THE UNIVERSITY OF TOKYO

Center of Innovation for Sustainable Quantum AI

テンソルネットワークと量子計算

東大理　大久保毅

- 量子多体系の（古典計算機での）計算
- 量子計算機を使った計算

コンテンツ

- はじめに
    - テンソルとテンソルネットワーク
    - 量子状態の表現と古典計算の困難
    - テンソルネットワークの基礎
- 量子状態の情報圧縮
    - テンソルネットワーク分解
    - 量子状態のエンタングルメント
- 種々のテンソルネットワークと量子エンタングルメント
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 量子物性への応用
    - 2次元無限系の計算手法
    - Kitaev模型への応用例
    - 量子コンピュータへの期待と応用例
- まとめ

コンテンツ

- はじめに
  - テンソルとテンソルネットワーク
  - 量子状態の表現と古典計算の困難
  - テンソルネットワークの基礎
- 量子状態の情報圧縮
  - テンソルネットワーク分解
  - 量子状態のエンタングルメント
- 種々のテンソルネットワークと量子エンタングルメント
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 量子物性への応用
  - 2次元無限系の計算手法
  - Kitaev模型への応用例
  - 量子コンピュータへの期待と応用例
- まとめ

テンソル？

- ベクトル　$\vec{v} : v_i$ → 1次元的な数字の並び
- 行列　$M : M_{i,j}$ → 2次元的な数字の並び

一般化

- (n階の）**テンソル**　$T : T_{i,j,k}$ → n次元的な数字の並び

【基本的な演算＝**縮約**】

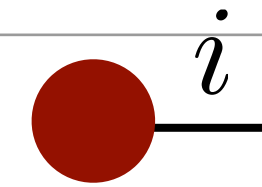
行列積：　$C_{i,j} = (AB)_{i,j} = \sum_k A_{i,k} B_{k,j}$

縮約：　$D_{i,j,k} = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} A_{i,j,\alpha,\beta} B_{\beta,\gamma} C_{\gamma,k,\alpha}$

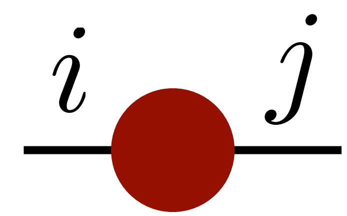
"足"が多くなると
表記が複雑...

