量子連想記憶 – 準安定状態と観測 –

ISM Research Memo. No.623

伊庭幸人 (統計数理研究所)

Yukito Iba *

Abstract— A quantum associative memory is introduced for the study of metastability in quantum spin systems. In our model each pattern is stored with a different quantization axis and quantum fluctuation is generated by the interference among the patterns. Numerical experiments with small systems are performed and the dependence of the representation of eigenstates (wave functions) on the quantization axis is studied. Construction of a wave packet from the eigenstates is also discussed.

Keywords— Quantum Spin, Associative Memory

1 背景

量子系における準安定状態とはどういうものだろうか? それは情報処理においてどういう意味をもっているだろうか? 温度 0 の量子系では熱ゆらぎの代わりに量子ゆらぎによって、準安定状態の間のトンネリングが起こる。この過程は時間的な振動や位相の干渉を伴って起こるので、古典的なマルコフ過程と質的に違う点があると予想されるが、実際にどういう違いがあるのかはすぐにはわからない。

振動や位相の干渉以外に量子系と確率的な古典系を区別する特徴は、量子系ではユニタリ変換によっていろいろな基底に移れて、各基底に対応する観測[1]が考えられることである。したがって、準安定状態の概念も観測と関連づけて考えなくてはならないだろう。ある観測を行なって波束を収縮させたのち、しばらく時間がたってから同じ種類の観測を行なったとき、最初の観測で見い出した状態 (あるいは、その状態の周辺) に高い確率で系が存在する場合に、“系が準安定状態にトラップされている” ということにする。すると、準安定状態が存在するかどうかは観測の仕方によることになる。たとえば、粒子が実空間で複数のポテンシャルの谷間のどれかにトラップされるような古典系に対応する量子系を考える。準安定状態を上のように定義した場合、座標を観測すれば準安定状態の存在が認められるが、運動量を観測しても準安定状態は見えないだろう。一般に、ある基底で自然に表現できる状態が他の基底では込み入った記述しかできないということが重要である。

* 統計数理研究所, 〒 106 港区 南麻布 4-6-7 The Institute of Statistical Mathematics, 4-6-7 Minami Azabu, Tokyo 106, Japan. E-mail: iba@ism.ac.jp TEL: 03-5421-8759 FAX: 03-3446-1695 WWW: http://www.ism.ac.jp/~iba/)

[1] 以下ではある基底で、特定の軸に対する射影になっているような観測を考える。

2 本論文の目的と内容

量子スピングラス、あるいは、連想記憶の量子系版のようなシステムは量子系の準安定状態について議論する際の材料として興味深い。さきの説明では実空間表示と運動量表示のあいだの変換を問題にしたが、量子スピン系でこれに相当するものは、いわゆる量子化軸の変換になる。

本稿の目的は、議論の材料として興味深い量子スピン系の例を提出することである。具体的には、モデルを構成してその基本的性質を論じ、小さい系 (スピン数 8 個) に関する基礎的な数値実験の結果を報告する。

量子系における準安定状態をどう理解するかという問いに答えるには、ダイナミクスに関する数値実験が重要であると思われるが、この予稿の段階ではまだそれはなされていない。また、以下で考えるシステムは連想記憶の一種であるから、システムの工学的な現実性はともかくとして、通常の連想記憶と比較してどの程度の容量があるかというのも自然な疑問であるが、これをきちんと調べるのも将来の課題である。これらの問題について進展があれば、会議での口頭発表で触れることとしたい。

3 モデル

準安定状態を複数もつようなスピン系として、人為的にパターンを埋め込んだもの、古典系の連想記憶モデルに対応するものを考える。以下では埋め込むパターンのうち α 番目のものを ξ^α と書く (各成分 ξ_i^α は ± 1 の値を取るとする)。スピンの大きさは $1/2$ とする。$\boldsymbol{\sigma}^x, \boldsymbol{\sigma}^y, \boldsymbol{\sigma}^z$ はパウリのスピン行列 (2 行 2 列) である。

