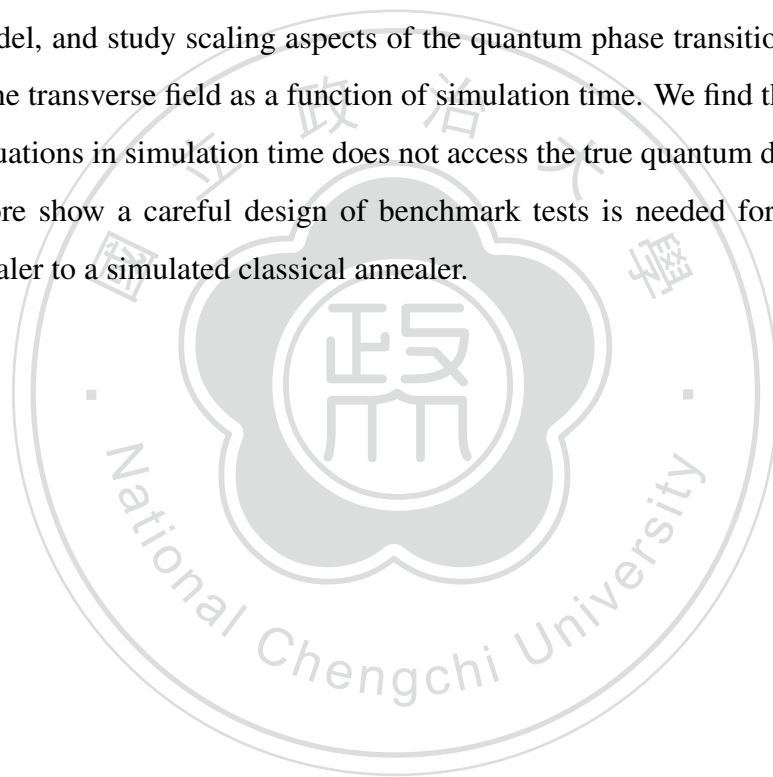


關鍵詞:

D-Wave 計算機, 量子退火, 模擬退火, Kibble-Zurek 機制

Abstract

Recently, a programmable quantum annealing device, the D-Wave system, has been built that attempts to solve optimization problems by adiabatically quenching quantum fluctuations. In order to get insights into the nature of the D-Wave annealing process, different research teams have performed several tests of the D-Wave and compared its performance to other classical and quantum simulated annealing algorithms. In this thesis we use quantum Monte Carlo method to simulate quantum annealing in the transverse-field Ising model, and study scaling aspects of the quantum phase transition approached by changing the transverse field as a function of simulation time. We find that quenching quantum fluctuations in simulation time does not access the true quantum dynamics. Our results therefore show a careful design of benchmark tests is needed for comparing a quantum annealer to a simulated classical annealer.



Keywords:

D-Wave device, quantum annealing, simulated annealing, Kibble-Zurek mechanism

目錄

謝辭	i
中文摘要	ii
英文摘要	iii
1 引言	1
2 自旋模型	3
2.1 自旋 1/2	3
2.2 具交互作用的自旋模型	6
3 量子退火法	10
3.1 量子緩漸演化	10
3.2 模擬量子退火法	11
4 相變臨界點的標度	14
4.1 簡述相變及臨界現象	14
4.2 淬火的標度行爲	19
5 易辛模型的模擬量子退火演算	22
5.1 量子—古典易辛模型的對映	22
5.2 連續虛數時間的蒙地卡羅方法	25
5.3 以標度分析檢驗量子退火法	30
6 總結與展望	38

1

引言

利用超導量子干涉儀 (SQUID) 建構成 128 量子位元 (第一代) 及 512 量子位元 (第二代) 的 D-wave 量子計算機被稱為世界上第一個商用量子電腦。D-wave 計算機非通用電腦，為專門為解決最佳化問題 (optimization problems) 而設計。

所謂最佳化問題是指從問題的多個解中，找出最佳解。在許多最佳化問題中，「旅行商問題」(traveling salesman problem) 被視為經典事例。一位旅行商打算將行程安排到 N 個城市，而這些城市之間的距離不盡相同，但每個城市都必須經過一次，旅行商必須考慮到路線距離以求安排出最短路程，當城市地點很多時，要找出最佳的路線方案變成一個複雜的問題。此類在某限制之下，找著眾多組合中的最佳組合問題為組合最佳化問題 (combinatorial optimization problem)。組合最佳化的問題出現在許多不同的領域，舉凡系統設計、任務計劃、航班規劃、金融分析、網站搜尋、癌症放射治療等等。這些包羅萬象的最佳化問題之成本函數 (cost function) 常可以物理的多體模型的能量函數表示，成本函數的最佳解即為對應物理模型的最低能量組態。試想在僅僅 270 個開關轉換之中，就有遠遠超過宇宙中原子個數的組合數，尋找最佳化組態的挑戰性可見一斑。

面對棘手的最佳化問題，科學界設計出許多通用的最佳化演算法。隨著號稱使用所謂量子退火法 (quantum annealing) 的 D-wave 量子計算機的問世，解決最佳化問題的技術層次可望出現新的局面。考慮當今許多探討 D-wave 計算機性能，並將其運算原理與通用的蒙地卡羅 (Monte Carlo) 模擬量子退火演算法 [1, 2]，或經典的模擬退火法 (simulated annealing) [3] 作比較，本論文藉 Kibble-Zurek 標度

分析 [4, 5, 6, 7] 的觀點來探討此類比較的潛在問題。

本論文的架構大致如下：下一章我們介紹自旋模型，說明此類模型與其它領域的最佳化問題之相關性；第 3 章簡述量子退火法的概念；第 4 章描述相變（包含量子相變）及臨界現象，並根據 Kibble-Zurek 理論簡述淬火過程於臨界點附近的標度行爲；第 5 章介紹我們的計算方法，呈現並討論計算結果。



2

自旋模型

「自旋」(spin) 為粒子 (電子、夸克、質子、中子等等) 具有的內在角動量 (angular momentum)。自旋是純量子力學性質，在古典力學中並無相對應的物理量。自旋是量子化 (quantized) 的，其值只能為：

$$S = \hbar\sqrt{s(s+1)}, \quad (2.1)$$

其中 $\hbar = h/2\pi \approx 1.05457 \times 10^{-34} \text{J}\cdot\text{s}$ 為約化普朗克常數 (reduced Planck constant)， s 為自旋量子數 (spin quantum number)。自旋量子數 s 只可為不為負的整數及半整數，如 $s = 0, 1/2, 1, 3/2 \dots$ 等。自旋量子數為半整數值的粒子稱為費米子 (fermion)，具整數自旋量子數的粒子稱為玻色子 (boson)，這兩類的粒子具不同的統計性質。已知構成物質的基本費米子，如電子及夸克等，均具自旋 $s = 1/2$ 。本章節概述自旋 $s = 1/2$ 的數學性質及由其建構出的模型。

2.1 自旋 1/2

自旋具方向性。如同量子力學中的其它觀察量，自旋可以相對應的厄米算符 (Hermitian operator) 表示；對應 1/2 自旋的 x, y, z 三方量之算符為：

$$S^x = \frac{\hbar}{2}\sigma^x, \quad S^y = \frac{\hbar}{2}\sigma^y, \quad S^z = \frac{\hbar}{2}\sigma^z. \quad (2.2)$$

其中 σ^α ($\alpha = x, y, z$) 為稱為泡立矩陣 (Pauli matrices) 的 2×2 矩陣：

$$\sigma^x \doteq \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y \doteq \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z \doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

上述泡立矩陣是以 z -分量 σ^z 的本徵向量 (eigenvectors) 為基底表示而成的。我們不難檢驗，對任何分量的泡立矩陣之本徵值 (eigenvalues) 均為 ± 1 ；根據量子理論，這表示沿各方向做自旋的量測均可得 $\hbar/2$ 或 $-\hbar/2$ 的測量值，也表示自旋在任一方向的量子化。兩本徵值對應的本徵態 (即本徵向量) 常稱之為「自旋向上」狀態與「自旋向下」狀態。若 σ^z (或 S^z) 的本徵向量表示為

$$|\uparrow\rangle = |+\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = |-\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

則 σ^x 及 σ^y 的本徵向量分別為：

$$|\rightarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle, \quad |\leftarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle \quad (2.5)$$

$$|\nearrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle, \quad |\searrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle. \quad (2.6)$$

各泡立矩陣的本徵向量 (式 (2.4)、(2.5) 或 (2.6)) 各自構成描述自旋 $1/2$ 的二維狀態向量空間 (即希伯特空間 (Hilbert space)) 的一組完備基向量，也就是向量空間中的任何一向量均可以該組兩個基向量線性疊加而成。用量子資訊術語，二維希伯特空間的向量即為所謂「量子位元」(qubit)，而泡立矩陣 (及其他 2×2 矩陣) 為可用來操作單一量子位元的量子閘 (quantum gate)。

上述對自旋 $1/2$ 的描述雖簡單，但或許顯得抽象。事實上，自旋的量子化可於實驗觀察出來。近代物理史上著名的 Stern–Gerlach 實驗 [8] 觀察到原子束通過不均勻磁場會分裂成「自旋向上」及「自旋向下」的兩束原子 (圖 2.1)，此正是歷史上發現自旋及直接觀察到自旋量子化的實驗。如同轉動的帶電物體，自旋亦誘發磁矩 (magnetic moment)。對一帶電量 q ，質量為 m 的自旋 $1/2$ 粒子而言，自

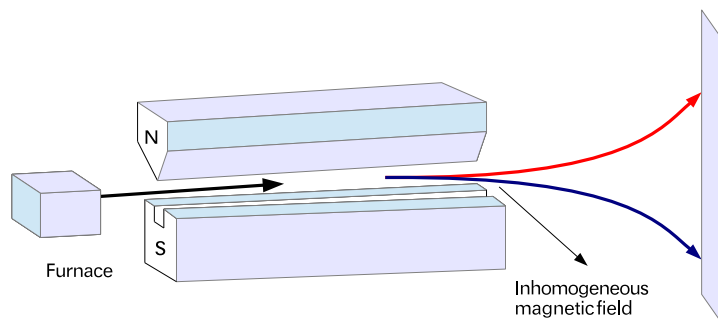


圖 2.1: Stern–Gerlach 實驗示意圖。一束淨自旋 $1/2$ 的原子束通過沿 z 方向的不均勻磁場，因受磁場影響，部分原子朝上偏折，部分朝下偏折，代表自旋 $1/2$ 的兩狀態。

旋產生的內稟磁矩為

$$\vec{\mu} = g_s \frac{q\hbar}{4m} \vec{\sigma}, \quad (2.7)$$

其中 g_s 稱為 g -因子 (g -factor)。在外加磁場 (\vec{B}) 下，磁矩具位能

$$U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}. \quad (2.8)$$

若磁場不均勻，帶自旋的粒子將感受外力 $\vec{F} = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B})$ ；明顯地，此力的方向與自旋狀態有關。這說明為何在 Stern–Gerlach 實驗中，可觀察到因自旋所造成的原子束路徑偏折情形，且因自旋 $1/2$ 具兩本徵值，原子束將分裂成對應兩自旋狀態的路徑。

厄立矩陣的主要特徵之一在於不同分量的矩陣不具乘法交換性 (non-commutative)，也就是它們的乘法順序不能交換；下列等式表達厄立矩陣的不可交換性質：

$$\begin{aligned} [\sigma^x, \sigma^y] &\equiv \sigma^x \sigma^y - \sigma^y \sigma^x = 2i\sigma^z \\ [\sigma^y, \sigma^z] &\equiv \sigma^y \sigma^z - \sigma^z \sigma^y = 2i\sigma^x \\ [\sigma^z, \sigma^x] &\equiv \sigma^z \sigma^x - \sigma^x \sigma^z = 2i\sigma^y. \end{aligned} \quad (2.9)$$