ダイアグラムを用いたテンソル表記

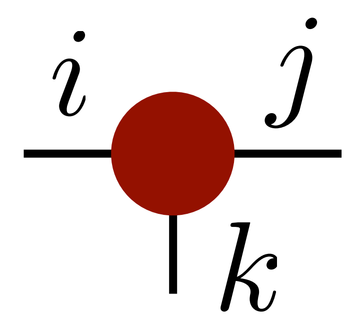
- ベクトル　$\vec{v}$: v_i



- 行列　M : $M_{i,j}$



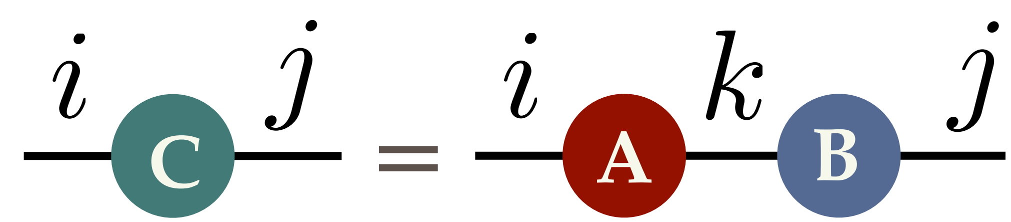
- テンソル　T : $T_{i,j,k}$



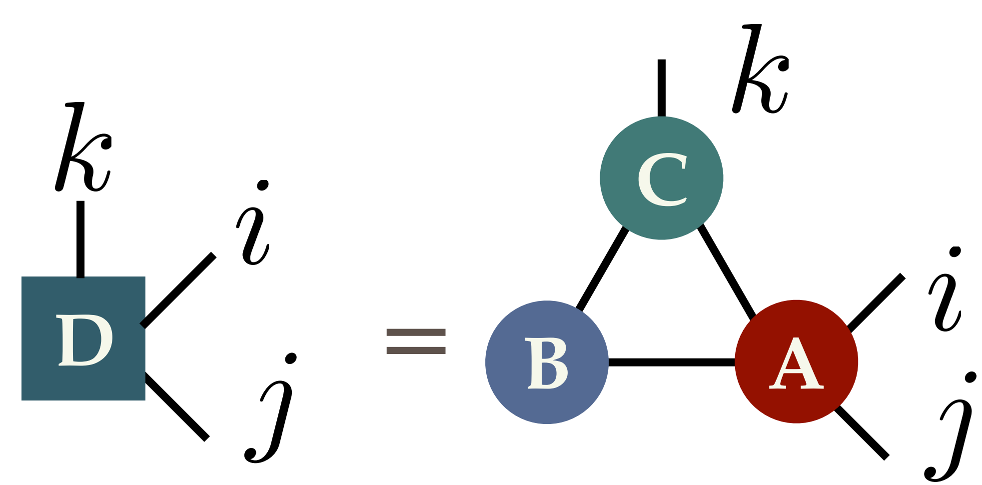
＊n階のテンソル＝n本の足

テンソルの積（縮約）の表現

$$C_{i,j} = (AB)_{i,j} = \sum_k A_{i,k} B_{k,j}$$



$$D_{i,j,k} = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} A_{i,j,\alpha,\beta} B_{\beta,\gamma} C_{\gamma,k,\alpha}$$

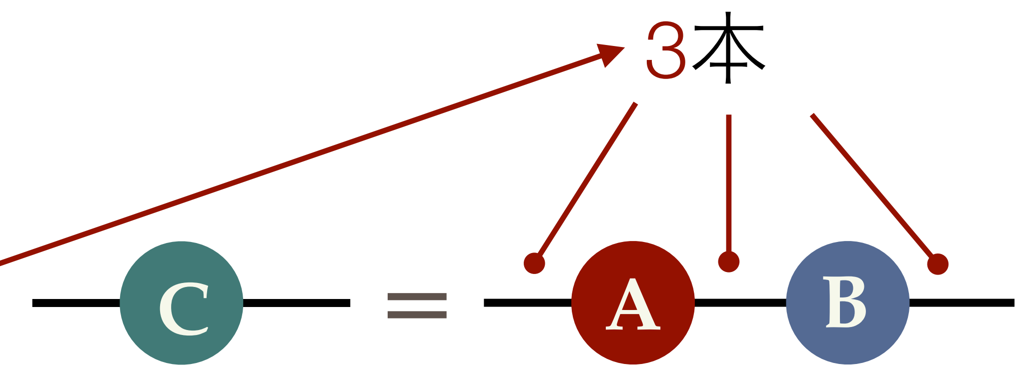


縮約の計算量

行列積： $A, B = \ \chi \times \chi$

$$C = AB$$

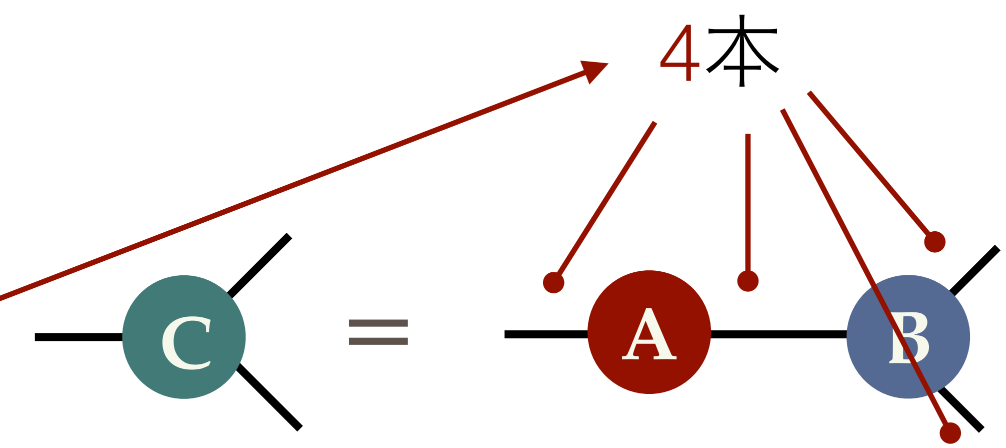
の計算量= $O(\chi^{3})$



テンソル縮約： $A = \ \chi \times \chi$
$B = \chi \times \chi \times \chi$

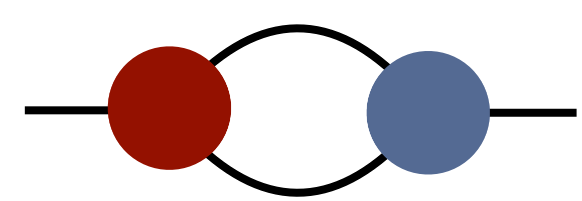
$$C = \sum_{\alpha} A_{:,\alpha} B_{\alpha,:,:}$$