“横磁場イジング・完全結合” 型の量子連想記憶

$$-H = \sum_{i>j} J_{ij} \boldsymbol{\sigma}_i^z \boldsymbol{\sigma}_j^z + \widetilde{h} \sum_i \boldsymbol{\sigma}_i^x \tag{1}$$

$$J_{ij} = \sum_\alpha \xi_i^\alpha \xi_j^\alpha \tag{2}$$

についてはすでにいくつか研究がある (Nonomura and Nishimori (1995), Steffan and Kuhn (1994))。ここでは、われわれの目的のひとつが量子化軸の変換の効果を調べることにあることを考慮して、また、何か興味ある性質がみつかることを期待して、少し違ったモデルを考えることにする。

以下で考えるモデルでは、パターン $\{\xi^\alpha\}$ の埋め込み方は通常の Hebb 型 (Hopfield 型) であるが、モデル (1) と

異なって、違うパターンは違う量子化軸で記憶されている。量子性はそのことから生じる。横磁場項は含まれていない。ハミルトニアン H を式で書くと次のようになる。

$$-H = \sum_{\alpha} \sum_{i>j} \xi_i^{\alpha} \xi_j^{\alpha} \boldsymbol{\sigma}_i^{\alpha} \boldsymbol{\sigma}_j^{\alpha} \tag{3}$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{\alpha} = \boldsymbol{\sigma}_z \cos\theta_{\alpha} - \boldsymbol{\sigma}_x \sin\theta_{\alpha} \tag{4}$$

$$\theta_{\alpha} = \frac{\pi\alpha}{N}, \qquad (\alpha = 0..N-1) \tag{5}$$

ここでパターンの数を N とした。

これは、次のように書き直すことができる。

$$-H = \sum_{i>j} J_{ij} \boldsymbol{\sigma}_i^z \boldsymbol{\sigma}_j^z + \sum_{i>j} R_{ij} (\boldsymbol{\sigma}_i^z \boldsymbol{\sigma}_j^x + \boldsymbol{\sigma}_i^x \boldsymbol{\sigma}_j^z) + \sum_{i>j} K_{ij} \boldsymbol{\sigma}_i^x \boldsymbol{\sigma}_j^x \tag{6}$$

$$J_{ij} = \sum_{\alpha} \xi_i^{\alpha} \xi_j^{\alpha} \cos^2\alpha \tag{7}$$

$$R_{ij} = -\sum_{\alpha} \xi_i^{\alpha} \xi_j^{\alpha} \cos\alpha \sin\alpha \tag{8}$$

$$K_{ij} = \sum_{\alpha} \xi_i^{\alpha} \xi_j^{\alpha} \sin^2\alpha \tag{9}$$

$\boldsymbol{\sigma}_i^z \boldsymbol{\sigma}_j^x$ のような項が含まれるのが特徴である。

4 モデルの対称性と縮退

このモデルには $\boldsymbol{\sigma}_i^z \boldsymbol{\sigma}_j^x$ のような項が含まれているため、$\boldsymbol{\sigma}^z = -\boldsymbol{\sigma}^z$, $\boldsymbol{\sigma}^x = -\boldsymbol{\sigma}^x$ ではモデルが不変なのに、パターンの反転に対応する $\boldsymbol{\sigma}^z = -\boldsymbol{\sigma}^z$, $\boldsymbol{\sigma}^x = +\boldsymbol{\sigma}^x$ に対しては不変ではない。しかし、全く対称性がないわけではなく、次のような変換 Q に対してモデルは不変である。以下では、 $\boldsymbol{\sigma}^z$ を対角化する表示を用い、基底を構成するベクトルを $|x_1, x_2, .., x_n>$ $(x_i = \pm 1)$ のように記述する。

$$|x_1, x_2, .., x_n> = \begin{cases} +|-x_1, -x_2, .., -x_n> & : \{x_i\} \text{のうち偶数個が値} +1 \text{をとる場合} \\ -|-x_1, -x_2, .., -x_n> & : \{x_i\} \text{のうち奇数個が値} +1 \text{をとる場合} \end{cases}$$