在這裡我們引用量子物理常使用的算符 $[A, B]$ （稱為「對易算符」, commutator）來表示交換 A, B 兩算符乘法順序所得的差： $AB - BA$ 。事實上，式 (2.9) 的關係並不限定於自旋 $1/2$ ，而是對任何大小的自旋量及角動量均成立。兩算符的不可交換性質具有很重要的物理意義，著名的「不確定性原理」(uncertainty

principle，又譯「測不準原理」) 即與其息息相關。

2.2 具交互作用的自旋模型

上節介紹的自旋 $s = 1/2$ 及其數學語言看似簡單，卻可表達許多有趣且具挑戰性的問題。常見的自旋模型是將一組龐大矩陣建構於一無向加權圖形 (undirected weighted graph) 的節點 (nodes, vertices) 上，對應節點間連結 (edges, links) 的權代表自旋間的交互作用強度。許多物理及其他科學領域的問題可藉自旋模型來表達。

物理上，自旋模型主要用以描述磁性物質。上節提到，自旋提供電子內稟磁矩，在一般情形下，這些磁矩因龐大不相容原理及電子組態而互相抵消，或未抵消的淨磁矩因呈現隨機指向而使物質不具磁性。但在外加磁場下，或低溫時的自發效應，有些物質內的大部分電子磁矩將呈現規律排列，而產生一淨總磁矩或淨磁場。以一簡單磁性物質模型為例，Wilhelm Lenz 建構如下一自旋 $1/2$ 的哈密頓算符 (Hamiltonian，即能量算符)，廣知為易辛模型 (Ising model)：

$$H_{\text{Ising}} = - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z, \quad (2.10)$$

其中 J_{ij} 為位於節點 i 與 j 兩個自旋間的交互作用，交互作用的來源可能為磁偶極間的電磁力，或純量子性質的交換交互作用 (exchange interaction)。 J_{ij} 值基本上可為正號或負號。模型也可建構於各類型的無向圖形 (或稱網路上)。在此模

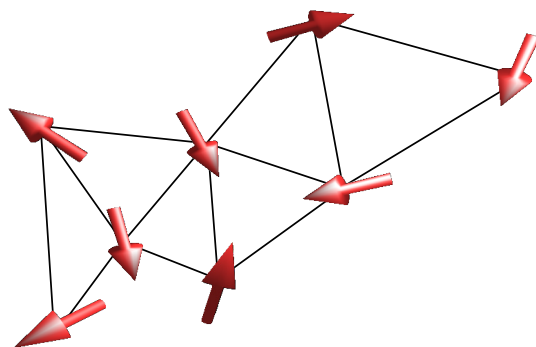


圖 2.2: 自旋模型示意圖。圖形節點的箭頭代表一自旋算符，節點間連結代表自旋間的交互耦合。

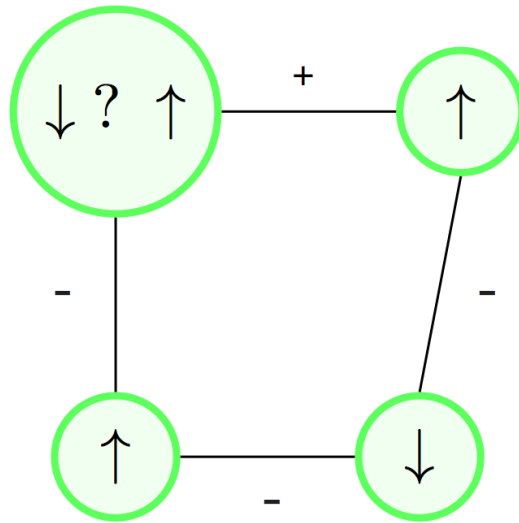


圖 2.3: 具挫折性的交互耦合。正號交互作用連結的一對自旋之能量最低狀態為兩自旋指向相同，負號交互作用連結的一對自旋之能量最低狀態為其指向相反。如此，左上方的自旋無論朝上或朝下均無法同時配合其鍵結相鄰自旋而達「最佳」狀態。

型中，每個節點只包含自旋的 z 分量 σ_i^z ，因此自旋只沿 z 軸指上或指下，也就是說，每個節點的狀態可簡單地用位元 (bit) +1 或 -1 來取代。故式 (2.10) 可簡化成

$$\mathbf{H}_{\text{Ising}} = - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad \sigma_{i(j)} = \pm 1, \quad (2.11)$$

其中 $\sigma_{i(j)}$ 為厄立矩陣 $\sigma_{i(j)}^z$ 的本徵值。若考慮最低能量的狀態（基態），正號交互作用連結的兩自旋應指向同一方向，負號兩自旋應指向相反方向；所以交互耦合 J_{ij} 值全為正的模型描述的是一鐵磁性 (ferromagnetic) 系統，而 J_{ij} 值全為負的模型對應的是一所謂反鐵磁性 (antiferromagnetic) 的系統。如此看似簡單的模型，卻在許多情況下，無法求得最低能量狀態，一典型的例子為所謂的「自旋玻璃」(spin glass)。

自旋玻璃的特徵在於具有極多亞穩態 (metastable states)，在一般實驗可觀察的時間內，系統無法脫離這些亞穩態而達到平衡。「玻璃」一詞用以類比屬非晶形固體 (amorphous solid)、一樣具有無數亞穩態的材質如窗玻璃。所謂的「挫折性」(frustration) 是自旋玻璃模型的必要條件。在上述的易辛模型建構中，挫折性可藉由 J_{ij} 值相互競爭的正負符號來達成。以圖 2.3 為例，因為模型中正負號交互作用的存在使得左上方的自旋無法同時「配合」它的鄰居的狀態來達到鐵磁性或反鐵磁性的最低能量組態；若連結該自旋的兩交互耦合的強度相等，自旋指上

或指下的兩狀態對應的是相同能量的狀態（即「簡併」）。我們可想見，具大量自旋且具挫折性的系統之能量樣貌圖（能量對自旋組態作圖）將呈無數峰谷的複雜形態；系統的基態對應的是能量樣貌圖中的最低點，在數學或資訊科學的語言中，稱為最佳解。自旋玻璃的基態問題長年來是橫跨物理、資科、數學領域的研究題材，相關問題如蛋白質摺疊或神經網路等也使其伸入生物領域，或甚至於計量社會科學領域均可找到其應用。因為無數局域低點將使尋找最佳解的問題變為十分棘手，具效率的演算法仍持續開發中；另外，自旋玻璃的物理理論尚未完整建立，許多長年爭論的問題未見休止，例如關於短程交互耦合模型在熱力學極限下（即系統具有無數多自旋之極限）的基態結構，兩派主流學說的爭議——只存在一對基態的「液滴理論」[9, 10]和存在無數多基態的平均場理論[11, 12, 13]——仍未見定論。

除上述的磁性物質外，自旋模型亦可用來描述許許多多的其它領域的問題。以旅行推銷員問題為例，給定 N 個城市，尋求的是一最短返回原出發城市的迴路，且途中必須經過其它城市一次，而且僅一次。如此的問題即數學圖論中的最短哈密頓迴路 (Hamiltonian cycle)。定義 l_{ij} 為城市 i 與城市 j 間的距離，我們可將這個問題欲求的最短路徑以如下的成本函數 (cost function) 表示：

$$\mathbf{H}_{\text{path}} = \sum_{\alpha=1}^N \sum_{i,j} l_{ij} n_{i,\alpha} n_{j,\alpha+1} \quad (2.12)$$

其中 α 表示拜訪的順位， $n_{i,\alpha} = 0, 1$ 用以記錄城市 i 是否為第 α 順位拜訪的城市，若是（否），則 $n_{i,\alpha} = 1, (0)$ 。明顯地， $n_{i,\alpha}$ 滿足

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^N n_{i,\alpha} &= 1, & \forall i, \\ \sum_{i=1}^N n_{i,\alpha} &= 1, & \forall \alpha, \end{aligned} \quad (2.13)$$

因為每個城市只能被拜訪一次，又我們每次只能造訪一城市，無法同時現身於兩個不同的城市。考慮厄立矩陣 σ^z 具本徵值 ± 1 ，我們可將 \mathbf{H}_{path} 以自旋的語言改

寫為：

$$\mathbf{H}_{\text{path}} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{i,j} l_{ij} \sigma_{i,\alpha}^z \sigma_{j,\alpha+1}^z. \quad (2.14)$$

或更簡單地直接以 $\sigma_{i(j),\alpha}^z$ 之本徵值 $\sigma_{i(j),\alpha} = \pm 1$ 來表示：

$$\mathbf{H}_{\text{path}} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{i,j} l_{ij} \sigma_{i,\alpha} \sigma_{j,\alpha+1}. \quad (2.15)$$

類似式 (2.11) 或式 (2.15) 可以古典位元（古典自旋）表示的哈密頓函數或成本函數沒有呈現任何量子性質，事實上許多磁性物質並無法以此類古典自旋模型描述；例如與高溫超導體息息相關的含銅氧化物 La_2CuO_4 為絕緣反鐵磁性物質，可視為建構於二維方晶格上的所謂「海森堡 (Heisenberg) 自旋模型」：

$$\mathbf{H}_{\text{Heisenberg}} = \sum_{\langle ij \rangle} (J_{ij}^x \sigma_i^x \sigma_j^x + J_{ij}^y \sigma_i^y \sigma_j^y + J_{ij}^z \sigma_i^z \sigma_j^z), \quad J_{ij}^{x(y,z)} > 0 \quad (2.16)$$

式中我們引入 $\langle ij \rangle$ 符號用以代表交互耦合僅涉及相鄰自旋。因為厄立矩陣 $\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z$ 兩兩不對易，無法再如同式 (2.11) 或式 (2.15) 簡單化簡成古典自旋的形式。另外，若在描述易辛模型的哈密頓算符 (2.10) 加一含 x 分量厄立矩陣項，如

$$\mathbf{H}_{\text{qIsing}} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \Gamma \sum_i \sigma_i^x, \quad (2.17)$$

常稱為量子易辛模型，因為 σ_i^z 和 σ_i^x 不對易，哈密頓算符也無法直接單以 σ_i^z 或 σ_i^x 的本徵值（古典自旋）表示，其基態也只能以量子位元狀態來描述。哈密頓算符 (2.17) 中的參數 Γ 常稱為橫向磁場，實驗上常以在橫場下的 LiHoF_4 鐵磁性絕緣體來實現量子易辛模型 [14]。

因為自旋間的交互作用，無論是古典自旋模型或量子自旋模型僅有極少數的情形存有精確解，於是解自旋模型問題成為計算科學的課題。

3

量子退火法

上章提及尋求自旋系統的能量基態問題可表示多類型最佳化問題。本章將描述以量子力學及統計力學觀點出發的解決最佳化問題的方法；這些方法也與 D-wave 量子電腦及其相關研究息息相關。

3.1 量子緩漸演化

量子系統隨時間的演化取決於系統的哈密頓能量算符 H 。系統狀態向量 $|\psi(t)\rangle$ 與時間 t 的關係可由薛丁格方程式 (Schrödinger equation) 描述：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \mathbf{H} |\psi(t)\rangle \quad (3.1)$$

量子緩漸定理闡述：若系統的哈密頓算符極緩慢地變化，一量子系統將隨時保持於一接近其基態的狀態 [15]。這個定理也提供最佳化演算法的基礎。將待求的最佳解表示為某哈密頓算符 H_p 的基態解，所謂的「緩漸量子計算」(adiabatic quantum computation) [16] 以一已知基態解的哈密頓算符 $H(0)$ 為起點，藉緩慢調控哈密頓算符的某一參數，使哈密頓算符經過一長時間 \mathcal{T} 後緩漸轉化成 $H(\mathcal{T}) = H_p$ ：

$$\mathbf{H}(t) = \left(1 - \frac{t}{\mathcal{T}}\right) \mathbf{H}(0) + \frac{t}{\mathcal{T}} \mathbf{H}_p. \quad (3.2)$$