の計算量= $O(\chi^{4})$



ダイアグラムとの対応

- 縮約の計算量はダイアグラムの足の数で分かる
- （メモリ使用量も分かる）



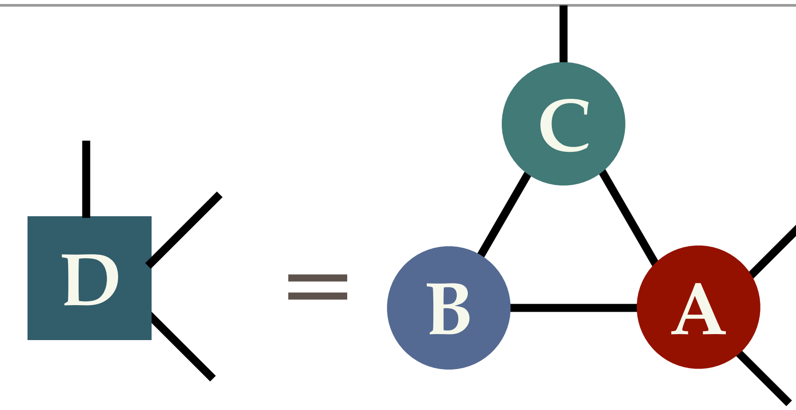
4本 $\longrightarrow$ $O(\chi^4)$

縮約の計算量と計算順

テンソル縮約：

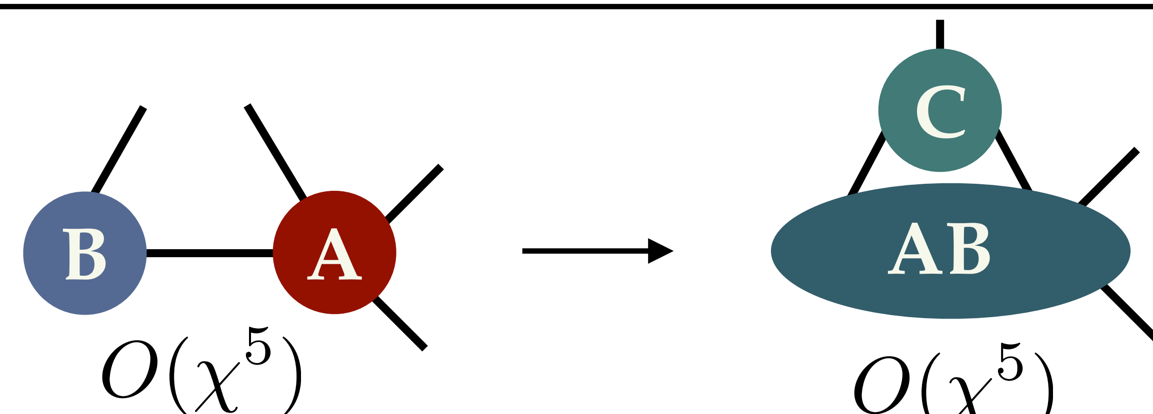
$$A = \chi \times \chi \times \chi \times \chi$$
$$B = \chi \times \chi$$
$$C = \chi \times \chi \times \chi$$

$$D = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} A_{:,:,\alpha,\beta} B_{\beta,\gamma} C_{\gamma,:,\alpha}$$



