

MEIRT インターンシップ（国内）報告書

工学系研究科物理工学専攻

沙川研究室博士2年

MERIT 8期生

馬場翔太郎

1 インターンシップ概要

- 受入先: 京セラ株式会社先進マテリアルデバイス研究所基盤技術研究部電磁場技術課
- 期間: 2021年11月1日 - 2021年11月30日
- テーマ: 量子相転移を経由する量子エンジンの駆動速度と効率のトレードオフ

2 実習概要

計3回の出社とリモートによって実習を行った。出社日には京セラみなとみらいリサーチセンターの施設の見学をさせて頂いた。実習の主な内容は、D-Wave社の量子アニーリングマシンを利用した大きなサイズの量子多体系の実験的な研究である。具体的には、量子多体系上の熱機関からの仕事取り出しの効率と駆動速度のトレードオフについて研究を行った。

3 研究内容

量子多体系は系のサイズに対して、数値計算のコストが指数的に増加するため、大きな系のサイズや高次元系における解析には実験的な検証が重要である。そこで本研究では、数百から数千のキュービットが利用できる量子アニーリングマシンを、数値的な解析が困難な大きなサイズの量子多体系の研究に利用した。

D-Wave社の量子アニーリングマシンは、最適化問題のために開発された超伝導量子キュービット系であり、クラウドサービスとして利用可能である。最新の装置

は約 15.4mK で動作する 5000 キュービット以上から構成され、キュービット間の結合の仕方をデザイン可能となっている。そのため、大きなサイズの量子多体系における、低温下の様々な物理実験を行うことが可能である。この量子アニーリングマシンを利用した物理実験の先行研究としては、3次元イジング模型の相転移 [1]、2次元横磁場イジング模型での KT 転移 [2]、熱ゆらぎと量子ゆらぎの競合（スピニアイス） [3]、多体局在 [4]、トポロジカル欠陥 [5]、外部からの仕事で高温熱浴から低音熱浴への熱の移動を加速する熱機関の観察 [6] 等がある。

本研究では、熱力学的なサイクルから仕事を取り出す量子熱機関を量子アニーリングマシン上で実現し、量子相転移を経由する駆動速度と効率のトレードオフを観察した。量子相転移を含む熱機関の理論的研究として例えば、有限パワーによるカルノー効率を達成する例の提案 [7,8] や駆動速度と仕事のための臨界指数によって記述されるスケーリングの研究 [9,10] がある。また実験的に超伝導量子キュービット系で実験した例としては IBM Q 上の小さな系で熱機関の実装とゆらぎの定理の検証を行った研究 [11] がある。

量子相転移点付近では基底状態と第一励起状態のエネルギー差が1次元相転移の場合はシステムサイズに対して指数的に小さくなる。従って断熱量子計算などで量子状態を基底状態のまま磁場等を変化させたい場合、励起させないためにはエネルギー差が小さくなるほどゆっくりと変化させる必要がある（エネルギー差 Δ に対して時間 $T \sim \Delta^{-2}$ ）。また等温過程で取り出される仕事は自由エネルギー F の差である。従って遷移先で励起が起こってしまった場合、遷移先の自由エネルギーは大きくなり取り出される仕事は小さくなってしまふ。従って等温過程で大きな仕事を取り出すためには励起するエネルギーを小さくする必要があり、そのためにはゆっくり動かす必要がある。これが本研究で注目する、量子相転移を経由する駆動速度と効率のトレードオフの原因である。基底状態からの励起による欠陥（キンク）の密度 ρ_{kink} と駆動時間 t_a の間のスケーリングについてはすでにアニーリングマシンにおける観察結果があり [5]、以下のような関係がある。

$$\rho_{\text{kink}} \propto t_a^{-\frac{d\nu}{1+z\nu}} \quad (1)$$

ここで、 ν は相関長の臨界指数、 d は次元、 z は動的臨界指数である。1次元量子横磁場イジング模型は $\nu = z = d = 1$ なので指数は $d\nu/(1+z\nu) = 1/2$ である。

本研究における具体的なセットアップについて説明する。使用した模型は量子横磁

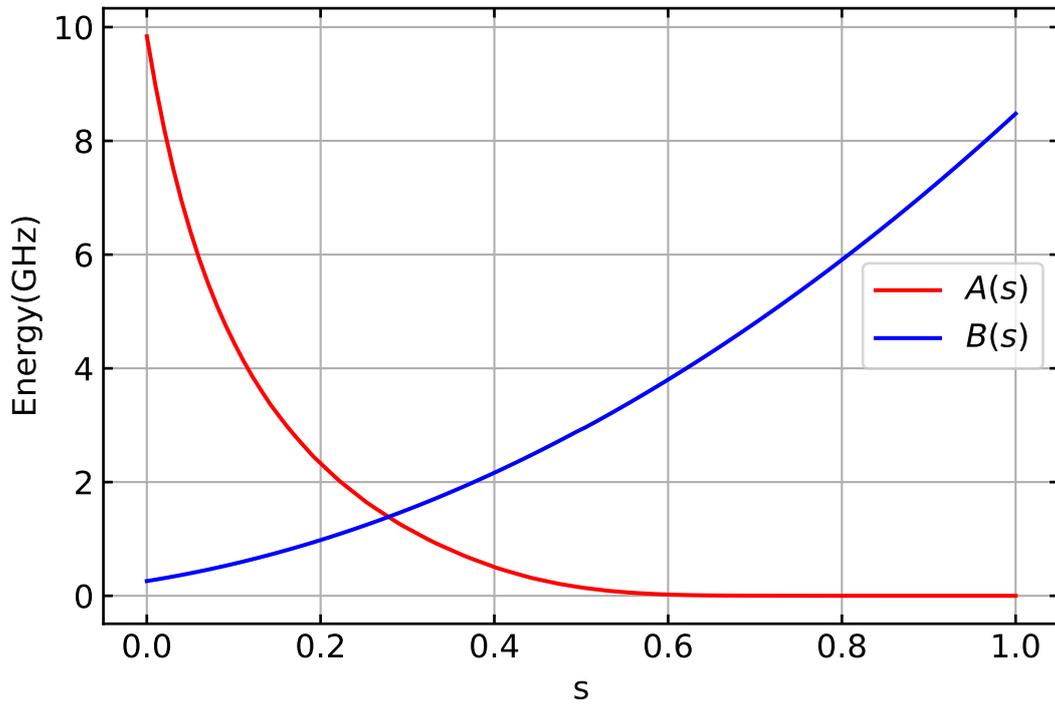


図1 縦軸 $A(s)$, $B(s)$, 横軸はハミルトニアンを制御するパラメータ s .