若將系統於起始時間 $t = 0$ 時準備於 $H(0)$ 的基態，根據量子緩漸定理，系統將最終於 $t = T$ 到達（接近）問題哈密頓算符 H_p 的基態，亦即所求問題的最佳解。

理論上緩漸量子計算可解決許多組合的最佳化問題 (combinatorial optimization problem)，當然演算法的效率取決於哈密頓算符演化的時間 T ，而演化時間則與隨時間改變的哈密頓算符 $H(t)$ 之能譜有關，尤其是，它必須至少大於兩個最低能階（基態與第一激發態）間的能隙之平方 [17]。所以演化過程中很小能隙處也是演算法的瓶頸之處。

3.2 模擬量子退火法

尋求複雜問題最佳的解可視為尋求具高峰深谷地形中的最低點，地景的每一點位置為問題可能的組態（微觀狀態、解），對應的高度則代表該解對應的「能量」或「成本」。由 Kirkpatrick 等人提出的「模擬退火法」(simulated annealing) [3] 為一建立於統計力學的試探性 (heuristic) 通用最佳化演算法，溫度被引入作為控制參數，演算法循波茲曼機率分佈 (Boltzmann distribution) 走過高低地形，尋找最低點。比照古典模擬退火法，論文 [18] 建議引入量子控制參數，利用量子穿隧 (quantum tunneling) 通過地形障礙以探索最低點，此法稱為「量子退火法」。

模擬退火法可視為狀態空間（解空間）的離散時間隨機漫步，其探索解空間的基本概念類似著名 Metropolis 蒙地卡羅方法 [19]。Metropolis 演算法藉馬可夫鏈 (Markov chain) 進行狀態空間上的探索，在馬可夫鏈的每一步，根據機率分佈，系統可以從一個組態變到另一個組態，也可以保持當前組態，連結一步前後兩組態 c 和 c' 的轉移機率 (transition probability) 為

$$w_{c,c'} = \begin{cases} 1 & \text{for } E_{c'} \leq E_c \\ e^{-\frac{(E_{c'} - E_c)}{k_B T}} & \text{for } E_{c'} > E_c, \end{cases} \quad (3.3)$$

其中 k_B 為波茲曼常數， $E_{c'}$ 和 E_c 分別表示對應 c 及 c' 的能量（成本），也就是上述地形圖兩點的高度，如此往低處走或高處走的機率均存在。在固定溫度下，無論從狀態空間的任一點出發，Metropolis 演算法將保證經過長時間

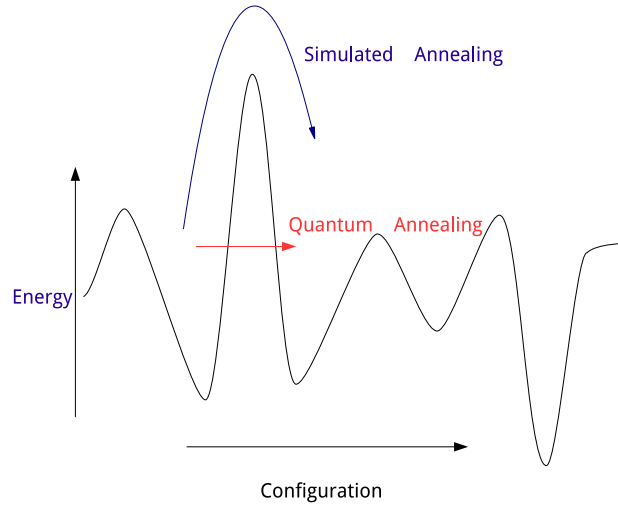


圖 3.1: 模擬退火法以緩慢降溫方式翻越能量地貌圖的障礙找尋系統基態，而量子退火法以緩慢降低量子擾動的方式穿越障礙。

(許多步數) 後系統組態分佈將收斂至一不隨時間改變的平穩分佈 (stationary distribution)，此分佈即為波茲曼分佈。在模擬退火演算法，引入系統的溫度卻非固定的，而是隨著探索狀態空間過程從高溫緩慢下降至零，由式 (3.3) 不難看出，隨溫度遞減往較高能量組態轉移的機率也遞減；若降溫過程夠緩慢，最後到達的組態應接近系統的基態。

不同於上述模擬退火法，量子退火法引進量子擾動 (quantum fluctuation) 為控制參數；這裡量子擾動指的是在欲求其基態的哈密頓算符 H_p 加上一與其不對易的算符。以自旋模型的語言表示，這項引入的算符常稱為橫向磁場；例如，若 H_p 含自旋 z 分量，我們可外加一與 σ^x 有關項 H_q 來表達量子擾動項：

$$H(t) = H_p(\{\sigma^z\}) + \Gamma(t)H_q(\{\sigma^x\}), \quad (3.4)$$

其中 $\Gamma(t)$ 為一隨時間遞減的控制參數。當 H_q 作用於 H_p 的特徵向量時，因 $\sigma^x|\pm\rangle = |\mp\rangle$ ， H_q 扮演的是翻轉自旋狀態的角色。在量子退火法中，我們調控 $\Gamma(t)$ 從某一起始值 Γ_0 緩慢下降至零，例如以線性下降方式：

$$\Gamma(t) = \Gamma_0 \left(1 - \frac{t}{\mathcal{T}}\right), \quad (3.5)$$

式中 $\mathcal{T} \gg 1$ ，當 $t = \mathcal{T}$ 時 $\Gamma(\mathcal{T}) = 0$ ，此時 $H(\mathcal{T}) = H_p$ 。

若以解薛丁格方程式的方式進行時間演化，量子退火演算法可視為與 3.1 節描述的緩漸量子計算相等。不過文獻上許多量子退火法的計算建立在量子蒙地卡羅法 (quantum Monte Carlo methods) [2, 20, 1, 21]，稱為「模擬量子退火演算法」(simulated quantum annealing, SQA) [22]。在這些計算中，量子模型常被對應至多一維度的古典模型，於一有限溫度進行，而非零溫；除此之外，退火時間 (降量子擾動時間) T 也如於模擬退火演算法同以蒙地卡羅時間計算。



4

相變臨界點的標度

上章節描述的退火法——無論是透過古典的降溫或量子的改變哈密頓算符參數——均屬非平衡的過程，過程中當系統逼近臨界點時，動力現象將如同平衡時的臨界現象而呈現普適性，此為所謂的 Kibble-Zurek 理論。首先我們將簡述平衡態的臨界現象，包含於絕對零度時發生的量子臨界點，接著根據 Kibble-Zurek 理論簡述淬火過程於臨界點附近的標度行為。

4.1 簡述相變及臨界現象

相變是指一熱力學系統在外部參數（如：溫度、壓力、磁場等）連續變化之下，從一種相態變成另一種相態的現象。例如物質的固、液、氣三相變化，或加熱磁鐵至鐵磁性消失的變化。相變一般可分兩大類：（一）牽涉潛熱 (latent heat) 及相共存 (phase coexistence) 的「不連續相變」，如物質三相變化；（二）無潛熱及無相共存情形，且在相變點處關聯長度 (correlation length) 呈現無窮大發散情形的「連續相變」，如鐵磁性物質加熱時鐵磁性消失的相變。連續相變點又稱「臨界點」 (critical point)，在這點因為無窮發散的關聯長度，而產生許多有趣且不尋常的現象，稱為「臨界現象」。在本論文我們將只聚焦於連續相變。

我們將以第 2.2 節提及的易辛模型為例，來簡述臨界現象。考慮維度大於一的

方晶格易辛模型 (式 (2.10))，包含 N 個自旋，自旋間的交互耦合為正號常數：

$$\mathbf{H} = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j, \quad J > 0. \quad (4.1)$$

不難看出，雖然自旋組態共有 $\mathcal{N} = 2^N$ ，此系統僅存在兩個基態：所有 σ 值均為 1，或均為 -1 。當系統處於一有限溫度 T 時，部分自旋將翻轉而偏離基態組合，溫度越高自旋組態將趨向 $+1$ 、 -1 各半的無序狀態。若將模型視為鐵磁物質模型，總磁化量定義為

$$M = \sum_i \sigma_i \quad (4.2)$$

在溫度 T 下之平均總磁化量則為：

$$\langle M \rangle = \sum_{c=\{\sigma_i\}} M(c) P(c) \quad (4.3)$$

其中某組態 $c = \{\sigma_i\}$ 出現的機率 $P(c)$ 遵循波茲曼分佈：

$$P(c) = \frac{1}{Z} e^{-\mathbf{H}(c)/k_B T}, \quad Z = \sum_c e^{-\mathbf{H}(c)/k_B T}, \quad (4.4)$$

為使機率 $P(c)$ 滿足歸一化條件： $\sum_c P(c) = 1$ ，上式定義了配分函數 (partition function) Z 。當溫度由零持續上升，磁化量將由對應基態的 $\langle M \rangle = \pm N$ 漸漸變成 $\langle M \rangle = 0$ 。這種由有限磁化量至零磁化量的過程稱為相變。對應有限磁化量的相態稱為「有序相」(ordered phase)，對應零磁化量的相態稱為「無序相」(disordered phase)。磁化量正消失的那一點 $T = T_c$ ，即為相變點 (臨界點)。磁化量得以分別相態有序程度，可視為相變的序參數 (order parameter)。

不同於序參數，有些物理量，如磁化率 (magnetic susceptibility) χ ，在臨界點呈現無窮發散的情形：

$$\lim_{T \rightarrow T_c} \chi \rightarrow \infty. \quad (4.5)$$

磁化率可視為反應磁化量漲落的觀察量，

$$\chi = \frac{\beta}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (4.6)$$

上式也可改寫為

$$\chi = \frac{\beta}{N} \sum_i \sum_j [\langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle]. \quad (4.7)$$

由此我們常定義自旋間的關聯函數 (correlation function) G_{ij} 為

$$G_{ij} \equiv \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - m^2, \quad (4.8)$$

其中 $\langle \sigma_i \rangle$ 與晶格點位置無關，為一常數，同等於磁化量 (密度) m ：

$$m = \frac{M}{N}. \quad (4.9)$$

關聯函數 G_{ij} 描述的正是不同位置局域磁化量漲落的關係

$$G_{ij} = \langle (\sigma_i - m)(\sigma_j - m) \rangle. \quad (4.10)$$

一般而言，對於大於一特徵長度 ξ 之兩點位置間距離 r_{ij} ，關聯函數呈指數般遞減

$$G_{ij} \propto e^{-r_{ij}/\xi}, \quad (4.11)$$

該特徵長度 ξ 稱為關聯長度 (correlation length)，可視為度量多遠兩處的微觀自由度漲落仍具明顯關聯性。於臨界點處，關聯長度呈無窮發散 $\xi \rightarrow \infty$ ，此時系統每一點均緊密互相關聯。發散的關聯長度也意味微觀結構的不重要，也由此產生所謂普適性 (universality) 的概念。

觀察量於臨界點發散或消失的情形常與至臨界點的距離呈現冪次方關係，冪次法則的指數稱為臨界指數 (critical exponents)。定義至臨界溫度 T_c 的距離為

$\delta = (T - T_c)/T_c$ ，在臨界溫度附近，磁化量隨 δ 消失的冪次方關係為

$$m \propto (-\delta)^{\beta_m}, \quad (4.12)$$

$\beta_m (> 0)$ 為對應的臨界指數。關聯長度發散的情形可表示為

$$\xi \propto |\delta|^{-\nu}, \quad (4.13)$$

式中 $\nu > 0$ 稱為關聯長度指數。其它於臨界點發散或消失的觀察量亦有其對應的臨界指數，這一系列的臨界指數刻畫了該臨界點的性質。有趣的是，許多不同系統的臨界點可對應相同的臨界指數，亦即其序參數等觀察量於臨界點及其附近具相似行為，這些臨界現象歸屬於同一普適類 (universality class)。