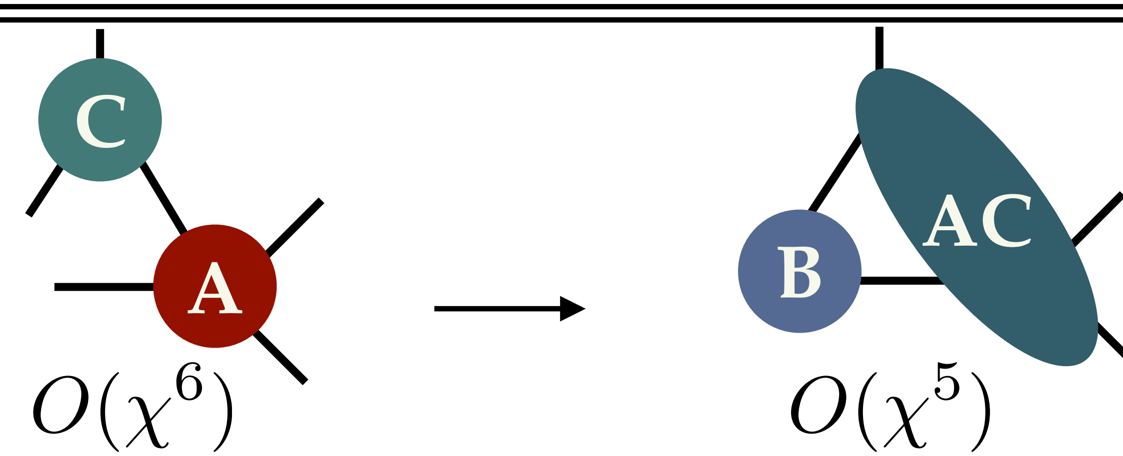
Case 1: $D = (AB)C$

の計算量= $O(\chi^5) + O(\chi^5)$



Case 2: $D = (AC)B$

の計算量= $O(\chi^6) + O(\chi^5)$



縮約の評価順で計算量が変わる！

＊最適順序の決定はNP困難。実用的なアルゴリズム例

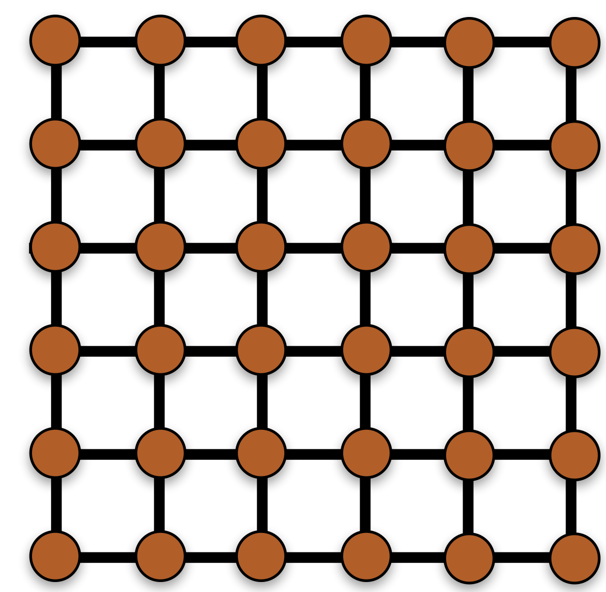
R.N.C. Pfeifer, *et al.*, Phys. Rev. E **90**, 033315 (2014).

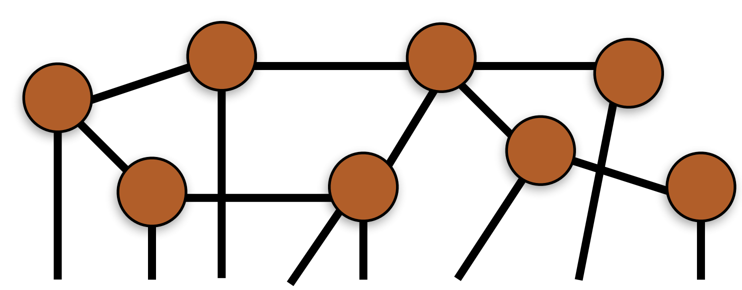
テンソルネットワーク

テンソルネットワーク（TN）：テンソルの縮約で構成されたネットワーク

【（ざっくりした）分類】

- Openな足：**あり** or **なし**
  - Openな足があり：TN自身が大きなテンソル
  - Openな足がなし：TNは数字
- ネットワーク構造：**規則的** or **不規則**
  - ネットワーク構造は問題に応じて変わる
    - 例：スピン模型の分配関数は規則的
    - 例：分子の多体電子状態は不規則
- ネットワークサイズ：**有限** or **無限**
  - 基本的に有限だが、場合によっては無限系も取り扱える

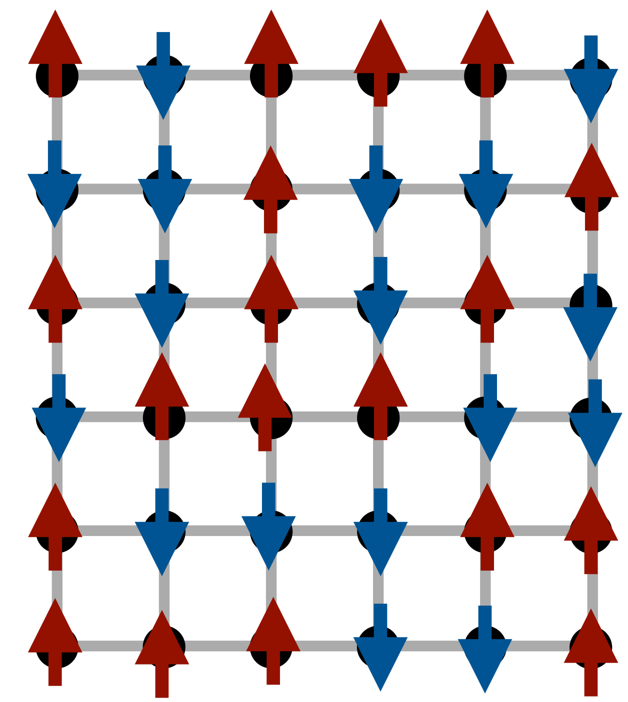




テンソルネットワークの例1：統計物理学

古典イジング模型（磁性体のモデル）

$$\mathcal{H} = -J\sum_{\langle i,j\rangle} S_i S_j \quad (S_i = \pm 1 = \uparrow, \downarrow)$$