場イジング模型である.

$$H = -\frac{A(s)}{2} \sum_{i=1}^L \sigma_i^x - \frac{B(s)}{2} \sum_{i=1}^L \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z.$$

ここでキュービットの数 $L = 2000$, s は第1項の横磁場と第2項の相互作用の大きさを決める関数 $A(s)$, $B(s)$ を制御するパラメータで図1に関数を示した. この関数形は, D-Wave 社によって決められており利用者は変更不可能である. 相転移点は $s \sim 0.28$ であり, それより小さい時基底状態は非秩序相, 大きいときは強磁性相となる. 構成したサイクルを図2に図示した. これはスターリングサイクルのアナロジーと考えることができる (ただし, 本来のスターリングエンジンはストローク A が高温熱浴に接した等温操作である.). 具体的なサイクルの行程は, まず制御パラメータ s を 1 に設定して, 初期状態 (I) をランダムに準備する. これは無限温度の熱平衡状態に対応する. 次に (A) 制御パラメータ s を 1 からある値 \bar{s} にクエンチさせ

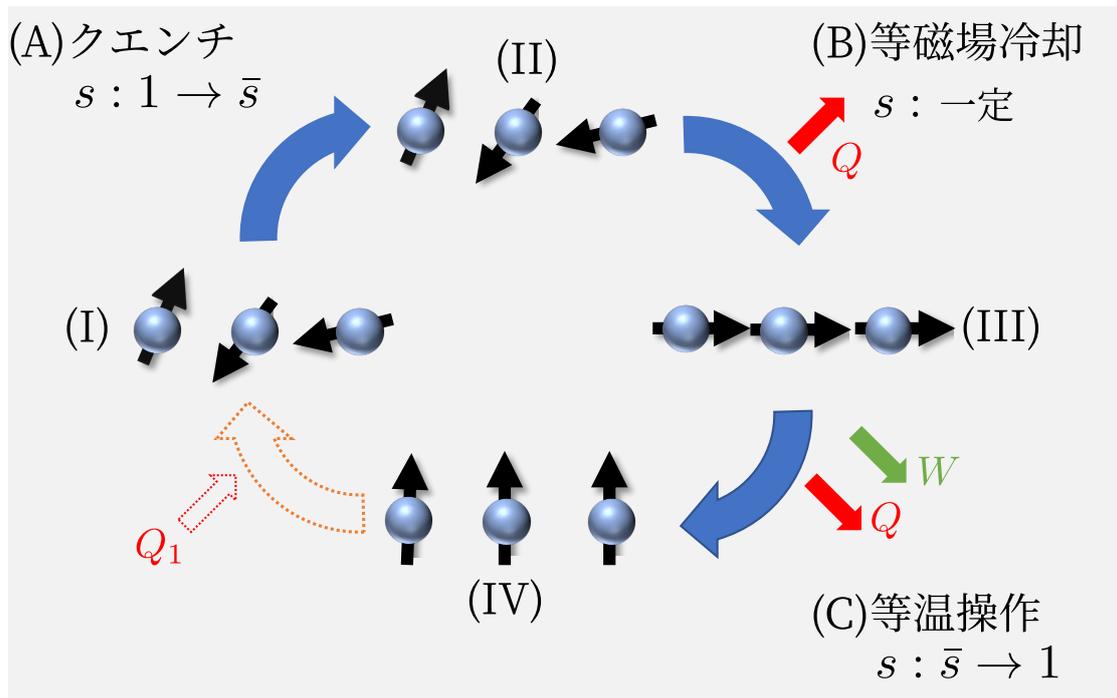


図2 本研究で構成したサイクル. 系は常に低温熱浴 ($T = T_C$) に接しているとする.

る. ここで行われる仕事は0となることが解析的に示される (遷移前後のハミルトニアントレースは0であり, ランダムな状態のエネルギーは0となるため, クエンチによってランダムな状態のままであると仮定したとき前後のエネルギー差は0). 実際は制御パラメータの変更は有限速度 $v = 2\mu\text{s}^{-1}$ に制限されるため, 実際の時間は0ではなく $(1 - \bar{s})/2\mu\text{s}$ である. 次に (B) $s = \bar{s}$ のまま定磁場冷却を行う. すなわちある低温熱浴 (アニーリングマシンの低温環境) に接触させたまま熱平衡化させる. 本実験では $350\mu\text{s}$ の間, 定磁場冷却を行った. 最後に (C) 制御パラメータ s を \bar{s} から 1 に一定速度で駆動する. ここで最終状態のエネルギー E_{IV} を測定する. ここから仮想的に無限温度での熱平衡化を行うことでサイクルが完結する. 初期状態としてランダムな状態をサンプルしながら何度もこのサイクルを行うことで, 最終状態のエネルギー E_{IV} の分布 $P(E_{IV})$ が得られる. 制御パラメータの時間依存性の例のグラフは図3である. このサイクルで仕事の収支が存在するのはストローク C のみである. このストローク C の等温操作の速度を変化させて, 最終状態のエネルギー E_{IV}