以二維方晶格易辛模型為例，若交互耦合僅涉及相鄰自旋，已知臨界溫度為 $k_B T_c/J = 2/(\ln(1 + \sqrt{2})) \approx 2.269$ ，磁化量臨界指數為 $\beta_m = 1/8$ ，關聯長度臨界指數為 $\nu = 1$ [23]。已知許多臨界現象，例如單原子流體的液氣分離消失處之臨界點，與易辛模型的臨界點同屬一普適類。若交互耦合具長程性，如任一自旋與系統中其它自旋間均具有交互作用，此時系統維度可視為無窮多，該臨界點屬平均場普適類 (mean field universality class)，對應的磁化量臨界指數為 $\beta_m = 1/2$ ，關聯長度臨界指數為 $\nu = 1/2$ [24]。值得一提的是，一維短程易辛模型不具有限溫度相變，因為有限溫度時任何一磁域壁 (magnetic domain wall) 將使自由能比無磁域壁的有序態之自由能低，而存在任何磁域壁的一維系統屬無序態，故不存在無序—有序相變。另外，二維易辛普適類及平均場普適類屬少數可精確解出的相變問題，絕大部分已解或待解的相變問題（如三維易辛模型）只能仰賴電腦模擬及數值計算。

相變亦可發生於絕對零度，此類藉系統哈密頓算符之某參數 g 調控發生的基態驟變稱為量子相變 (quantum phase transition)。典型量子相變的例子為由（參見 2.2 節）

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z - \Gamma \sum_i \sigma_i^x, \quad (4.14)$$

所描述的量子易辛模型之臨界點，此相變由哈密頓算符中橫場 Γ 與交互耦合強度 J 的比值 $g \equiv \Gamma/J$ 調控發生。不同於有限溫度的熱力學平均（參考式 (4.3) 及

(4.4)，一物理量 Q 於基態 $|\psi_0\rangle$ 的平均值（期望值）表示為

$$\langle Q \rangle = \langle \psi_0 | Q | \psi_0 \rangle, \quad (4.15)$$

其中 Q 為表示該物理量的算符，上式符號代表向量 $Q|\psi_0\rangle$ 與向量 $|\psi_0\rangle$ 之內積。定義基態磁化量（也就是序參數）為

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \langle \psi_0 | \sum_{i=1}^N \sigma_i^z | \psi_0 \rangle. \quad (4.16)$$

當 $\Gamma = 0$ 時，系統基態為 σ_i^z 算符本徵態的張量積： $|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle$ ，或 $|\downarrow\downarrow\cdots\downarrow\rangle$ ，此時基態磁化量之絕對值為最大值 $\langle |m| \rangle = 1$ 。當 $J = 0$ 時，系統基態則為 σ_i^x 算符本徵態的張量積： $|\rightarrow\rightarrow\cdots\rightarrow\rangle$ ，或 $|\leftarrow\leftarrow\cdots\leftarrow\rangle$ ，此時基態磁化量為零 $\langle m \rangle = 0$ 。當控制參數 g 由零調至無窮大，系統基態磁化量將於某臨界值 g_c 消失，此處為量子臨界點；與有限溫度古典臨界點相同，序參數呈冪次方式消失： $\langle m \rangle \propto (-\delta)^{\beta_m}$ ，這裡至臨界點的距離為 $|\delta| = |g - g_c|/g_c$ ；其它觀察量亦於量子臨界點發散或消失，並各有對應的臨界指數，如關聯長度於量子臨界點發散： $\xi \propto |\delta|^{-\nu}$ 。除此之外，系統基態至最低激發態的能隙 Δ 於量子臨界點 ξ_τ 消失：

$$\Delta \propto |\delta|^{z\nu}, \quad (4.17)$$

這裡定義另一臨界指數 z ，稱為動力學指數 (dynamic exponent)。能量尺度之倒數定義一特徵時間 $\xi_\tau \sim \Delta^{-1}$ ，根據上式我們可看出動力學指數建立了量子相變問題時間上及空間上長度之關係

$$\xi_\tau \propto \xi^z. \quad (4.18)$$

處理量子相變問題，常關注的是如何找出系統基態 $|\psi_0\rangle$ 以進一步得出觀察量於基態之期望值 (4.15)。事實上除了平均場解，少數已知基態解的量子自旋模型僅存於一維系統，一維量子自旋系統之研究也提供了許多多體物理領域理論、解析及計算方法。不同於古典（有限溫度）相變問題，一維量子易辛模型具有量子臨界點，且其普適類屬上述的二維古典易辛普適類 [25]。若欲處理多維量子相變問題，只能仰賴數值計算；其中，常見且可靠的計算方式莫過於量子蒙地卡羅

(quantum Monte Carlo) 計算方法，也是本論文將探討的方法。考慮某物理量在溫度 T 時之期望值為

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\phi} \langle \phi | Q e^{-\beta H} | \phi \rangle, \quad Z = \sum_{\phi} \langle \phi | e^{-\beta H} | \phi \rangle, \quad (4.19)$$

其中 $|\phi\rangle$ 為一組完備的基向量。量子蒙地卡羅方法基本出發點建立在量子統計力學的波茲曼機率與時間演進算符 (time evolution operator) 之相似性；當我們將溫度 T 於時間 t 作下列轉換時 (設 $\hbar = 1, k_B = 1$)：

$$\frac{1}{T} \leftrightarrow it, \quad (4.20)$$

我們可將量子統計力學的波茲曼機率與時間演進算符作對比：

$$e^{-\beta H} \leftrightarrow e^{-itH}. \quad (4.21)$$

如此式 (4.19) 中的配分函數可視為狀態向量 $|\phi\rangle$ 藉 $e^{-\beta H}$ 經一段虛數時間 β 演化後又回原狀態的機率振幅之總和，這也是 Feynman 路徑積分方法 [26] 的概念；在這個路徑積分表象，量子系統變成多一虛數時間維度的古典系統，量子相變問題則發生於無限長虛數時間 $\beta \rightarrow \infty$ 極限下；路徑積分表象也有助我們理解空間與時間在量子相變問題是緊密不可分的。我們將於下一章闡述建立於路徑積分的量子蒙地卡羅方法及其於退火法的應用結果。

4.2 淬火的標度行爲

在退火法的進行中，我們將溫度或其它控制參數 (如磁場) 由某一起始值緩慢地調降至零。調降控制參數 (統稱「淬火」) 的速度對於系統缺陷的產生有決定性的影響；Thomas W. B. Kibble [27, 4] 與 Wojciech H. Zurek [5, 28] 分別提出早期宇宙與凝態系統淬煉通過一臨界點時缺陷形成與淬火速度之關係，稱為 Kibble-Zurek 機制 (Kibble-Zurek mechanism)。

以二維易辛模型為例，臨界溫度 T_c 區分高溫時 ($T > T_c$) 的無序態及低溫時

($T < T_c$) 對稱破缺的有序態。在臨界點附近弛豫時間 (relaxation time) 發散，即系統至平衡態所需的時間發散，此稱為臨界慢化現象 (critical slowing down)。弛豫時間 ξ_τ 發散情形可由動力學指數 z' 描述：

$$\xi_\tau \propto \xi^{z'}, \quad (4.22)$$

這裡 z' 除了與平衡態的相變普適類有關，亦與系統隨時間的動態有關；此處動力學指數異於量子臨界點處的哈密頓算符動力學指數 z (參見上節 (4.17) 式)。若降溫過程無限緩慢，通過臨界溫度後，系統將呈現完整有序；倘若以有限降溫率通過臨界溫度，因為臨界點發散的弛豫時間，系統將呈非平衡態，這將導致系統過臨界點後產生缺陷；就最佳化問題而言，缺陷的形成意謂退火後所得的狀態將偏離最佳解。

Kibble-Zurek (KZ) 理論的定量描述大致如下：由式 (4.22) 知弛豫時間 ξ_τ 將於臨界點 T_c 附近以冪次方發散：

$$\xi_\tau \propto |T - T_c|^{-z'\nu}, \quad (4.23)$$

其中 ν 為平衡態關聯長度臨界指數 (見式 (4.13))。我們從某一高於 T_c 之溫度 T_0 出發，以線性方式降溫至零：

$$T(t) = T_0 \left(1 - \frac{t}{\mathcal{T}}\right) = T_0 - vt \quad (0 \leq t \leq \mathcal{T}), \quad (4.24)$$

其中 $v = T_0/\mathcal{T}$ 為降溫速率， \mathcal{T} 為總退火時間。緩慢降溫至臨界點 T_c 附近，因為逐漸發散的弛豫時間，系統動力將不再緩漸演化；根據 KZ 論述，此處至臨界點之尚剩餘時間 $\tau = |T - T_c|/v$ 須至少與弛豫時間 ξ_τ 相當，才得以達到近似平衡的退火過程，也就是滿足緩漸退火的基本條件；由此我們定義一特徵速率 v_{KZ} ，稱為「Kibble-Zurek (KZ) 速率」，來界定淬火快慢的兩種情形：

$$\begin{cases} v \lesssim v_{\text{KZ}} & \text{可緩漸達到平衡態，} \\ v > v_{\text{KZ}} & \text{不能達到平衡態。} \end{cases} \quad (4.25)$$

由

$$\tau_{\text{KZ}} \equiv \frac{T - T_c}{v_{\text{KZ}}} \sim \xi_r \sim |T - T_c|^{-z\nu}, \quad (4.26)$$

我們得出 KZ 速率與至臨界點距離 $|T - T_c|$ 之關係

$$v_{\text{KZ}} \sim |T - T_c|^{1+z'\nu}. \quad (4.27)$$

上述的 KZ 理論亦被擴展至量子系統 [29, 6, 30]。如同上節的描述，量子相變發生於絕對零度，是由改變非溫度的哈密頓算符中之參數 g 引發的基態驟變；對應量子相變的 KZ 速率可表示為

$$v_{\text{KZ}} \sim |g - g_c|^{1+z\nu}, \quad (4.28)$$

這裡的動力學臨界指數 z 對應的是哈密頓動力結果，也是量子相變內稟的動力學問題；在量子退火法中，若模擬過程確實以量子力學時間演化的方式進行，我們應可求得此動力學臨界指數 z 。

5

易辛模型的模擬量子退火演算

在本章節我們將討論針對易辛模型蒙地卡羅退火模擬計算，描述量子蒙地卡羅方法，討論如何透過此方法來探討量子退火問題。我們使用的量子蒙地卡羅方法是建立在所謂「世界線」路徑積分 (worldline path integral) 的表示法上，在這種表示法上，量子易辛模型將對映到多一個維度的古典易辛模型。蒙地卡羅計算則以此對應的古典模型為基礎。以下我們首先推導量子-古典模型的映射，然後描述在對映模型上的蒙地卡羅計算方法。

5.1 量子-古典易辛模型的對映

我們將推導 d 維度的量子易辛模型可對映至 $d+1$ 維的古典易辛模型。首先我們由單一自旋出發，推導量子-古典易辛模型的對映，再將其擴充至多自旋模型的情形。單一自旋的哈密頓算符寫成

$$H = -J\sigma^z - \Gamma\sigma^x \quad (5.1)$$

此算符由 $H_p = -J\sigma^z$ ，及外加橫場項 $H_q = -\Gamma\sigma^x$ 組成， H_p, H_q 兩項互不對易 $[H_p, H_q] \neq 0$ 。因為線性映射的跡數 (trace) (表示為 $\text{Tr}()$) 與選擇的基無關，原則上配分函數

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) \quad (5.2)$$

可以 H_p 或 H_q 的本徵向量表示；這裡我們選取 H_p ，即 σ^z 之本徵向量 $|\sigma\rangle \equiv |\pm\rangle$ （見式 (2.4)），將 Z 寫成

$$Z = \sum_{\sigma=\pm} \langle \sigma | e^{-\beta H} | \sigma \rangle = \sum_{\sigma=\pm} \langle \sigma | e^{-\beta(H_p+H_q)} | \sigma \rangle. \quad (5.3)$$