この変換 Q の性質はスピンの総数 n によってことなる。すなわち、

$$Q^2 = +1 \quad : \text{スピンの総数}n\text{が偶数} \tag{10}$$

$$Q^2 = -1 \quad : \text{スピンの総数}n\text{が奇数} \tag{11}$$

となる。このことと、ハミルトニアンが実対称行列であることから、次のことがわかる。

- スピンの総数 n が偶数のとき、ハミルトニアンの固有状態は変換 Q に対して不変か、符号を変えるかである (ようにとれる)。
- スピンの総数 n が奇数のとき、ハミルトニアンの各固有状態は (少なくとも)2 重に縮退している。

5 量子化軸を変えての観測

いろいろな量子化軸での記憶の “読みだし” について考える。 “読みだし” は本来は動的な過程であるが、ここでは H の固有状態 (基底状態および基底状態に近い状態) を求め、それを特定の量子化軸で定まる基底で観測することで、 “読む” ことにした。ここで、観測によって波束が収縮する基底ベクトルの “名前” $|x_1, x_2, .., x_n> (x_i = \pm 1)$ をその観測で読みだされたパターンと定義する。この読みだし方はあまり物理的でないが、ダイナミクスを直接に計算せずにどれだけの理解が得られるかをまず知りたいと考えた[2]。

実際の計算では、量子化軸を θ だけ回転させる代わりに、スピン系の方を $-\theta$ だけ回転して、 z 軸方向に対角化をすることにした。すなわち、

$$\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^z = \boldsymbol{\sigma}_z \cos\theta + \boldsymbol{\sigma}_x \sin\theta \tag{12}$$

$$\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^x = -\boldsymbol{\sigma}_z \sin\theta + \boldsymbol{\sigma}_x \cos\theta \tag{13}$$

のようにユニタリ変換することにより、ハミルトニアン (3) は

$$-\widetilde{H} = \sum_{i>j} \widetilde{J}_{ij} \widetilde{\boldsymbol{\sigma}}_i^z \widetilde{\boldsymbol{\sigma}}_j^z + \sum_{i>j} \widetilde{R}_{ij} (\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}_i^z \widetilde{\boldsymbol{\sigma}}_j^x + \widetilde{\boldsymbol{\sigma}}_i^x \widetilde{\boldsymbol{\sigma}}_j^z) + \sum_{i>j} \widetilde{K}_{ij} \widetilde{\boldsymbol{\sigma}}_i^x \widetilde{\boldsymbol{\sigma}}_j^x \tag{14}$$

$$\begin{pmatrix} \widetilde{J}_{ij} \\ \widetilde{R}_{ij} \\ \widetilde{K}_{ij} \end{pmatrix} = U(\theta) \cdot \begin{pmatrix} J_{ij} \\ R_{ij} \\ K_{ij} \end{pmatrix} \tag{15}$$

$$U(\theta) = \begin{pmatrix} \cos^2\theta & -2\cos\theta\sin\theta & \sin^2\theta \\ \cos\theta\sin\theta & \cos^2\theta - \sin^2\theta & -\cos\theta\sin\theta \\ \sin^2\theta & 2\cos\theta\sin\theta & \cos^2\theta \end{pmatrix} \tag{16}$$

という形になるが、これを

$$\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad \widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{17}$$

となるような座標系で対角化して、傾き θ の量子化軸での “読みだし” を行なうわけである。

6 固有状態

以下では小さい系 (スピン数 n =8、状態数 $2^n = 256$) をハウスホルダー法で数値的に対角化して得られた結果を論じる。記憶させるパターン $\{\xi_i^{\alpha}\}$ は $\xi_i^{\alpha} = \pm 1$ が等確