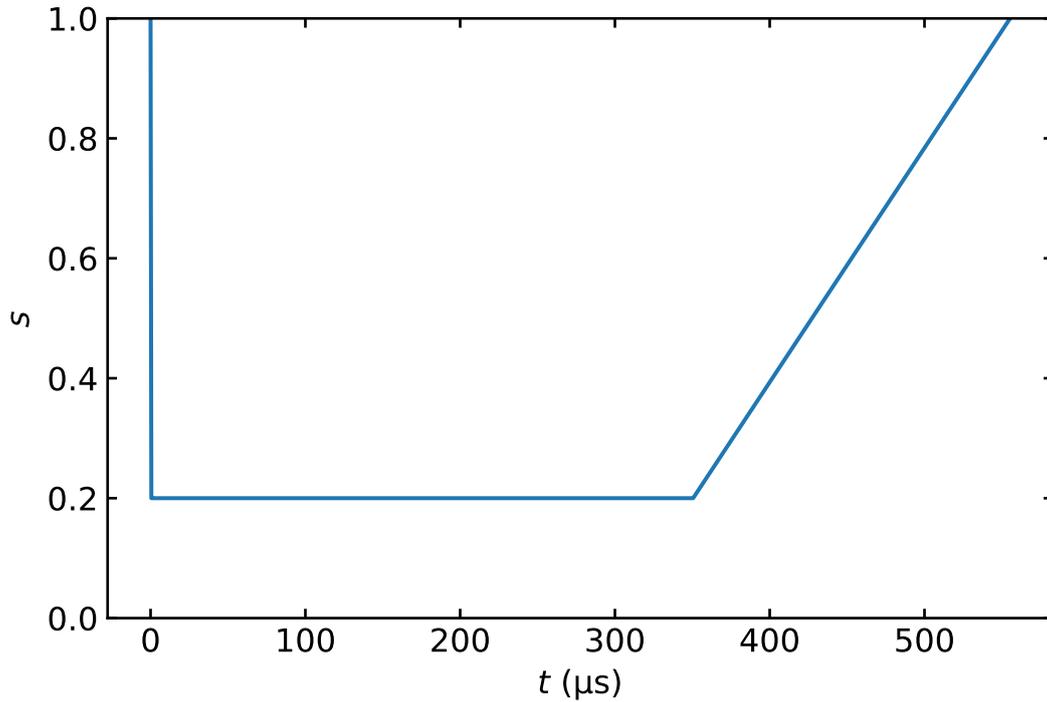


図3 制御パラメータの時間依存性の例. 図は $\bar{s} = 0.2$, ストローク C の駆動速度を $v = 2^{-8} \mu\text{s}^{-1}$ とした時である.

を測定する. 理想的な最大仕事は (III) と (IV) の間の自由エネルギーの差

$$W_{\max} = F(T_C, \bar{s}) - F(T_C, 1) \quad (2)$$

であり, 最大効率

$$\eta_{\max} = W_{\max}/Q_1 \quad (3)$$

である. ここで Q_1 は (III) と (IV) の間の内部エネルギーの差であり, このサイクルで外部から入ってくる熱である. このサイクルで実際に行われた仕事は最大仕事 W_{\max} から励起エネルギー ε_{ex} を引いた量として推定する

$$W = W_{\max} - \varepsilon_{\text{ex}}. \quad (4)$$

効率は

$$\eta = W/Q_1, \quad (5)$$

である．励起エネルギーは温度 T_C における解析的なエネルギー $E(T_C, s = 1)$ と最終状態のエネルギー E_{IV} の差の分布の期待値

$$\varepsilon_{\text{ex}} = \mathbb{E}[P(E_{IV}) - E(T_C, s = 1)] \quad (6)$$

で計算する．ただし期待値は初期状態のサンプルの集合について取る．

実際に仕事の推定を行う準備として，量子アニーリングマシンの有効温度の推定を行う．量子アニーリングマシンは多くのノイズや誤差によって実効的な温度 T_{eff} が、物理的な温度 (15.4mK) と異なることが知られている．そこで解析的な自由エネルギー等の計算に必要な有効温度を推定する．具体的にはストローク C をゆっくり行うことで得られる熱平衡状態である最終状態 (IV) のエネルギー分布 $P(E_{IV})$ を，ある有効温度のボルツマン分布によってよく説明できるような有効温度を最尤推定する [12, 13]．正確には疑似最尤推定と呼ばれる手法で以下の量を最大化する

$$\Gamma(\beta) = -\frac{1}{LD} \sum_{d=1}^D \sum_{l=1}^L \ln \left[1 + \exp \left(-2\beta \sigma_l^d \sum_{m \in \delta_l} \sigma_m^d \right) \right]. \quad (7)$$

ここで D はサンプルの数， $\sigma_l^d \pm 1$ は d 番目のサンプルにおけるサイト l のスピン (最終状態の $s = 1$ でハミルトニアンは古典イジング模型で，この古典スピン配置は測定可能)， δ_l はサイト l の隣接サイトのインデックス．ここで初期状態は 1000 回ランダムサンプリングを行い，それぞれに対して 10 回試行を行った．従ってサンプルサイズは各制御パラメータ \bar{s} ，駆動速度 v に対してそれぞれ 10000 サンプルである．図 4 にストローク C の等温操作の駆動速度 v を変えながら逆温度 $\beta = 1/k_B T$ を推定した結果を示した．ゆっくり動かすほど， $\beta = 2.5$ に収束していることがわかり，すなわちゆっくり動かした時で得られる熱平衡状態は $\beta = 2.5$ に対応していることがわかる．早く動かした時は励起によりギブス分布では説明できない分布になっており，推定が失敗していると考えられる．この逆温度 $\beta = 2.5$ は 162.734mK に対応しており，先行研究 [13] の推定結果の範囲である．以下の計算では低温熱浴を逆温度 $\beta_C = 2.5$ とする．

次に理想的なサイクルに対する解析的な結果を与える．1次元量子横磁場イジング模型は Jordan-Wigner 変換により可解であり，固有エネルギー，自由エネルギー F ，更にある逆温度 β のギブス分布の内部エネルギーの計算が可能である [14]．これらを用いて，理想的な最大仕事 W_{max} ，最大効率 η_{max} が計算可能である．自由エネル