由於

$$e^{-\beta(H_p+H_q)} \neq e^{-\beta H_p} e^{-\beta H_q}, \quad (5.4)$$

我們利用 Trotter–Suzuki 展開公式 [31, 32]，

$$e^{H_p+H_q} = \lim_{K \rightarrow \infty} \left[e^{\frac{H_p}{K}} e^{\frac{H_q}{K}} \right]^K \quad (5.5)$$

將配分函數進一步寫成

$$Z = \text{Tr} \left(\left[e^{-\frac{\beta}{K}(H_p+H_q)} \right]^K \right) = \lim_{K \rightarrow \infty} \text{Tr} \left(\left[e^{-\frac{\beta H_p}{K}} e^{-\frac{\beta H_q}{K}} \right]^K \right) \quad (5.6)$$

或

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{\sigma^{(1)}=\pm} \langle \sigma^{(1)} | \left[e^{-\frac{\beta H_p}{K}} e^{-\frac{\beta H_q}{K}} \right] \left[e^{-\frac{\beta H_p}{K}} e^{-\frac{\beta H_q}{K}} \right] \cdots \left[e^{-\frac{\beta H_p}{K}} e^{-\frac{\beta H_q}{K}} \right] | \sigma^{(1)} \rangle \\ &= \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{\sigma^{(1)}, \sigma^{(2)}, \dots, \sigma^{(K)}} \langle \sigma^{(1)} | e^{-\frac{\beta H_p}{K}} e^{-\frac{\beta H_q}{K}} | \sigma^{(2)} \rangle \langle \sigma^{(2)} | e^{-\frac{\beta H_p}{K}} e^{-\frac{\beta H_q}{K}} | \sigma^{(3)} \rangle \cdots \langle \sigma^{(K)} | e^{-\frac{\beta H_p}{K}} e^{-\frac{\beta H_q}{K}} | \sigma^{(1)} \rangle \end{aligned} \quad (5.7)$$

其中第二等式利用了基底向量的完備性質：

$$I = \sum_{\sigma^{(k)}=\pm} |\sigma^{(k)}\rangle \langle \sigma^{(k)}| \quad (5.8)$$

這裡（及式 (5.7) 中的） $|\sigma^{(k)}\rangle$ 均表示為 σ^z 厄立矩陣的本徵向量。接著我們計算矩陣元素

$$\langle \sigma | e^{-\frac{\beta H_p}{K}} e^{-\frac{\beta H_q}{K}} | \sigma' \rangle = \langle \sigma | e^{\frac{\beta J}{K} \sigma^x} | \sigma' \rangle e^{\frac{\beta J}{K} \sigma}; \quad (5.9)$$

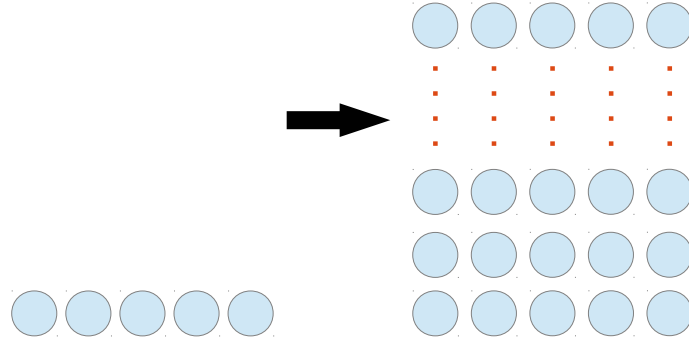


圖 5.1: 一維的自旋量子系統 (左圖) 可對映成多出一虛數時間維度之二維古典自旋系統 (右圖)。

又

$$\langle \sigma | e^{\frac{\beta\Gamma}{K}\sigma^x} | \sigma' \rangle = C e^{B\sigma\sigma'}, \quad (5.10)$$

其中

$$B = -\frac{1}{2} \ln \tanh \left(\frac{\beta\Gamma}{K} \right) > 0, \quad (5.11)$$

$$C = \left[\frac{1}{2} \sinh \left(2 \frac{\beta\Gamma}{K} \right) \right]^{1/2}. \quad (5.12)$$

最終我們整理出配分函數為

$$Z \approx Z_K = C^K \sum_{\sigma^{(1)}} \dots \sum_{\sigma^{(K)}} e^{-S_{\text{eff}}} \quad (5.13)$$

並得等效古典作用量 (classical action) :

$$S_{\text{eff}} = - \sum_{k=1}^K \left(\frac{\beta}{K} J \sigma^{(k)} + B \sigma^{(k)} \sigma^{(k+1)} \right), \quad \sigma^{(K+1)} = \sigma^{(1)} \quad (5.14)$$

上式顯示，一顆自旋如何在外加橫場下，經時間演進而出現虛數時間維度，沿著虛數時間方向有 K 個古典自旋 (即 bits) : $\sigma^{(1)}, \sigma^{(2)}, \dots, \sigma^{(K)}$ ，且 $\sigma^{(K+1)}$ 與 $\sigma^{(1)}$ 連結，形成一週期性邊界條件。虛數時間維度方向上的週期性邊界條件來自於配分函數求跡數的形式 (見式 (5.7))，無關我們實空間上邊界條件的選擇。

依照同樣的法則，我們可得出 d 維的量子系統等效於 $d+1$ 維古典模型，其等

效古典作用量爲：

$$\mathcal{S}_{\text{eff}}^{(d+1)} = - \sum_{k=1}^K \left(\sum_{\langle ij \rangle} \frac{\beta}{K} J_{ij} \sigma_i^k \sigma_j^k + B \sum_i \sigma_i^k \sigma_i^{k+1} \right). \quad (5.15)$$

在這裡我們廣義地將交互耦合 $\{J_{ij}\}$ 寫入加總符號內，容許交互耦合不均勻的情形，例如自旋玻璃（見第 2.2 節）的 $\{J_{ij}\}$ 爲不均勻、正負號混合。多出的虛數時間維度上自旋間的耦合與橫場值 Γ 相關（見式 (5.11) 的 B ），橫場愈強（弱），虛數時間維度自旋間的耦合愈弱（強）。蒙地卡羅計算方法可建立於等效的古典模型 (5.15) [2, 21, 1, 33]；在模擬退火過程中，我們緩慢降低橫場值至零，此時沿虛數時間軸的耦合強度極強，故自旋沿此軸全取同值，系統等效於少了虛數時間軸的古典模型，亦爲待求問題的哈密頓算符。

值得注意的是，式 (5.15) 中的哈密頓函數在虛數時間「層數」 K 有限時，並非精確的量子-古典對映模型。式中的拆解公式在 $K < \infty$ 時的近似爲

$$e^{-\Delta\tau(\mathbf{H}_p + \mathbf{H}_q)} \approx e^{-\Delta\tau\mathbf{H}_p} e^{-\Delta\tau\mathbf{H}_q} + \mathcal{O}((\Delta\tau)^2 [\mathbf{H}_p, \mathbf{H}_q]), \quad \delta\tau \equiv \frac{\beta}{K}. \quad (5.16)$$

下一節我們將討論消弭上式誤差（稱爲 Trotter 誤差）的蒙地卡羅方法。

5.2 連續虛數時間的蒙地卡羅方法

爲了消弭上節因虛數時間離散化所造成的誤差，我們應設法將虛數時間維度上的節點間距取（見式 (5.5)）

$$\Delta\tau \equiv \frac{\beta}{K} = 0. \quad (5.17)$$

以討論的量子易辛自旋系統爲例，我們可沿虛數時間軸以一截「自旋線段」來取代一串相鄰具同自旋值的離散節點。如此，每節自旋線段具有一定長度 τ 及自旋值 $+1$ 或 -1 ；線段的端點也是自旋值變號之處。以下我們討論如何以滿足蒙地卡羅計算方法所要求的「細緻平衡條件」(detailed balance condition) 及叢集更新組態方式來建構自旋線段。

以於第 3.2 節所敘述的 Metropolis 蒙地卡羅方法爲例，我們藉馬可夫鏈進行系

統組態的更新。隨蒙地卡羅時間 t 組態出現的機率分佈 $P_c(t)$ 遵守下列主方程式 (master equation) :

$$P_c(t+1) = P_c(t) + \sum_{c'} (w_{c',c}P_{c'}(t) - w_{c,c'}P_c(t)) \quad (5.18)$$

爲了使組態機率在長時間後 $t \gg 1$ 收斂至一穩定機率分佈 $P^*(t+1) = P^*(t)$ ，一個充分的條件即爲細緻平衡條件：

$$w_{c',c}P_{c'}^* = w_{c,c'}P_c^*. \quad (5.19)$$

若欲使 P_c^* 符合波茲曼機率分佈 $P_c^* \propto e^{-\beta E_c}$ ，原則上我們可設計多種可能的組態更新方式： $c \rightarrow c'$ 及對應的轉移機率 $w_{c,c'}$ 。Metropolis 方法定義從組態 c 至組態 c' 的轉移機率滿足式 (3.3)，且兩組態 c 及 c' 僅有局域的差別（稱爲局域更新 (local updates)），例如僅有一個自旋翻轉的差別。

爲使蒙地卡羅方法更有效率，即能於較短的蒙地卡羅時間使機率分佈 $P_c(t)$ 收斂，一些所謂叢集式更新組態 (cluster updates) 的方式相繼被提出，其中一方法稱爲 Swendsen-Wang 演算法 [34]；此方法將相鄰交互耦合爲 J 且同值的自旋以機率

$$p_{\text{add}} = 1 - e^{-2\beta J} \quad (5.20)$$

納入一叢集 (cluster)，然後以機率 $p_{\text{flip}} < 1$ 集體翻轉叢集內的所有自旋。爲得出式 (5.20) 中的機率，我們考慮一依照 Swendsen-Wang 法則圈選出的任一自旋的叢集（見圖 5.2），視爲組態 c 。根據法則，叢集內所有自旋均是平行的，假設此叢集內包含 N 個自旋交互耦合，又叢集邊界劃過一組連接一個在內及一個在外的自旋對，這組邊界耦合中有 n 個連接平行自旋對及 m 個連結反平行自旋對的耦合（以圖 5.2 的組態 c 爲例： $n = 1, m = 5$ ）；此圈選叢集的機率可寫爲

$$s_c = p_{\text{add}}^N (1 - p_{\text{add}})^n, \quad (5.21)$$

若以機率 p_{flip} 集體翻轉叢集內所有自旋，系統由原本組態 c 轉移至組態 c' ，如此

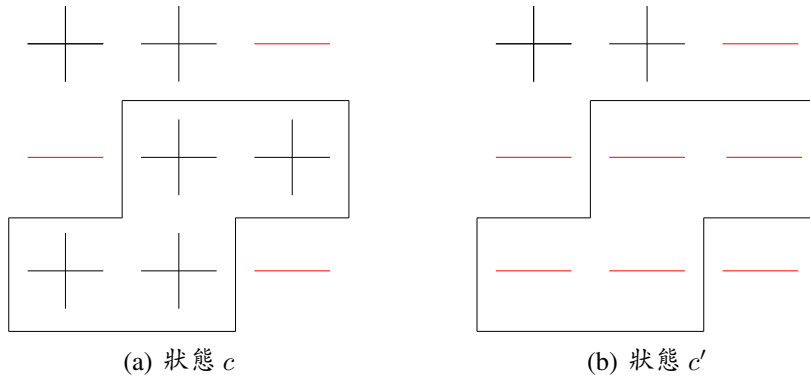


圖 5.2: 易辛模型的 Swendsen-Wang 叢集更新組態示意圖。+, - 符號各代表自旋的兩種朝向；框起來的自旋被納入同一叢集。

我們可寫下轉移機率為

$$w_{c,c'} = s_c p_{\text{flip}}(c \rightarrow c') = p_{\text{add}}^N (1 - p_{\text{add}})^n p_{\text{flip}}(c \rightarrow c'). \quad (5.22)$$