[2] ここで注意しなくてはならないのは、通常、古典系での対応する数値計算はマルコフ過程の遷移行列 (あるいは Fokker-Plank 方程式) の固有値問題を解く形でなく、動的な過程を想定して行なわれるため、これからの議論で、 “量子系と古典系の違い” の部分と “固有値問題による扱いと動的な扱いの違い” の部分が混同されやすいことである。これは今後研究を進めていく過程で整理しないといけないと思う。但し、 “固有値問題による扱いと動的な扱いの違い” の部分が必ずしも無意味なわけではない。固有状態が与えられたとき、最良の準安定状態の組を構成するというのは、量子系でも古典系でも興味深い問題である。

率になるようにランダムに生成した (便宜上、 $\xi_i^1 = 1, \forall i$ と置いた場合もある)。

まず、パターンの数を 3 個として、それらを $\theta_1 = 0$, $\theta_2 = \pi/3$, $\theta_3 = 2\pi/3$ の位置で記憶させた場合を考える。図 1 は $\theta = 0$ を量子化軸とした基底で表示した基底状態、第 1 励起状態、第 2 励起状態である。この結果はある 1 個のサンプルについてのものである[3]。

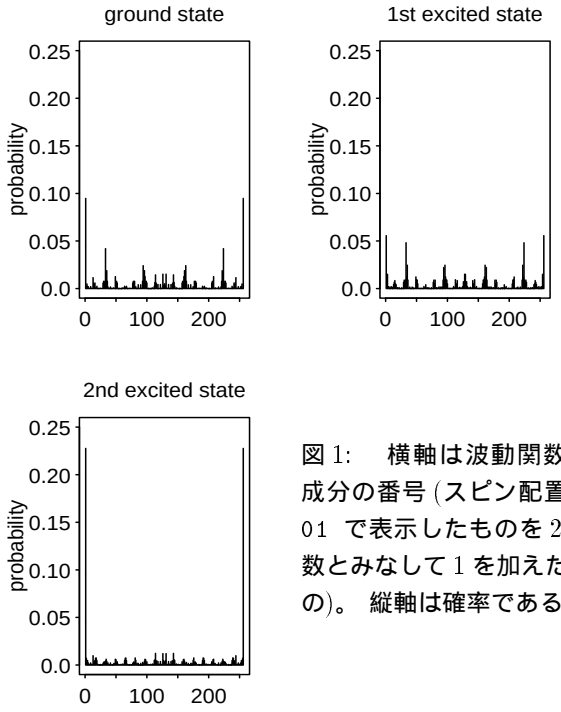

図 1: 横軸は波動関数の成分の番号 (スピン配置を 01 で表示したものを 2 進数とみなして 1 を加えたもの)。 縦軸は確率である。

この例では $\theta_1 = 0$ で記憶させたパターンは 11111111 ($\forall i$,ξ_i=1)、 図でいえば右端に相当するものであるが、その場所及び 00000000 ($\forall i$,ξ_i=−1) に対応する位置 (左端) にはっきりしたピークが見られる。このピークは基底状態だけでなく、第 1 励起状態、第 2 励起状態にも見られることに注意されたい。 224 番と 33 番にあるピークは、1 文字違いの 11111011 と 00000100 にそれぞれ対応するものである。これに対して、 163,161 番 (94,96 番) などにあるピークは角度 $\theta_2 = \pi/3$ で記憶させたパターンと関係している。

7 量子化軸依存性

次に観測する量子化軸の影響を見てみよう。図 2 では、系が基底状態にあるとして、記憶させたパターンが観測される確率を観測する軸の角度に対してプロットしてある。期待される通り、記憶させたときの軸のあたりで、それぞれが最大値を取っている。最大値は 25%-10% 程度であまり大きくないが、これは重なりの期待値ではなく、完全に一致する確率であることに注意されたい。

[3] あと (図 5) の結果からわかるように、実はサンプルによるばらつきは非常に大きい。もっとも、これだけ系が小さく、記憶させるパターンも少ないと、一見違うサンプルが対称性から等価になってしまうことも多い。