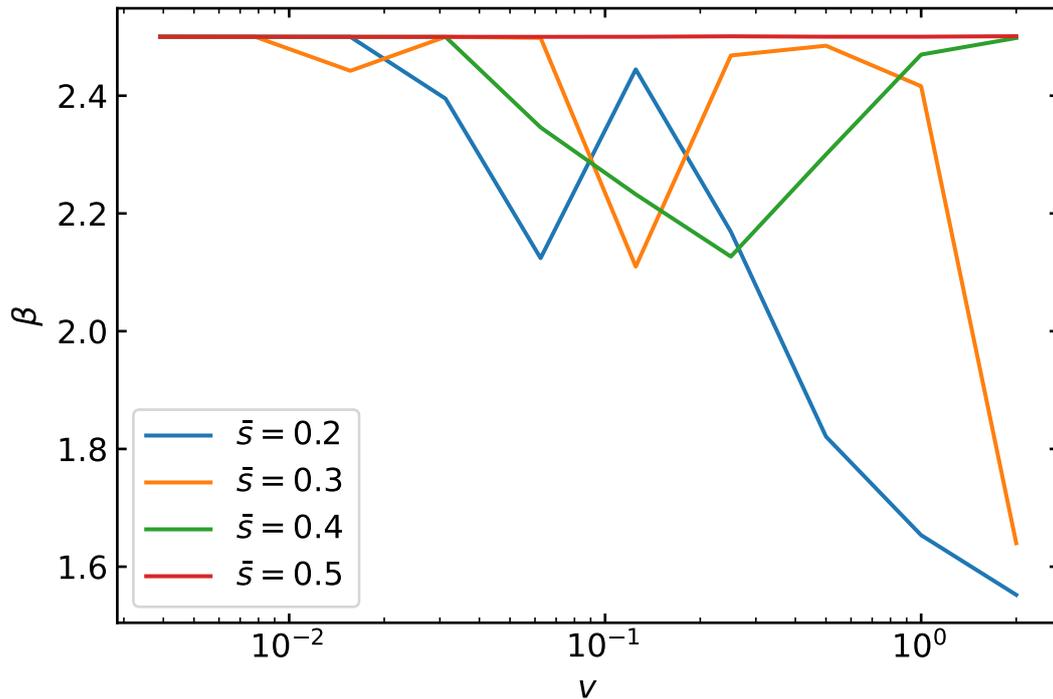


図4 ストローク C の等温操作の駆動速度 v と逆温度 β の最尤推定の結果. ゆっくり動かすほど, $\beta = 2.5$ に収束していることがわかる. エネルギーは $s = 1$ のときのハミルトニアン基底エネルギーが -1 になるように無次元化しており, 逆温度も無次元量となっている.

ギー密度を図 5, 理想的な最大仕事を図 6, 最大効率を図 7 に示した. これらの結果は, 理想的な最大仕事の場合は相転移点 $s \sim 0.28$ 付近で仕事及び効率が最大になることがわかる.

次にアニーリングマシンにおける実験結果を説明する. まずサイクル C における等温過程で制御パラメータの駆動速度と励起エネルギーのスケーリングを観察する. Kibble-Zurek 機構 [15] によれば有限速度で転移点を經由する時のキンクまたは欠陥の密度は駆動速度に対して冪的な増加を示す. 従って励起エネルギーについても同様のスケーリングが観察されることが期待される. 上述のサイクルにおいて, 各 \bar{s} に対してストローク C の等温操作の駆動速度 v を変えながら ε_{ex} を測定及び計算した結果を図 8 に示した. 測定データは上述の有効温度の推定と同じものを利用しており,

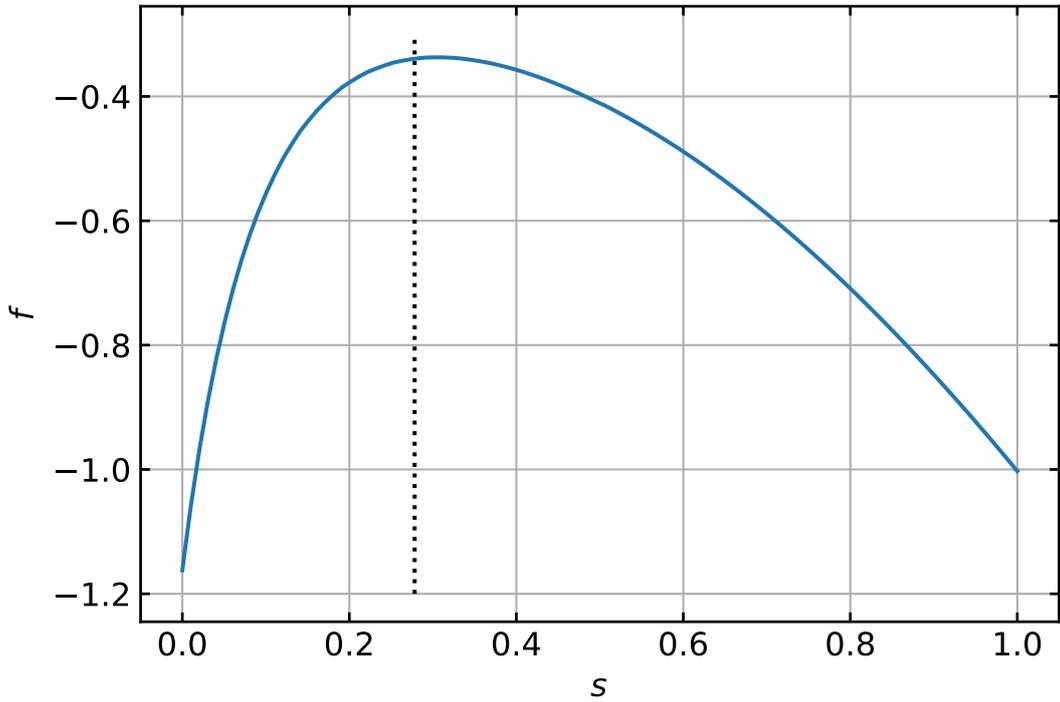


図5 1次元量子横磁場イジング模型の逆温度 $\beta = 2.5$ の時の自由エネルギー密度. $s = 1$ のときのハミルトニアン基底エネルギーが -1 になるように無次元化している. 縦の点線は相転移点 $s \sim 0.28$ を表す.

サンプルサイズは各制御パラメータ \bar{s} , 駆動速度 v に対してそれぞれ 10000 サンプルである. Kibble-Zurek 機構は有限速度で転移点を経由する時のスケーリングを説明し, 実際に図 8 では転移点付近を経由する $\bar{s} = 0.2, 0.3$ のとき冪的なスケーリングが観察されている. この $\bar{s} = 0.2, 0.3$ の結果に対して $\varepsilon_{\text{ex}} = av^b$ という関数形を仮定し最小自乗フィットを行うと, 冪数 $b = 0.41(1)$ という結果が得られた. この最小自乗フィットによって得られたパラメータによる関数 av^b を, 測定結果と合わせてプロットした結果を図 9 に示した. エラーバーは測定結果の標準偏差を表している. 1次元量子横磁場イジング模型に対する孤立系の冪数の Kibble-Zurek 機構による予測は $b = \frac{d\nu}{1+z\nu} = 0.5$ である. 一方でこの冪数は開放系で小さくなる傾向にある [5]. 従って妥当な結果である.