相同的，由組態 c' 轉移至組態 c 的轉移機率為

$$w_{c',c} = s_{c'} p_{\text{flip}}(c' \rightarrow c) = p_{\text{add}}^N (1 - p_{\text{add}})^m p_{\text{flip}}(c' \rightarrow c). \quad (5.23)$$

如此，由細緻平衡條件 (5.19) 得

$$\frac{(1 - p_{\text{add}})^n p_{\text{flip}}(c \rightarrow c')}{(1 - p_{\text{add}})^m p_{\text{flip}}(c' \rightarrow c)} = \frac{e^{-\beta E_{c'}}}{e^{-\beta E_c}} = e^{-\beta(E_{c'} - E_c)} \quad (5.24)$$

因只有跨過叢集邊界的耦合將造成組態更新前後能量差別，不難看出

$$E_{c'} - E_c = 2J(n - m). \quad (5.25)$$

若使

$$\frac{p_{\text{flip}}(c' \rightarrow c)}{p_{\text{flip}}(c \rightarrow c')} = 1, \quad (5.26)$$

我們可得出式 (5.20) 的結果。

為建構連續虛數時間上的自旋線段，我們可由上述 Swendsen-Wang 方法得出

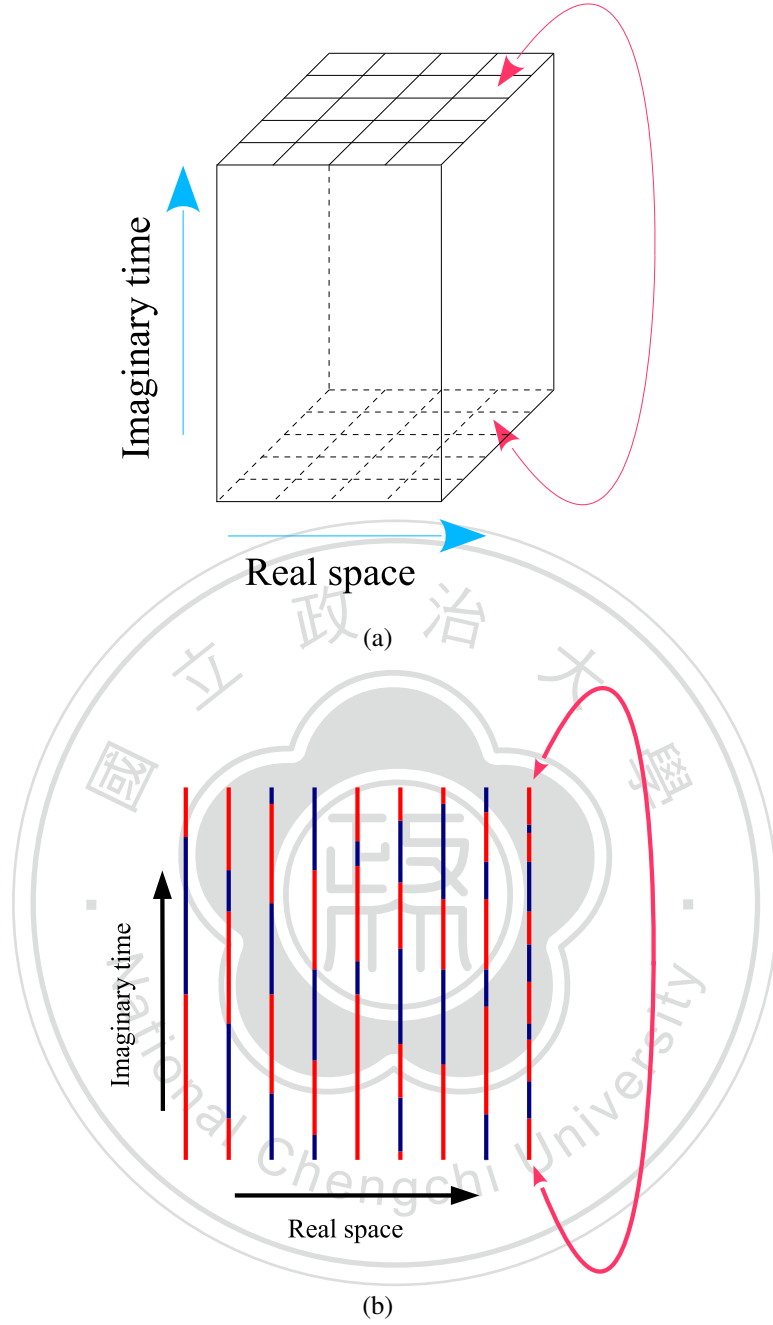


圖 5.3: (a)：加橫場下二維易辛模型對應至多一維度的古典系統之示意圖。箭頭表示虛數時間方向具週期性邊界條件。(b)：上圖縱向截面示意圖。在連續虛數時間極限下，沿虛數時間方向不再是如圖 5.1 具離散的 K 個古典自旋，而是區段式的自旋值。紅色區段表示自旋值 $+1$ ，藍色區段則表示自旋值 -1 。

的機率 p_{add} (式 (5.20)) 定出線段的隨機長度 [35]。考慮等效古典作用量

$$\mathcal{S}_{\text{eff}} \equiv \beta_{\text{cl}} H_{\text{eff}} = - \sum_k \sum_{\langle ij \rangle} \Delta\tau J_{ij} \sigma_i^{(k)} \sigma_j^{(k)} - \sum_k \sum_i B \sigma_i^{(k)} \sigma_i^{(k+1)}, \quad (5.27)$$

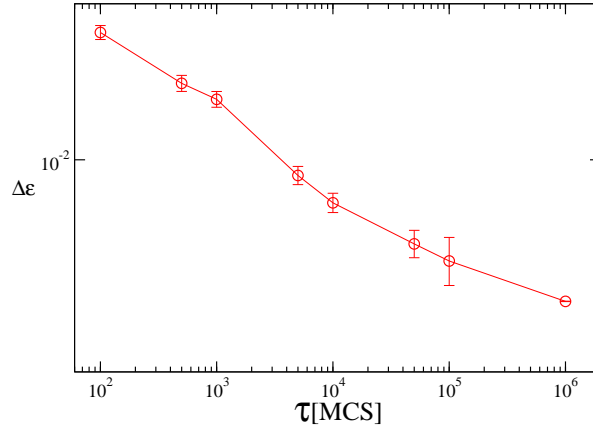


圖 5.4: 針對二維量子 $\pm J$ 易辛自旋玻璃模型之模擬量子退火結果。系統尺度為 16×16 ，虛數時間長度（溫度倒數）為 $\beta = 8$ 。由起始磁場 $\Gamma_0 = 2$ 線性下降至零，觀察退火時間 τ 與剩餘能量 $\Delta\varepsilon$ 之關係。

其中 $B = -\frac{1}{2} \ln \tanh(\Delta\tau\Gamma)$ 為虛數時間方向的自旋交互耦合。根據 Swendsen-Wang 法則，虛數時間維度上自旋被納入一叢集的機率為

$$p_{\text{add}}^{\perp} = 1 - e^{-2B} = 1 - \tanh(\Delta\tau B) \quad (5.28)$$

考量虛數時間連續化，在 $\Delta\tau \rightarrow 0$ 極限下產生一長度為 τ 的自旋線段之機率則為

$$(p_{\text{add}}^{\perp})^{\tau/\Delta\tau} = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} (1 - \tanh(\Delta\tau B))^{\tau/\Delta\tau} = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} (1 - \Delta\tau B)^{\tau/\Delta\tau} = e^{-B\tau}. \quad (5.29)$$

在蒙地卡羅計算中，我們先於每實空間晶格點沿虛數時間方向依式 (5.29) 機率（也就是根據一 Poisson 隨機過程）建構出一組自旋線段，然後再以滿足細緻平衡條件 (5.19) 的轉移機率（例如根據 Metropolis 機率）更新自旋值。

建立在此連續虛數時間蒙地卡羅方法，我們也可進行量子退火最佳化計算。圖 5.4 為對二維自旋玻璃進行模擬量子退火的結果，比較的是線性降橫場至零（式 (3.5)）的退火時間（蒙地卡羅時間） τ 對剩餘能量 $\Delta\varepsilon$ 的影響，這裡所謂剩餘能量是指退火計算所得的單位自旋能量與精確基態能量的差。我們考慮的自旋玻璃只含 $J_{ij} = 1$ 及 $J_{ij} = -1$ （各占 1/2 的機率）的自旋交互耦合，稱為 $\pm J$ 自旋玻璃，其基態能量的精確結果於 [36] 查得。剩餘能量隨著退火時間的增加而

減小，實驗中我們可改變不同參數，如退火速率及溫度倒數 β （相當於虛數時間維度的長度）等，來探討剩餘能量的變化；此方向的研究結果可見於許多文獻 [1, 2, 20]，但下一節我們將以有限尺度標度分析的觀點指出模擬量子退火計算的潛在問題。

5.3 以標度分析檢驗量子退火法

第 4 章討論物理量於臨界點附近的冪次法則暗示「尺度不變性」(scale invariance)，其意思是指系統的物理性質不因尺度的改變而有所改變。又相變現象只發生於熱力學極限下，也就是當系統的尺度無窮大時 $L = \infty$ 。臨界點的尺度不變性提供了如何將有限系統的觀察量推至熱力學極限的方法，稱為「有限尺度標度」(finite-size scaling)。

以量子易辛模型為例，絕對零度時 z 方向基態磁化量 (m) 隨著至量子臨界點距離 $|\delta| = |g - g_c|/g_c$ 呈冪次方的消失： $m \sim |\delta|^{\beta_m}$ ，又因關聯長度與 $|\delta|$ 的關係 $\xi \sim |\delta|^{-\nu}$ ，我們得出

$$m \sim \xi^{-\beta_m/\nu}. \quad (5.30)$$

但當系統尺度有限時，關聯長度 ξ 最大值受制於系統尺寸 L 。當 ξ 逼近 L 時，系統達到赭臨界點 (pseudocritical point)，赭臨界點位置偏離熱力學極限下的真實臨界點位置，且與系統尺寸相關：

$$|\delta_L| \sim L^{-1/\nu}. \quad (5.31)$$

於赭臨界點位置磁化量 m^* 與系統尺寸 L 之關係為

$$m^*(L) \sim L^{-\beta_m/\nu}. \quad (5.32)$$

另外，量子臨界點發生於絕對零度時 $\beta = \infty$ ，就上節討論的古典對映模型而言，量子相變不僅發生在實空間尺度為無窮大時，且虛數時間上的長度亦須無窮大。同實空間情形，虛數時間上的關聯長度（關聯時間） ξ_τ 受限於溫度倒數 β 。根據

標度化理論 [24]，我們可將有限尺寸及有限溫度系統的磁化量寫成

$$\begin{aligned} m(g, L, \beta) &= L^{-\beta_m/\nu} F(L/\xi, \beta/\xi_\tau) \\ &= L^{-\beta_m/\nu} \tilde{F}((g - g_c)L^{1/\nu}, \beta L^{-z}), \end{aligned} \quad (5.33)$$

稱為標度形式 (scaling form)，其中 ξ 及 ξ_τ 為無窮大系統於絕對零度時的關聯長度及關聯時間；第二個等式利用了式 (5.31) 及 $\xi_\tau \sim \xi^z$ 的關係，這裡的動力學指數 z 描述的是量子力學取決於哈密頓算符的動力學現象。