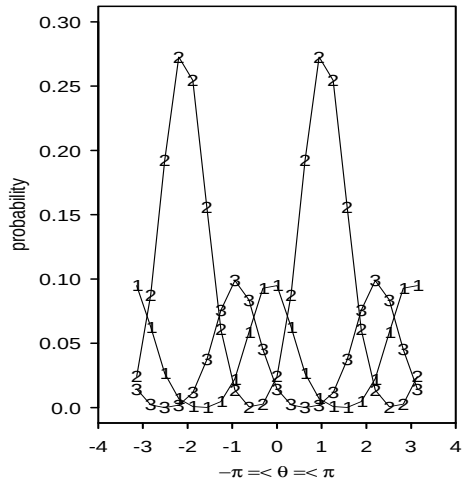

図 2: 縦軸は基底状態において記憶させたパターンが観測される確率。横軸は観測する角度。番号はパターンの番号。

8 波束を作る

さきに見たように、記憶させたパターンは基底状態のみに含まれるわけではなく、低い励起状態全体にわたって記憶されていると考えられる。そこで、低いエネルギーの状態を重ね合わせて、記憶させたパターンの寄与が大きい状態を作ることを考えてみたい。

いま、 i 番目の固有ベクトルを $\boldsymbol{e}_i$、観測に用いる基底で表現した場合の $\boldsymbol{e}_i$ の j 成分を $\boldsymbol{e}_i^j$ とする。エネルギーの低い方から I 個の固有ベクトルの線形結合 $\Psi = \sum_i w_i \boldsymbol{e}_i$ が $\sum_{i=1}^I |w_i|^2 = 1$ のもとで、軸 k の方向の単位ベクトルを最も良く近似する、すなわち、 $\sum_j |\delta_k^j - \sum_{i=1}^I w_i \boldsymbol{e}_i^j|^2$ を最小にするのは、

$$w_i = \frac{\boldsymbol{e}_i^{k\,*}}{\sqrt{\sum_{i=1}^I |\boldsymbol{e}_i^k|^2}} \tag{18}$$

となるときで、そのとき、 Ψ の k 成分の絶対値の 2 乗は、

$$P_k^{max} = \sum_{i=1}^{I} |\boldsymbol{e}_i^k|^2 \tag{19}$$

である。

成分 k として 11111111 を取った場合と k を記憶させたパターンに関係なく任意に選んだ場合について、 P_k^{max} の値を I についてプロットしたのが図 3 である。観測する量子化軸はパターン 11111111 を記憶させた時と同じものをとっている。

$I = 2^8$ では、すべての固有ベクトルを使うことができるので、どのパターン (どの k) についても $P_k^{max} = 1$ となる。しかし、 I が小さいときの振舞いはまったく違っている。11111111 については I が 7 くらいですでに 80% くらいの値が得られているのに対し、任意に選んだパ

ターンについてはだらだらと上がっていく曲線が得られる。

図 3 は状態 11111111 については低いエネルギーの固有状態を用いるのみで良く局在した波束が得られることを表している。不確定原理 $\triangle E \cdot \triangle t \sim const.$ を用いると、これを準安定状態の概念と結び付けることができる。すなわち、エネルギー E の範囲が、$E_0 \leq E \leq E_0 + \triangle E$ (E_0 は基底状態エネルギー) にある固有状態のみを使って作った波束の寿命は $\triangle t \sim 1/\triangle E$ の程度であると考えるわけである。この考えにしたがって、図 3 の横軸を I の代わりに I 番目のエネルギー固有値と基底状態エネルギーの差 ($\triangle E$) の逆数に変えて、プロットしなおしたものが図 4 である。

図 4 のようなプロットは、単なる目安であって、系のミクロカノニカルなダイナミクスと直接対応するわけではない。実際のミクロカノニカルなダイナミクスはもっと振動的なものではないかと思われる。