温度Tでの確率分布：ボルツマン分布

$$P(\Gamma) = \frac{1}{Z} e^{-\beta\mathcal{H}(\Gamma)}$$

状態 :$\Gamma = \{S_1, S_2, \ldots, S_N\}$

逆温度 :$\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T$

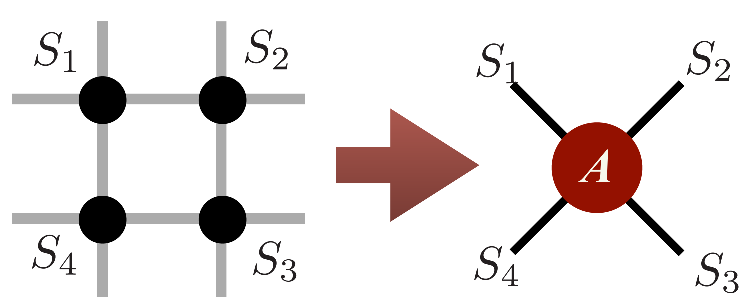
分配関数： $Z = \sum_{\Gamma} e^{-\beta\mathcal{H}(\Gamma)}$ (2^Nの和)

熱力学自由エネルギー

$$F = -k_B T \ln Z$$

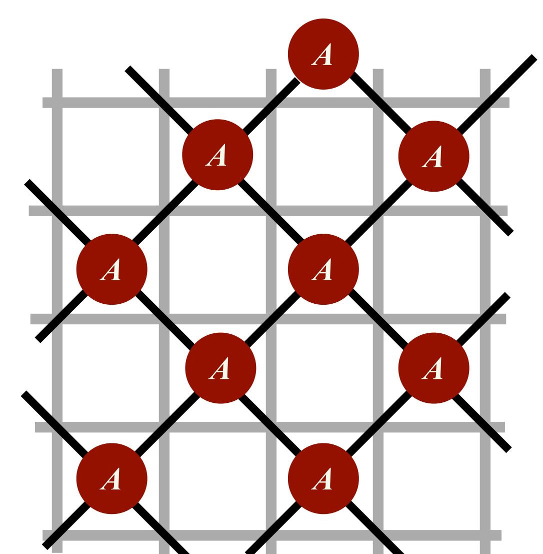
【分配関数のテンソルネットワーク表示】

$$e^{\beta J(S_1S_2+S_2S_3+S_3S_4+S_4S_1)} = A_{S_1S_2S_3S_4}$$



- Openな足は"なし"
- 規則的
- 有限〜無限

$Z =$



テンソルネットワークの例2：量子回路

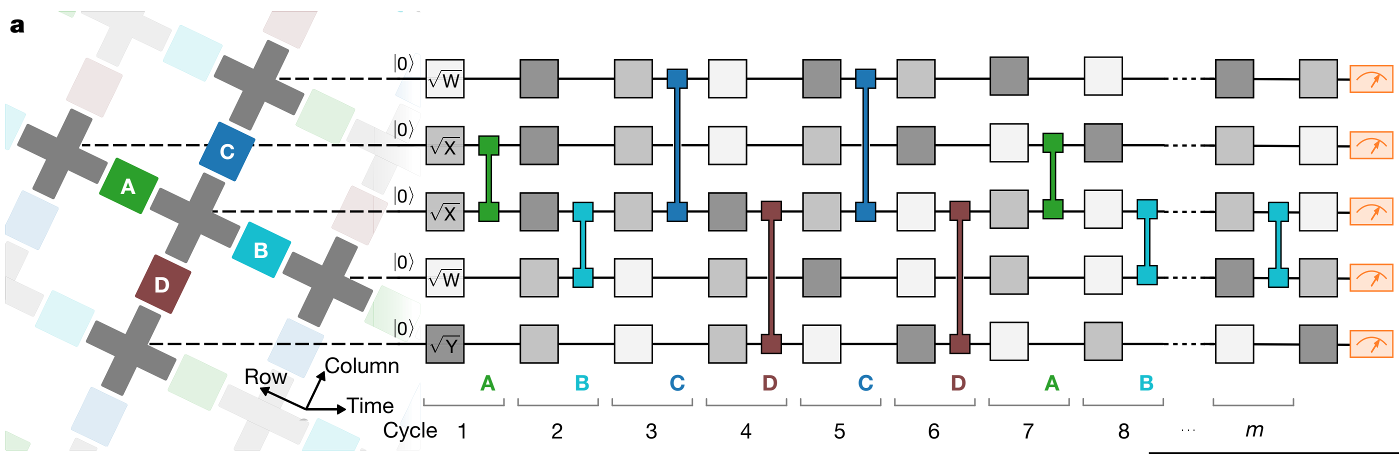
量子回路：

量子ビットに演算する**ゲート操作**の回路図

2次元のベクトル。
適当な基底、（$|0\rangle, |1\rangle$）で
表現すると2次元の複素ベクトル

適当な基底の元では、ユニタリ
行列（or "テンソル"）

googleの"量子超越" 回路　F. Arute, *et al.*, Nature 574, 505 (2019)