上述的標度分析亦可推廣至淬火動力現象。依據 Kibble-Zurek 理論（見第 4.2 節的討論），區別緩慢及非緩慢淬火演化的特徵速率 v_{KZ} （KZ 速率）與至臨界點距離 $|\delta|$ 之關係為 $v_{\text{KZ}} \sim |\delta|^{1+z'/\nu}$ ，又因為 $\xi \sim |\delta|^{-\nu}$ ，可得

$$v_{\text{KZ}} \sim \xi^{-(z'+1/\nu)}, \quad (5.34)$$

考慮有限尺度情形，KZ 速率 $v_{\text{KZ}}(L)$ 與系統線性長度 L 的關係則為

$$v_{\text{KZ}}(L) \sim L^{-(z'+1/\nu)}. \quad (5.35)$$

考慮以有限速率 v 從一非臨界點藉改變哈密頓算符參數 g 淬火至量子臨界點 g_c ，我們可類似上述平衡態臨界點的討論將淬火過程的磁化量之標度形式寫為

$$\begin{aligned} m(v, L, \beta) &= L^{-\beta_m/\nu} G(v/v_{\text{KZ}}, \beta/\xi_\tau) \\ &= L^{-\beta_m/\nu} \tilde{G}(vL^{-(z'+1/\nu)}, \beta L^{-z}). \end{aligned} \quad (5.36)$$

值得注意的是，若淬火過程能真實反應量子動力學，淬火動力學指數 z' 應等同於量子動力學指數 z ， $z' = z$ 。我們這裡先保留 z' 與 z 之區分。

為了瞭解蒙地卡羅模擬量子退火方法的動力學性質，我們以一維量子易辛模型為例，藉調降橫向磁場淬火接近量子臨界點，並計算縱向磁化量平方 $\langle m^2 \rangle$ ，利用上述的標度分析來檢驗 KZ 理論。我們的實驗設計主要參考最近一篇研究古典易辛模型退火動力學的論文 [7]。我們考慮一長度（量子自旋數）為 L ，且僅具相

鄰交互作用 J 及橫場 Γ 的量子易辛自旋鏈

$$\mathbf{H} = -J \sum_{i=1}^L \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \Gamma \sum_{i=1}^L \sigma_i^x, \quad (5.37)$$

在不失普遍性下，我們設 $J = 1$ 。另外，我們引入週期性邊界條件

$$\sigma_{L+1} = \sigma_1. \quad (5.38)$$

於溫度倒數為 $\beta = 1/T$ 時，量子鏈可對映至二維古典模型，其多出的虛數時間維度方向長度為 β ，且亦具週期性邊界條件（見第 5.1 節）。另外，我們消弭虛數時間離散化所帶來的誤差，考慮連續化的虛數時間，如此對映的古典自旋為沿虛數時間軸遵循一 Poisson 隨機過程延伸的線段。為方便後續討論，我們註記實空間上晶格點位置為 i ，賦予每一自旋線段一指標 k ，自旋線段長度表示為 τ_i^k ，自旋值則以 $\sigma_i^k = \pm 1$ 表示。在對映的古典模型上，給定一自旋組態，我們所計算的局域磁化量可寫為

$$m = \frac{1}{L\beta} \sum_{i=1}^L \sum_k \sigma_i^k \tau_i^k. \quad (5.39)$$

我們採用兩種更新組態方式的蒙地卡羅計算：（一）根據 Metropolis 機率局域更新組態：每一自旋線段以下機率更新自旋值：

$$p_{\text{local}} = \min [1, e^{-\beta\Delta E}], \quad (5.40)$$

其中 ΔE 為翻轉一線段之自旋值前後的能量差；若表示 $\tau_{i,i\pm 1}^{k,k'}$ 為晶格點 i 上自旋線段 k 與相鄰晶格點 $i \pm 1$ 上其它自旋線段 k' 的交疊長度，更新前後的能量差可寫成

$$\Delta E = \frac{2J}{\beta} \sigma_i^k \sum_{k'} \left(\tau_{i,i-1}^{kk'} \sigma_{i-1}^{k'} + \tau_{i,i+1}^{kk'} \sigma_{i+1}^{k'} \right). \quad (5.41)$$

一完整的過程包含對系統所有線段嘗試以式 (5.40) 機率更新自旋值。（二）叢集式更新組態 [35]：根據 Swendsen-Wang 機率連結一組自旋線段。考慮實空間維度上鄰近具相同自旋值的兩自旋線段，若其交疊長度為 τ ，則根據 Swendsen-Wang

法則，將此兩自旋線段納入一叢集的機率為（參見式 (5.20)）：

$$p_{\text{add}} = 1 - e^{-2\tau J}. \quad (5.42)$$

依此圈選多個同自旋值的線段成一叢集後，我們再以 1/2 的機率集體改變叢集內所有線段的自旋值。

在蒙地卡羅計算中，我們從起始橫場值 $\Gamma_0 = 5$ 以不同的速率 v 線性降橫場值至量子臨界點 $\Gamma_c = 1$ 。在這裡我們以蒙地卡羅時間為調控橫場（淬火）的時間單位，而一單位的蒙地卡羅時間包含沿虛數時間軸自旋線段的建構，及根據上述（一）局域式或（二）叢集式的自旋值更新。若總淬火時間為 \mathcal{T} ，淬火過程中，橫場與時間的關係可寫為

$$\Gamma(t) - \Gamma_c = v(\mathcal{T} - t), \quad (5.43)$$

其中淬火速率為

$$v = \frac{\Gamma_0 - \Gamma_c}{\mathcal{T}}. \quad (5.44)$$

待橫場被調控到達臨界值 $\Gamma(\mathcal{T}) = \Gamma_c$ 時，我們才進行一次磁化量平方 m^2 的測量。重複多次（約一千次）相同條件但不同起始自旋組態的淬火，我們計算這些淬火過程得出的磁化量平方之平均值 $\langle m^2 \rangle$ 。我們之所以求磁化量平方平均（而非磁化量平均）之原因，在於正負自旋的對稱性，將使磁化量平均因正負抵消而為零。我們對不同長度 L 的自旋鏈做上述退火計算，然後以下列標度形式

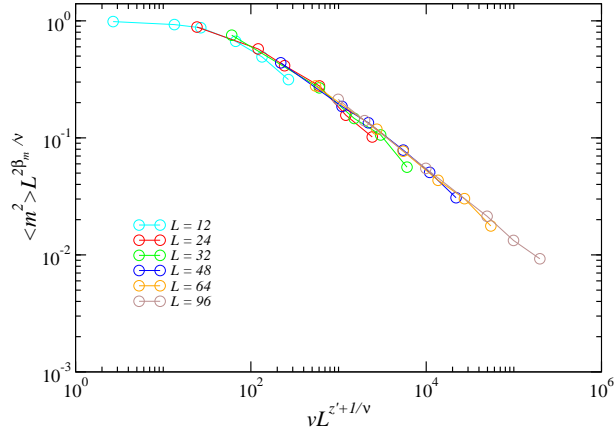
$$\langle m^2 \rangle = L^{-2\beta_m/\nu} \tilde{G}(vL^{-(z'+1/\nu)}, \beta L^{-z}). \quad (5.45)$$

分析磁化量平方的結果。

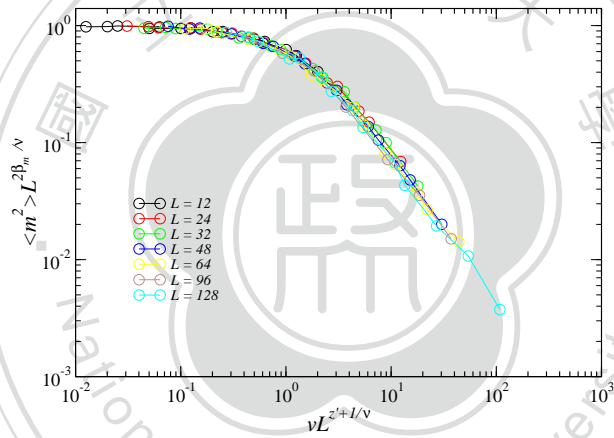
為了降低式 (5.45) 中標度函數 $\tilde{G}(x, y)$ 的變量，在實際計算中我們固定溫度倒數 β 與系統長度 L 的關係： $\beta L^{-z} = \text{constant}$ ，因量子動力學指數已知為 $z = 1$ ，我們取

$$\beta L^{-1} = \text{constant}. \quad (5.46)$$

如此，標度函數的第二變量可被移除。再利用其它已知的臨界指數：關聯長度臨界指數 $\nu = 1$ ，磁化量臨界指數 $\beta_m = 1/8$ ，標度分析待定的變量僅存淬火動力學



(a) 局域式更新組態方法； $z' = z'_{\text{Metropolis}} = 2.167$



(b) 叢集式更新組態方法； $z' = z'_{\text{sw}} = 0.297$

圖 5.5: 以兩種蒙地卡羅方法藉降橫場值 Γ 模擬量子退火至量子臨界點 ($\Gamma_c = 1$) 所得的磁化量平方 $\langle m^2 \rangle$ 。(a) 採用 Metropolis 局域式更新組態的方法；(b) 採用 Swendsen-Wang 叢集式更新組態的方法。起始橫場值均為 $\Gamma_0 = 5$ ，但以不同速率隨蒙地卡羅時間進行線性退火（調降橫場），量子系統的溫度倒數 β 選取為 $\beta = L/2$ ；這裡溫度倒數與系統尺度關係的選取滿足量子動力學指數 $z = 1$ 。圖中每一點數據點為約一千次退火過程結果的平均。數據根據式 (5.45) 的標度形式做整理，配合的臨界指數分別為 $\nu = 1$ ， $\beta_m = 1/8$ ；淬火動力學指數 z' 不同於量子動力學指數 $z = 1$ ，而與蒙地卡羅方法相關。

指數 z' 。圖 5.5 的分析結果顯示兩種不同的蒙地卡羅方法對應不同的淬火動力學指數，而各對應的指數正符合已知的二維古典易辛模型之蒙地卡羅動力指數，而非量子動力學指數 $z = 1$ ($\neq z'$)；以 Metropolis 方法局域更新組態，已知較精確的估計值為 [37, 7]

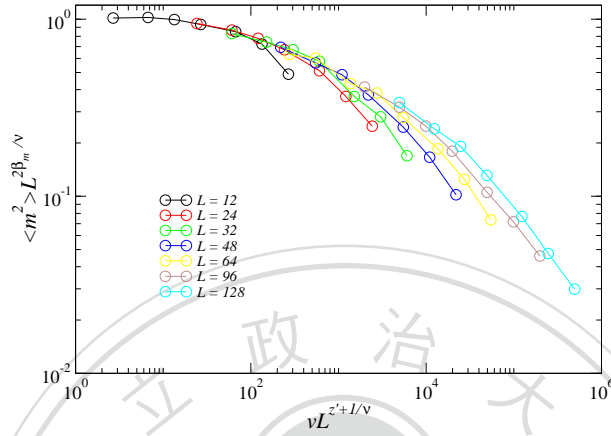
$$z'_{\text{Metropolis}} = 2.1667(5). \quad (5.47)$$

而 Swendsen-Wang 叢集式更新組態方法對應的動力學指數已被估計約為 $z'_{\text{sw}} \approx 0.2 - 0.35$ [38, 39, 40, 41]，甚至 $z'_{\text{sw}} = 0$ [42]，近期論文 [7] 的估計值為

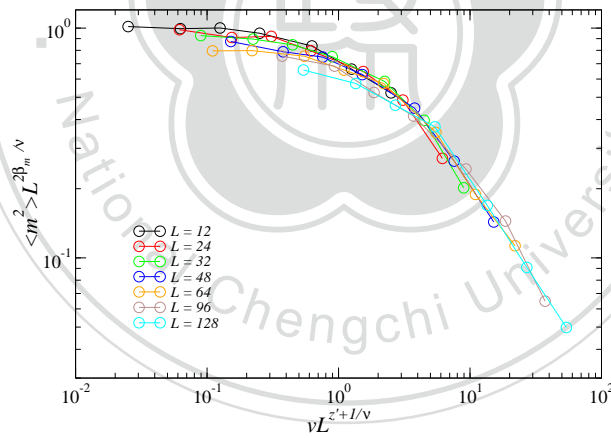
$$z'_{\text{sw}} = 0.297(3). \quad (5.48)$$

蒙地卡羅動力學指數愈小，表示該方法在計算上愈能克服臨界點附近的動力慢化問題 (critical slowing down)，也就是較有效率的方法。由式 (5.35) KZ 速率與系統尺度 L 的關係來看，指數 $z' + 1/\nu$ 愈大表示為使退火過程保持緩減所需的退火時間將隨系統尺度增大而成長愈快。