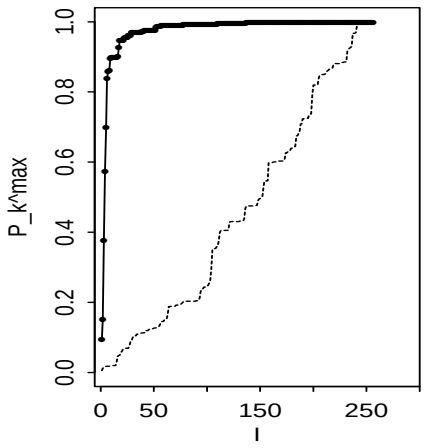

図 3: 縦軸は指定した状態の重み。横軸は利用した固有状態の番号の上限。実線はパターン 11111111 に、破線は任意に選んだパターンに対応。

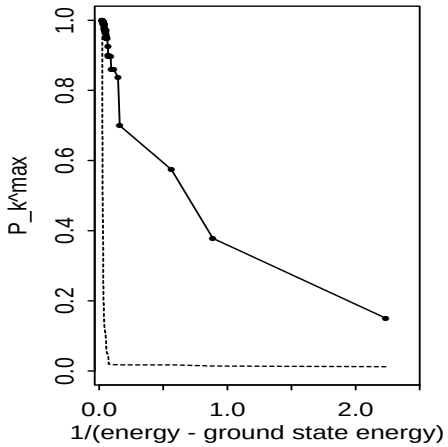

図 4: 縦軸は指定した状態の重み。横軸の意味は本文参照。実線はパターン 11111111 に、破線は任意に選んだパターンに対応。

9 パターンの数・サンプル数を増やす

いままではパターン 3 つ・サンプル 1 つの世界でいろいろ観察してきたが、もちろん、もっと多くの記憶パターンを持つ場合について、もっと多くのサンプルを調べるべきである。図 5 では記憶させるパターン数がそれぞれ N=3,5,8,20 の場合について、それぞれ 20 個のサンプルを調べて、$\theta = 0$ で記憶させたパターンが基底状態において観測される確率をプロットした。スピン数は前と同じく $n = 8$ である。

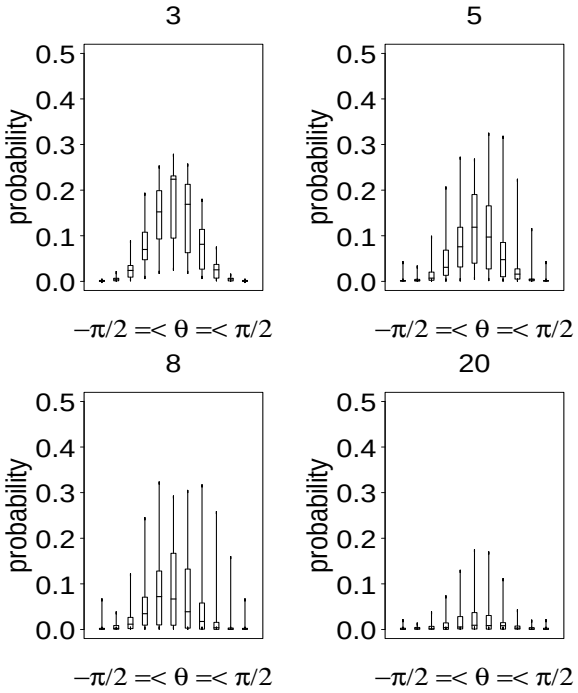

図 5: 横軸は観測する角度、縦軸は基底状態において各パターンを見い出す確率。“箱” の中央の線はメジアン、箱の上下端は第 2 及び第 3 四分位値、線の上下端は最大・最小値をあらわす。図の上の数字は記憶させたパターンの個数。

10 問題点

今後の方向については、すでに触れたので繰り返さないが、それ以外に、縮退や保存量の扱いをどうするかをもう少し考えなければならないだろう。本稿の範囲でもいくつかの解析 (たとえば図 2, 図 5) は同じことをスピン数 9 の系でやろうとすると縮退のために問題を生じる[4]。

文献

Nonomura,Y. and Nishimori,H. (1995)
Quantum Hopfield Model, preprint.
Steffan,H. and Kuhn,R. (1994)
Z. Phys. B 95, 249.

[4] 実はパターン数 $N = 4$ の場合は偶然の縮退が多いため、スピン数が 8 でも、すでに問題がある。