最後に測定及び計算して得られた ε_{ex} から, 転移点を経由する際の駆動速度と仕

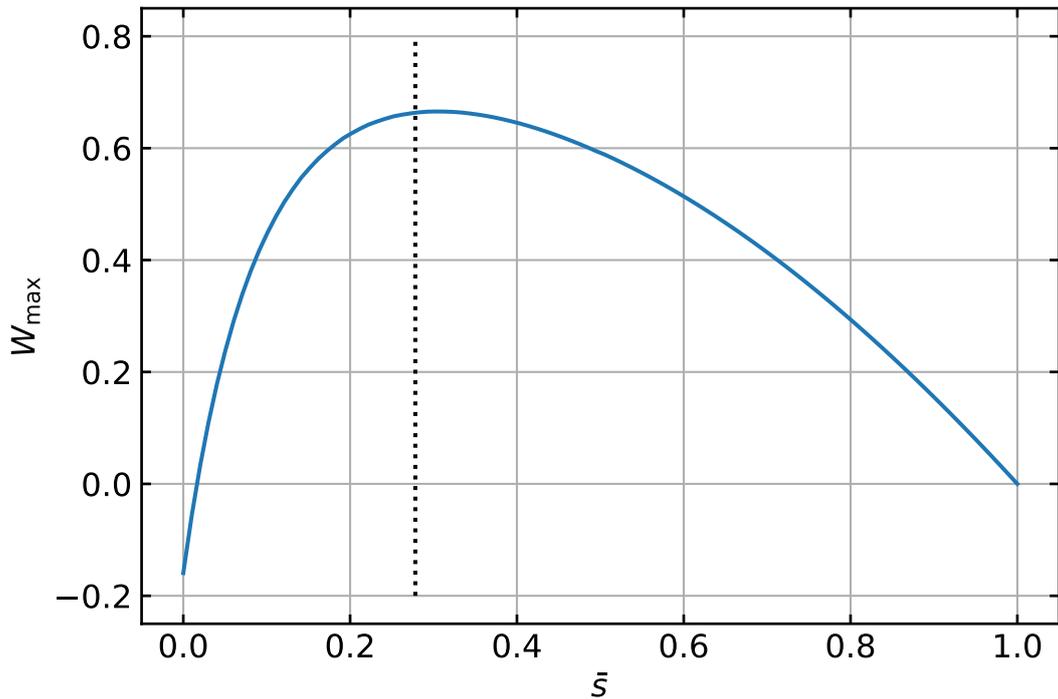


図6 理想的なサイクルに対する最大仕事. 低温熱浴は逆温度 $\beta = 2.5$. $s = 1$ のときのハミルトニアン基底エネルギーが -1 になるように無次元化している. 縦の点線は相転移点 $s \sim 0.28$ を表す.

事 Eq. (4), 効率 Eq. (5) の関係を計算する. 仕事に対する結果を図 10, 効率に対する結果を図 11 に示した. 駆動速度が小さい領域では転移点付近を経由する $\bar{s} = 0.3$ の場合が大きな仕事, 効率を得られることがわかる. これは転移点付近でもっとも低温熱浴の温度に対応するギブス分布の自由エネルギーが大きくなるためである. これはギャップが小さくなる転移点付近で基底エネルギーが大きくなっていることが主な理由である. 一方で転移点付近を経由する $\bar{s} = 0.2, 0.3$ の場合は, 駆動速度が大きくなると転移点付近を経由しない場合と比較して仕事及び効率が大きく下がっている事がわかる. また転移点付近を経由する場合でも, 例えば $\bar{s} = 0.3$ の場合, 効率については仕事より大きな駆動速度まで $\bar{s} = 0.4$ の場合より大きい. これは転移点付近を経由する際の励起エネルギーの分, 次の仮想的なストロークで入力される熱 Q_1 が小さくなっているからである. これらの結果から仕事の大きさ及び効率を高め

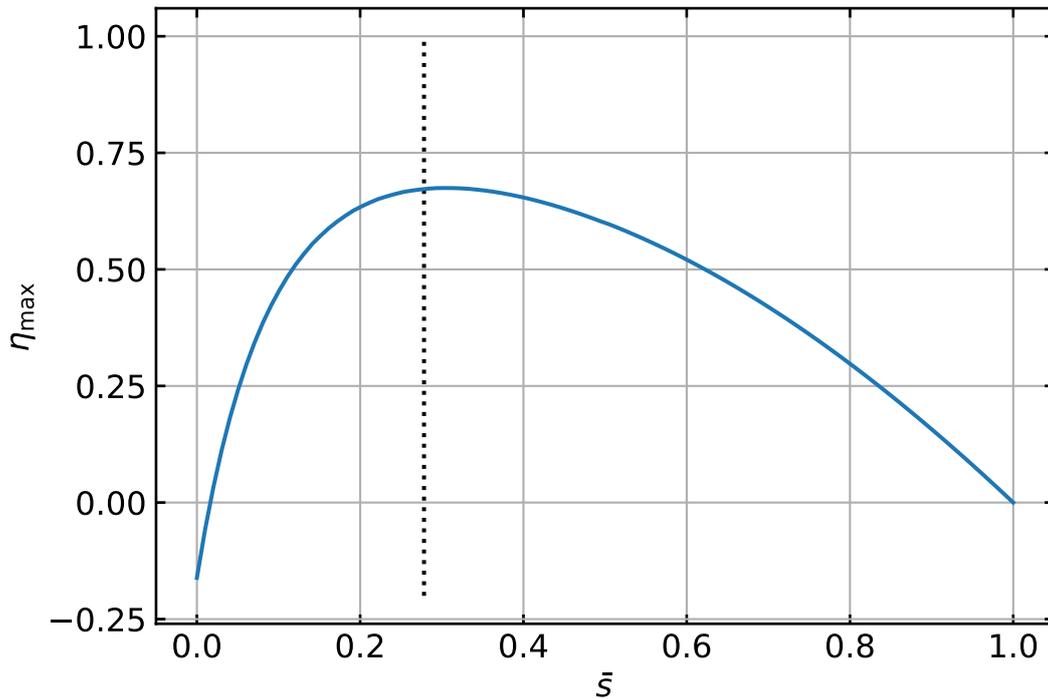


図7 理想的なサイクルに対する最大効率. 低温熱浴は逆温度 $\beta = 2.5$. 縦の点線は相転移点 $s \sim 0.28$ を表す.