我們的結果也顯示另外一個重要的訊息：因為 $z' \neq z$ ，以蒙地卡羅方法模擬量子退火並無法反應真實的量子動力。在寫作本論文之際，我們得知另一研究團隊亦針對一維量子易辛鏈以不同的量子蒙地卡羅方法得出與我們相同的結果 [43]。不同於 [43] 的計算，我們的量子蒙地卡羅計算是於有限溫度 $\beta < \infty$ 下進行，現有文獻上探討蒙地卡羅量子退火方法之研究也多採用有限溫度路徑積分蒙地卡羅方法 [2, 21, 1, 33]。這裡我們指出，溫度倒數 β 的選取也將影響淬火的結果；就我們所悉，這類的探討並不在其它文獻中被考慮。圖 5.6 及圖 5.7 分別展示不符合式 (5.46) $\beta - L$ 關係的計算結果，其中圖 5.6 數據為固定 $\beta^2/L = \text{constant}$ 的結果，而圖 5.7 數據為固定 $\beta = 8$ 的結果；標度分析顯示兩者數據均無法理想地滿足式 (5.45) 的形式。在一般探討量子蒙地卡羅退火最佳化計算中，我們不知道待解的問題模型（如 d 維度自旋玻璃）加上量子擾動項的量子動力學指數 z ，故任意選取 β 值，將無法反應這裡所討論的 KZ 標度擬設。在此我們無法斷言如此錯誤選擇溫度（及量子動力學指數）的計算對尋求最佳解的影響，也無法評斷以此得出的結果與所謂量子電腦做比較的正當性，但就標度分析的觀點而言，此類計算實驗的設計（如 [21] 的設計）恐站在錯誤理論基礎上。

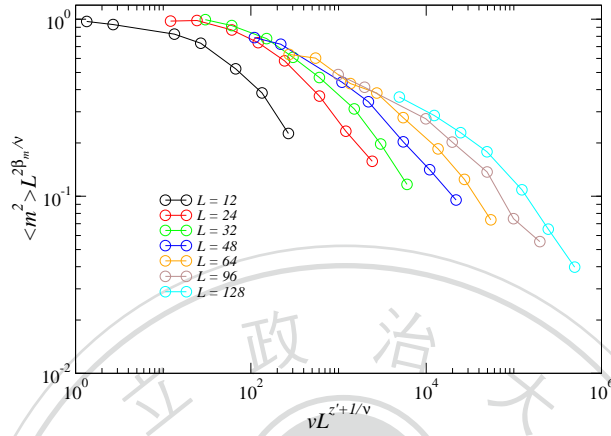


(a) 局域式更新組態方法； $z' = z'_{\text{Metropolis}} = 2.167$

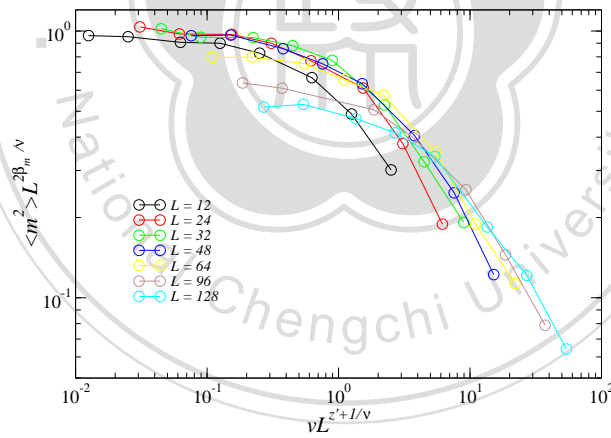


(b) 叢集式更新組態方法； $z' = z'_{\text{SW}} = 0.297$

圖 5.6: 以兩種蒙地卡羅方法藉降橫場值 Γ 模擬量子退火至量子臨界點所得的磁化量平方 $\langle m^2 \rangle$ 。(a) 採用 Metropolis 局域式更新組態的方法；(b) 採用 Swendsen-Wang 叢集式更新組態的方法。數據以雷同圖 5.5 的方法整理得出，但這裡的溫度倒數 β 與系統尺度 L 的關係定為 $\beta = \sqrt{L}$ ，如此不符合量子動力學指數 $z = 1$ 的選取，造成對應不同系統大小的數據不能理想地根據式 (5.45) ($\nu = 1$, $\beta_m = 1/8$) 的標度形式坐落於一曲線上。



(a) 局域式更新組態方法； $z' = z'_{\text{Metropolis}} = 2.167$



(b) 叢集式更新組態方法； $z' = z'_{\text{SW}} = 0.297$

圖 5.7: 以兩種蒙地卡羅方法藉降橫場值 Γ 模擬量子退火至量子臨界點所得的磁化量平方 $\langle m^2 \rangle$ 。(a) 採用 Metropolis 局域式更新組態的方法；(b) 採用 Swendsen-Wang 叢集式更新組態的方法。數據以雷同圖 5.5 的方法整理得出，但這裡對任何系統尺度 L 的溫度倒數均取為 $\beta = 8$ ，如此不符合量子動力學指數 $z = 1$ 的選取，造成對應不同系統大小的數據不能理想地根據式 (5.45) ($\nu = 1$, $\beta_m = 1/8$) 的標度形式坐落於一曲線上。

6

總結與展望

本論文討論蒙地卡羅模擬量子退火的動力學行爲。模擬量子退火方法可視爲一通用的最佳化演算法，方法中在待解的古典模型裡引入量子擾動作爲控制參數，引入的量子擾動將隨時間緩漸而調弱至零，此時系統理想上可達到（幾近）最佳的狀態（即最佳解）。

以一維橫場下的易辛模型爲例，我們採用連續虛數時間的路徑積分量子蒙地卡羅方法作計算。我們以不同速率調降橫場值至臨界值，並以 Kibble-Zurek (KZ) 的動力標度擬設檢驗縱向磁化量的淬火行爲。根據 Kibble-Zurek 的理論，淬火的速率存在一臨界值 v_{KZ} ，稱爲 KZ 速率；若淬火速率至少慢於 v_{KZ} ，系統得以緩漸達到平衡態；若淬火速率快於 v_{KZ} ，系統將演化至呈現缺陷的狀態。對於有限尺度的系統，KZ 速率與系統線性長度 L 呈冪次方的遞減：

$$v_{\text{KZ}} \sim L^{-\alpha} = L^{-(z'+1/\nu)}, \quad (6.1)$$

其中 z' 爲（淬火）動力學指數，而 ν 爲關聯長度臨界指數。就 KZ 指數 $\alpha = z' + 1/\nu$ 而言，其值愈大，保持緩漸退火所需的時間隨著系統尺度增大而成長愈快，故效率較好的最佳化演算法對應較小的 KZ 指數。

在量子蒙地卡羅計算中，我們採用 Metropolis 式局域更新自旋組態方法，及 Swendsen-Wang (SW) 叢集式更新組態的方法；橫場的調降根據蒙地卡羅時間進行。計算結果顯示，淬火動力學指數 z' 爲與更新組態方法相關的值，分別爲

$z'_{\text{Metropolis}} \approx 2.167$ 及 $z'_{\text{SW}} \approx 0.297$ ，而非等同於量子動力學指數 $z = 1$ ；這也顯示，所謂模擬量子退火法並不反應真實的量子動力學。

因為採用的路徑積分子蒙地卡羅方法是於有限的溫度下進行，而溫度倒數 $\beta = 1/T$ 對應的即為所謂虛數時間之長度。計算上，我們固定 $\beta L^{-z} = \beta L^{-1} = \text{constant}$ 來引入正確的量子動力學指數 $z = 1$ 。我們也檢驗得出，錯誤 $\beta - L$ 關係的選取將導致 KZ 標度分析上的問題。

本論文的研究結果將可提供目前一些比較 D-wave 量子電腦的運算方法與模擬量子退火最佳化計算實驗設計上的參考。



References

- [1] G. E. Santoro, R. Martoňák, E. Tosatti, and R. Car, *Science* **295**, 2427 (2002).
- [2] R. Martoňák, G. E. Santoro, and E. Tosatti, *Phys. Rev. B* **66**, 094203 (2002).
- [3] S. Kirkpatrick et al., *science* **220**, 671 (1983).
- [4] T. W. Kibble, *Physics Reports* **67**, 183 (1980).
- [5] W. Zurek, *Nature* **317**, 505 (1985).
- [6] A. Polkovnikov, *Phys. Rev. B* **72**, 161201 (2005).
- [7] C.-W. Liu, A. Polkovnikov, and A. W. Sandvik, *Phys. Rev. B* **89**, 054307 (2014).
- [8] B. Friedrich and D. Herschbach, *Physics Today* **56**, 53 (2003).
- [9] D. S. Fisher and D. A. Huse, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1601 (1986).
- [10] D. S. Fisher and D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **38**, 386 (1988).
- [11] G. Parisi, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1754 (1979).
- [12] G. Parisi, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1946 (1983).
- [13] M. Mézard, G. Parisi, N. Sourlas, G. Toulouse, and M. Virasoro, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1156 (1984).
- [14] D. Bitko, T. F. Rosenbaum, and G. Aeppli, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 940 (1996).
- [15] A. Messiah, *Quantum Mechanics, Volume II*, Wiley, New York, 1976.
- [16] E. Farhi et al., *Science* **292**, 472 (2001).

- [17] J. G. Andrew M. Childs, Edward Farhi and S. Gutmann, *Quantum Information and Computation* **2**, 181 (2002).
- [18] T. Kadowaki and H. Nishimori, *Phys. Rev. E* **58**, 5355 (1998).
- [19] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [20] G. E. Santoro and E. Tosatti, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **39**, R393 (2006).
- [21] S. Boixo et al., *Nature Physics* **10**, 218 (2014).
- [22] V. Bapst and G. Semerjian, *Journal of Physics: Conference Series* **473**, 012011 (2013).
- [23] R. J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics*, Courier Dover Publications, 2007.
- [24] J. Cardy, *Scaling and renormalization in statistical physics*, volume 5, Cambridge University Press, 1996.
- [25] S. Sachdev, *Quantum phase transitions*, Wiley Online Library, 2007.
- [26] R. P. Feynman, *Reviews of Modern Physics* **20**, 367 (1948).
- [27] T. W. Kibble, *Journal of Physics A: Mathematical and General* **9**, 1387 (1976).
- [28] W. H. Zurek, *Physics Reports* **276**, 177 (1996).
- [29] J. Dziarmaga, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 245701 (2005).
- [30] W. H. Zurek, U. Dorner, and P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 105701 (2005).
- [31] H. F. Trotter, *Proc. Am. Math. Soc.* **10**, 545 (1959).
- [32] M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **56**, 1454 (1976).
- [33] T. F. Rønnow et al., *Science* **345**, 420 (2014).
- [34] R. H. Swendsen and J.-S. Wang, *Physical review letters* **58**, 86 (1987).

- [35] H. Rieger and N. Kawashima, *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems* **9**, 233 (1999).
- [36] Spin glass server, <http://www.informatik.uni-koeln.de/spinglass>.
- [37] M. P. Nightingale and H. W. J. Blöte, *Phys. Rev. B* **62**, 1089 (2000).
- [38] W. Klein, T. Ray, and P. Tamayo, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 163 (1989).
- [39] C. F. Baillie and P. D. Coddington, *Phys. Rev. B* **43**, 10617 (1991).
- [40] P. D. Coddington and C. F. Baillie, *Physical review letters* **68**, 962 (1992).
- [41] Z. B. Li, L. Schülke, and B. Zheng, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3396 (1995).
- [42] J. Du, B. Zheng, and J.-S. Wang, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2006**, P05004 (2006).
- [43] C.-W. Liu, A. Polkovnikov, and A. W. Sandvik, arXiv preprint 1409.7192 (2014).