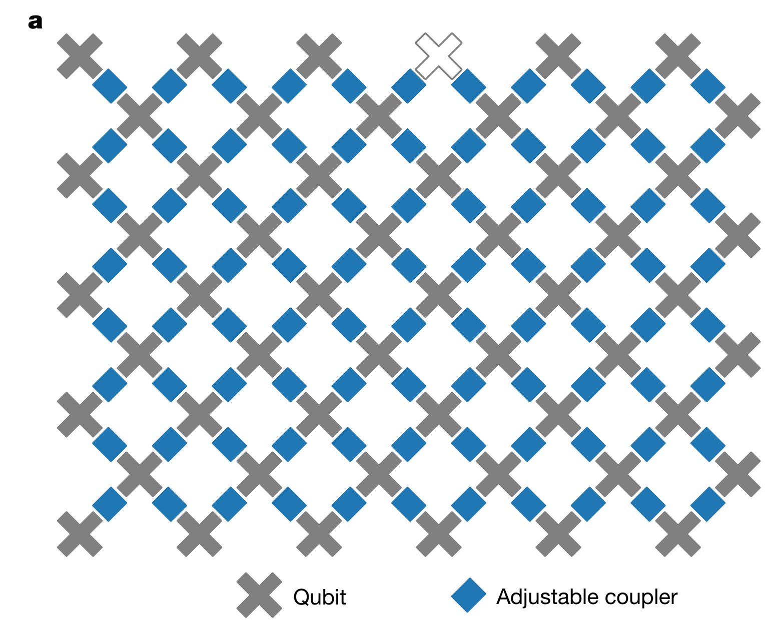
量子回路=テンソルネットワーク

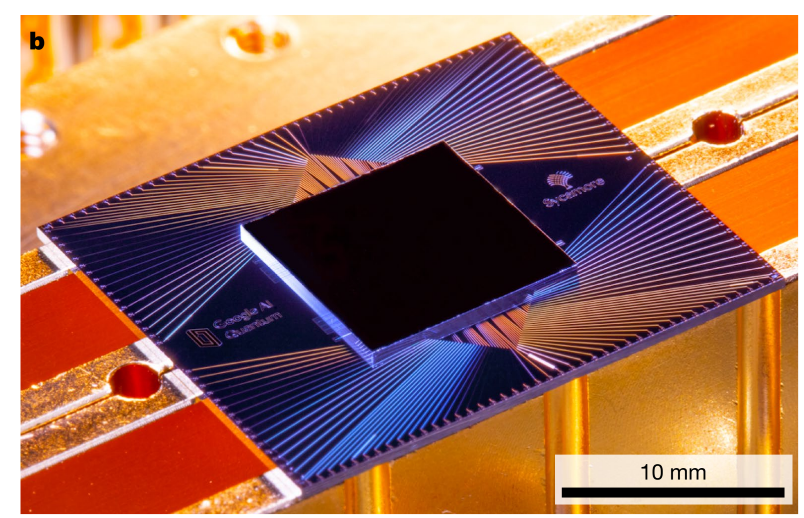
量子コンピュータの古典シミュレーション
＝テンソルネットワークの縮約

・Openな足は"あり"
　・"なし"もある
・不規則
・有限

googleの"量子超越" 回路

F. Arute, *et al.*, Nature 574, 505 (2019)

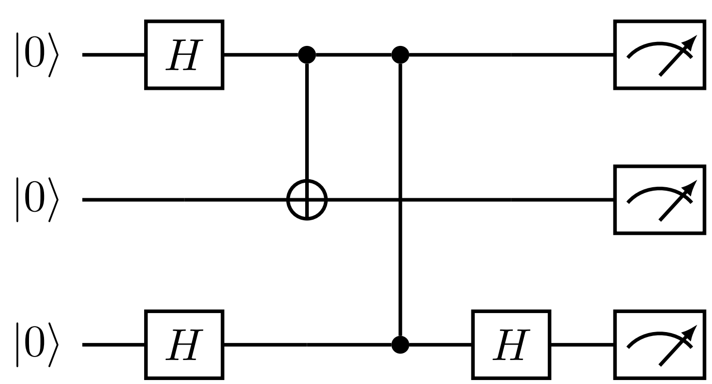




テンソルネットワークによる量子回路シミュレーション

量子回路のシミュレーション=テンソルネットワークの**縮約**

古典コンピュータでの計算：
実際の回路の実行順序によらず、最適な順番でテンソルの縮約計算を行うことで、計算コスト、メモリコストが低下



最先端の計算： Y. A. Liu, *et al*., Gordon bell Prize in SC21 (2021),

Googleが量子超越を主張したランダム量子回路の古典サンプリング

10,000年
（最初の見積もり）

304秒！　（cf. 量子コンピュータ=200秒）

テンソルネットワークの例3：量子多体状態