るためには、相転移点 ($\bar{s} \sim 0.28$) 付近まで横磁場を掛ける必要があるが、駆動速度を速くしたとき大きく効率が下がるというデメリットが生じると言える. また、駆動速度を大きくした時効率が下がるこの関係は、転移点付近を経由するエンジンにおけるパワーと効率のトレードオフを示している.

本研究ではシステムサイズ $L = 2000$ の量子横磁場イジング模型上で実現された熱力学的なサイクルで、仕事取り出しの効率と駆動速度のトレードオフについて実験的な研究を行った. 量子相転移点を経由する際の駆動速度と励起エネルギーの間には、Kibble-Zurek 機構で説明できる冪的なスケーリングが観察された. そして、この冪的なスケーリングに起因するパワーと効率のトレードオフが観察された. システムサイズ $L = 2000$ のような大きな量子多体系において、実験的にパワーと効率のトレードオフを調べた研究は本研究が私の知る限り存在せず新規の結果である.

今後の発展としては、詳細ゆらぎの定理より導いた熱力学不確定性関係 [16,17] 等

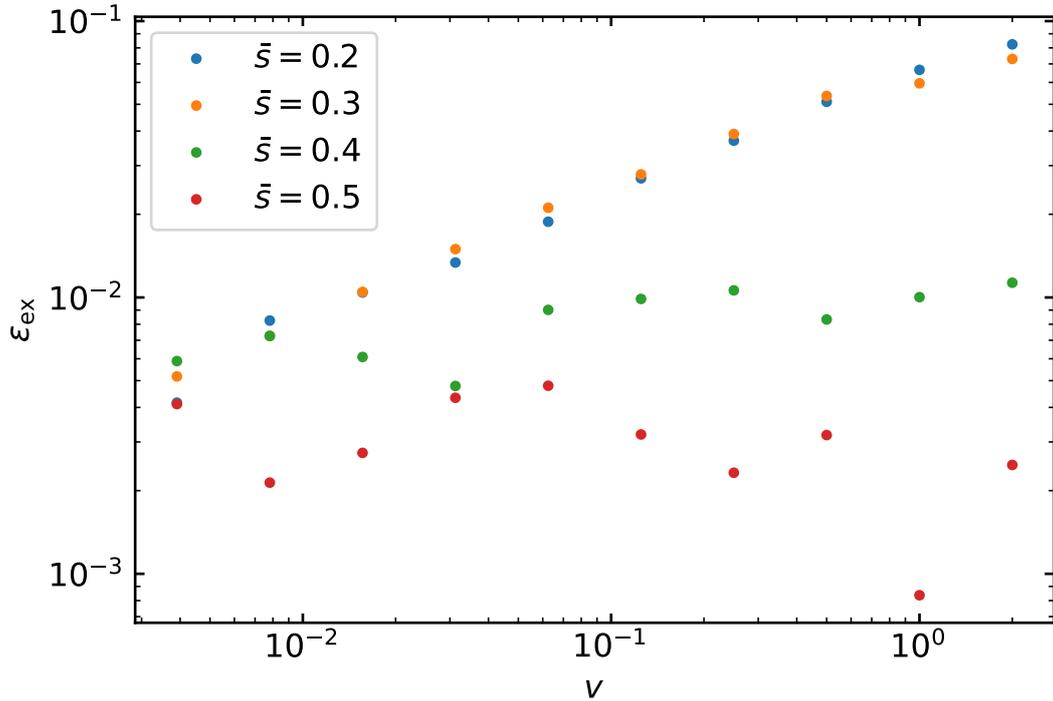


図8 定磁場冷却を行う制御パラメータ \bar{s} それぞれに対して、ストローク C の等温操作の駆動速度 v を変えながら ε_{ex} を測定及び計算した結果. 転移点付近を経由する $\bar{s} = 0.2, 0.3$ のとき冪的なスケーリングが観察されている. $s = 1$ のときのハミルトニアン基底エネルギーが -1 になるように無次元化している.

を利用して仕事の推定を行う事が考えられる. 本研究では, 実験の制約上実際に測定したのは最終状態のエネルギー E_{IV} の分布 $P(E_{IV})$ である. 従って直接仕事を測定したわけではなく, 理想的な最大仕事から励起エネルギーを引いて推定した. この推定量は, 熱力学極限における自由エネルギー密度, 内部エネルギー密度を利用しており, システムサイズ $L = 2000$ の場合は有限サイズ効果が存在するため, 実際には有限サイズ効果を考慮する必要がある. また, 推定した温度も利用しているため, 温度の推定誤差も含んでいる. さらに励起エネルギーの推定も, ストローク C の等温過程の熱の出入りは等温準静過程で説明できるという仮定のもとで行われている. これはハミルトニアンのエネルギースケールが数 GHz であるのに対して, 制御パラメータの駆動は μs スケールで行われており, 熱の出入りについて等温準静過程から