量子多体状態： $\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1,i_2,\ldots i_N\}} \underline{\Psi_{i_1 i_2 \ldots i_N}}\, \underline{|i_1 i_2 \ldots i_N\rangle}$$

基底

量子スピン・bit： $i = \uparrow, \downarrow = |0\rangle, |1\rangle$

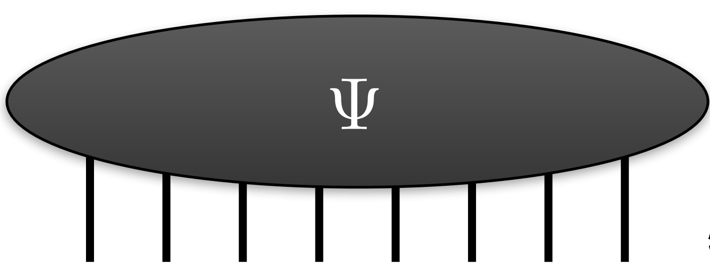
$|010100\cdots 0\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle \otimes \cdots$

量子化学：

i = 原子軌道・分子軌道の占有数

係数はテンソル

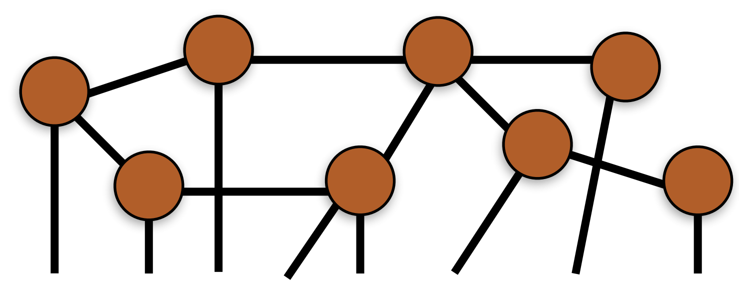
量子多体状態



量子相関の
特徴を利用した近似

$\sim e^N$の独立要素

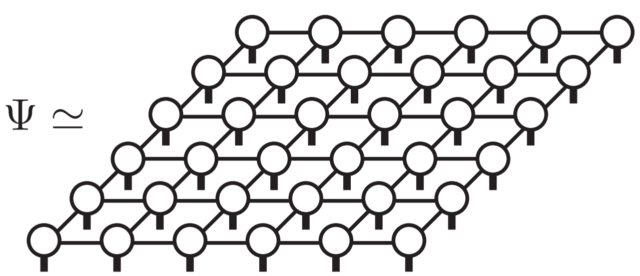
テンソルネットワーク分解



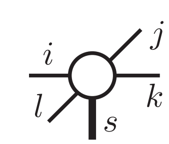
$\sim O(N)$の独立要素

PEPS (for 2d system)