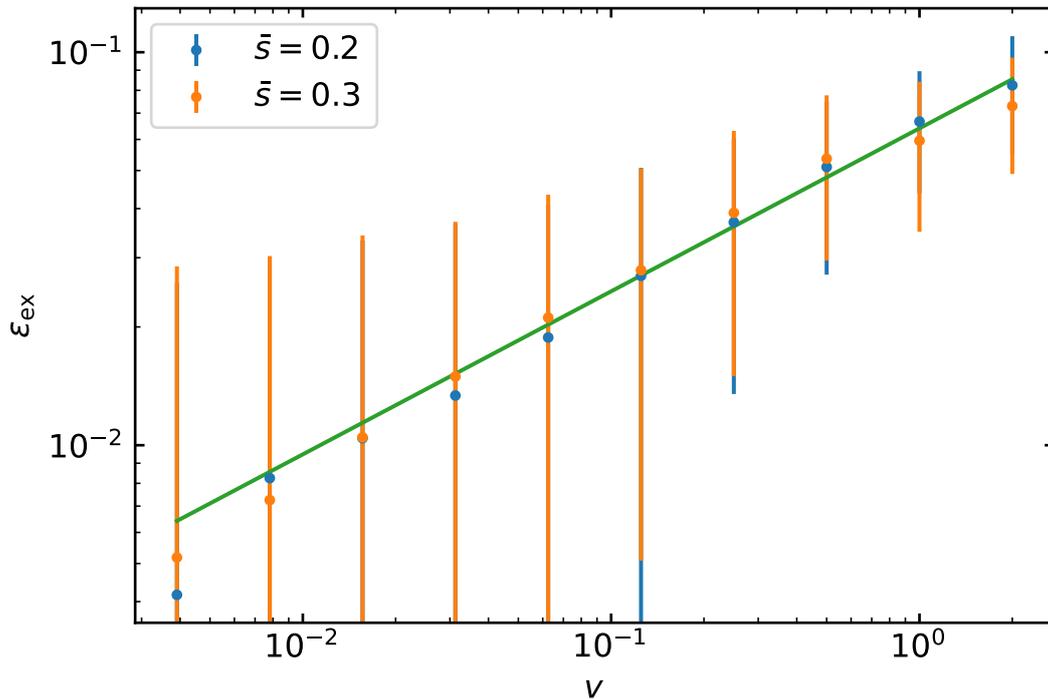


図9 転移点付近を経由する $\bar{s} = 0.2, 0.3$ に対する励起エネルギーの結果に対して最小自乗フィットによって得られたパラメータによる関数を、測定結果と合わせてプロットした結果。最小自乗フィットは $\varepsilon_{\text{ex}} = av^b$ という冪的なスケールングを示す関数形を仮定して行った。エラーバーは測定結果の標準偏差を表している。 v が小さい領域では、制御パラメータの駆動中に受けるノイズの積算が大きくなるため、エラーバーが大きくなっている。 $s = 1$ のときのハミルトニアン基底エネルギーが -1 になるように無次元化している。

大きくずれてはいないだろうという期待による。つまり等温準静過程より多くの熱が外の環境に流出しているならば、実際の励起エネルギーは今回の推定量より大きくなる（余計に流出した熱の分、本当はより大きく励起していたということ）。加えて、ストローク A のクエンチは有限速度であるため、仕事の収支が存在する可能性がある。そのため、仮定を行わず仕事を直接推定することも重要であり、熱力学不確定性関係等を利用して仕事の推定を行う意義がある。

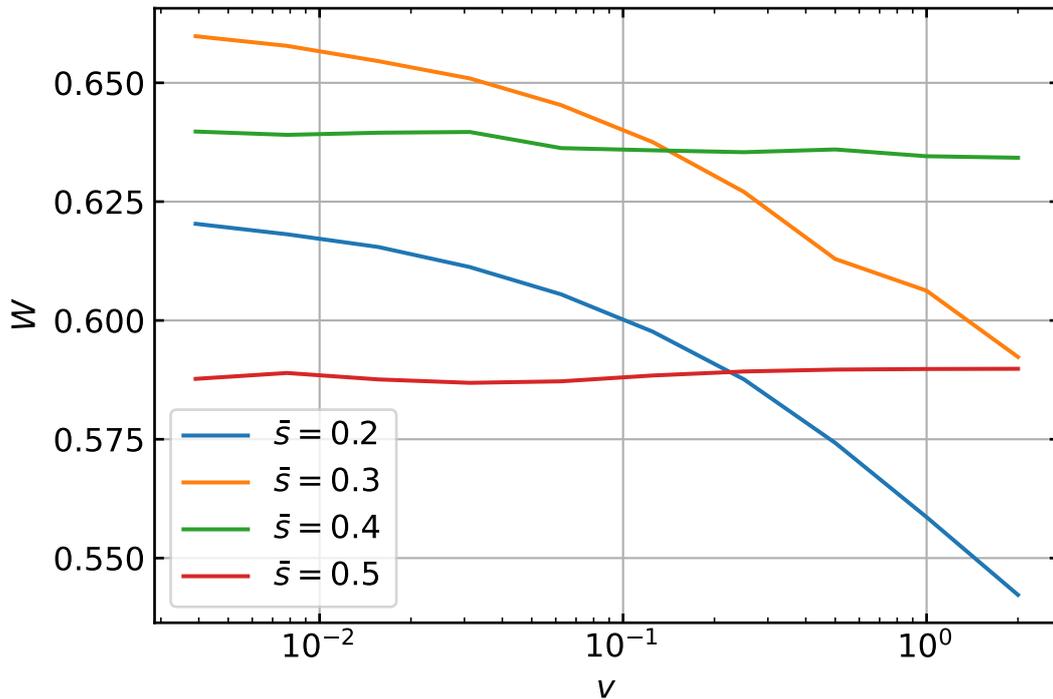


図 10 定磁場冷却を行う制御パラメータ \bar{s} それぞれに対して、転移点を経由する際の駆動速度を横軸，縦軸を仕事としてプロットした結果．駆動速度 v が小さい領域では，転移点付近で定磁場冷却を行う $\bar{s} = 0.3$ が最も大きな仕事を出力している．一方で転移点付近を経由する $\bar{s} = 0.2, 0.3$ の場合は，駆動速度を大きくすると大きく出力仕事が増加している． $s = 1$ のときのハミルトニアンの基底エネルギーが -1 になるように無次元化している．

4 謝辞

本インターンシップでご指導いただいた増子貴子様ならびに先進マテリアルデバイス研究所基盤技術研究部電磁場技術課の皆様に深く感謝いたします．また，見学の際に快く説明して頂いたみなとみらいリサーチセンターの皆様に感謝いたします．最後に長期インターンシップへの参加を後押しいただいた指導教官の沙川先生，副指導教官の小形先生，そして MERIT プログラムに感謝いたします．

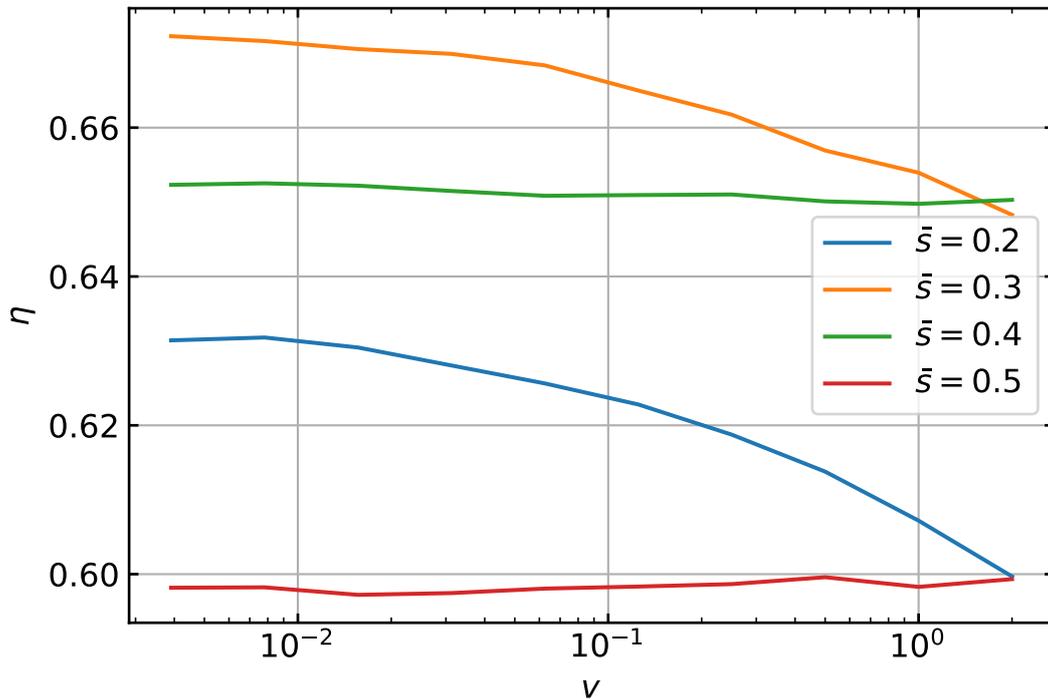


図 11 定磁場冷却を行う制御パラメータ \bar{s} それぞれに対して、転移点を経由する際の駆動速度を横軸、縦軸を効率としてプロットした結果。駆動速度 ν が小さい領域では、転移点付近で定磁場冷却を行う $\bar{s} = 0.3$ が最も大きな効率である。一方で転移点付近を経由する $\bar{s} = 0.2, 0.3$ の場合は、駆動速度を大きくすると大きく効率が減少している。

参考文献

- [1] R. Harris, Y. Sato, A. J. Berkley, M. Reis, F. Altomare, M. H. Amin, K. Boothby, P. Bunyk, C. 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, and J. Yao, *Phase transitions in a programmable quantum spin glass simulator*, *Science*). **361**, 6398 (2018) .

- [2] A. D. King, J. Carrasquilla, J. Raymond, I. Ozfidan, E. Andriyash, A. Berkley, M. Reis, T. Lanting, R. Harris, F. Altomare, K. Boothby, P. I. Bunyk, C. Enderud, A. Fréchet, E. Hoskinson, N. Ladizinsky, T. Oh, G. Poulin-Lamarre, C. Rich, Y. Sato, A. Y. Smirnov, L. J. Swenson, M. H. Volkman, J. Whittaker, J. Yao, 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**, 7719 (2018) .
- [3] A. D. King, C. Nisoli, E. D. Dahl, G. Poulin-Lamarre, and A. Lopez-Bezanilla, *Qubit spin ice*, Science. **373**, 6554 (2021) .
- [4] J. L. C. d. C. Filho, Z. G. Izquierdo, A. Saguia, T. Albash, I. Hen, and M. S. Sarandy, *Observation of many-body localization in an experimental quantum annealer*, arXiv:2108.06762.
- [5] Y. Bando, Y. Susa, H. Oshiyama, N. Shibata, M. Ohzeki, F. J. Gómez-Ruiz, D. A. Lidar, S. Suzuki, A. del Campo, and H. Nishimori, *Probing the universality of topological defect formation in a quantum annealer: Kibble-Zurek mechanism and beyond*, Phys. Rev. Res. **2**, 3 (2020) .
- [6] L. Buffoni and M. Campisi, *Thermodynamics of a Quantum Annealer*, Quantum Sci. Technol. **5**, 3 (2020) .
- [7] M. Campisi and R. Fazio, *The power of a critical heat engine*, Nat. Commun. **7**, 11895 (2016) .
- [8] Y. H. Ma, S. H. Su, and C. P. Sun, *Quantum thermodynamic cycle with quantum phase transition*, Phys. Rev. E **96**, 2 (2017) .
- [9] Z. Fei, N. Freitas, V. Cavina, H. T. Quan, and M. Esposito, *Work Statistics across a Quantum Phase Transition*, Phys. Rev. Lett. **124**, 17 (2020) .
- [10] R. B. S. V. Mukherjee, U. Divakaran, and A. Del Campo, *Universal finite-time thermodynamics of many-body quantum machines from Kibble-Zurek scaling*, Phys. Rev. Res. **2**, 4 (2020) .
- [11] A. Solfanelli, A. Santini, and M. Campisi, *Experimental Verification of Fluctuation Relations with a Quantum Computer*, PRX Quantum **2**, 3 (2021) .

- [12] E. Aurell and M. Ekeberg, *Inverse ising inference using all the data*, Phys. Rev. Lett. **108**, 9 (2012) .
- [13] 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**, 2 (2016) .
- [14] P. Pfeuty, *The one-dimensional Ising model with a transverse field*, Ann. Phys. **57**, 1 (1970) .
- [15] T. W. Kibble, *Topology of cosmic domains and strings*, J. Phys. A **9**, 8 (1976) .
- [16] A. M. Timpanaro, G. Guarnieri, J. Goold, and G. T. Landi, *Thermodynamic Uncertainty Relations from Exchange Fluctuation Theorems*, Phys. Rev. Lett. **123**, 9 (2019) .
- [17] Y. Zhang, *Comment on "Fluctuation Theorem Uncertainty Relation" and "Thermodynamic Uncertainty Relations from Exchange Fluctuation Theorems"*, arXiv:1910.12862.