$\Psi \simeq$



$T_{ijkl}[s] =$



量子多体系の低エネルギー状態：

- 一般の状態（ランダムベクトル）に比べて、少ない量子相関
  - c.f. エンタングルメントエントロピーの面積則

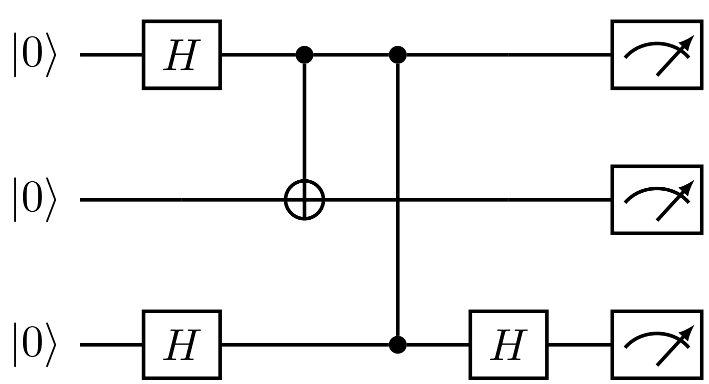
テンソルネットワークによる高精度の近似

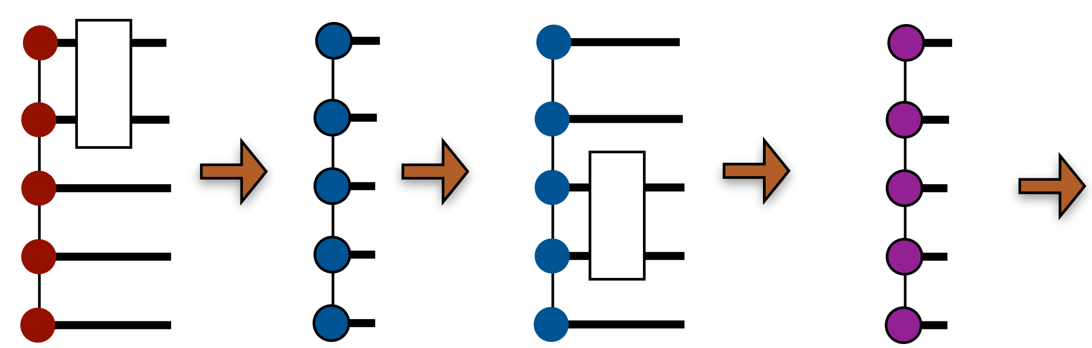
- Openな足は"あり"
- 規則・不規則
- 有限・無限

テンソルネットワークによる近似シミュレーション

量子回路の近似シミュレーション

古典コンピュータでの計算：
量子回路に従って移り変わる量子状態をテンソルネットワークで近似的に表現する





- 初期は小さいテンソルで表現可能
    - 非常に多くのqubitを古典コンピュータで取り扱える
- 回路が深くなると、一般にテンソルが大きくなる
    - 計算を進めるには（テンソルを小さく保つ）近似が必要
    - 深くなればなるほど、近似精度が低下

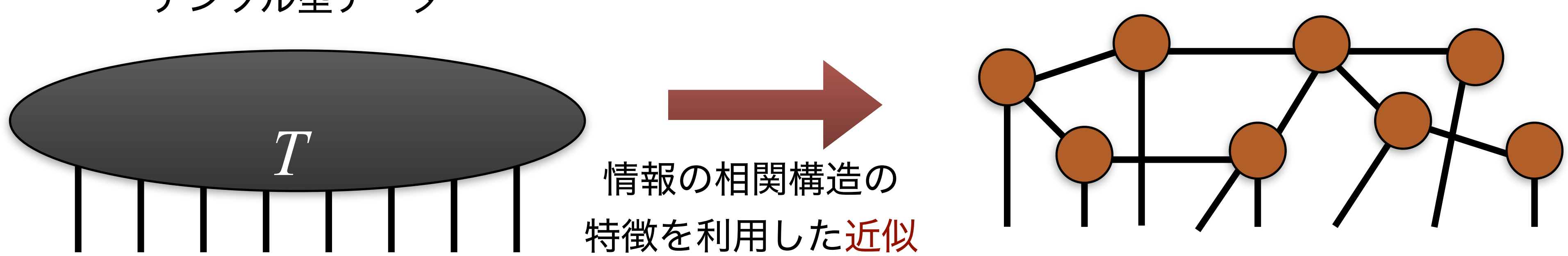
テンソルネットワークの例4：テンソル型データ

任意のテンソル型データ

- Openな足は"あり"
- 規則・不規則
- 有限

$T_{i_1,i_2,\ldots,i_N}$ ：量子多体状態と同様にして分解可能

テンソル型データ　　　　　テンソルネットワーク分解

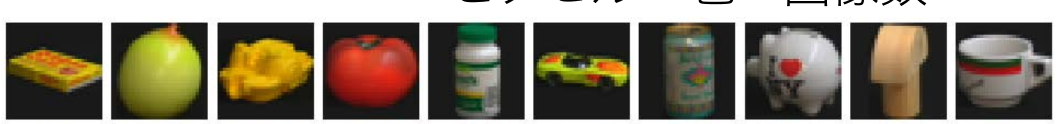


例1：画像データセット

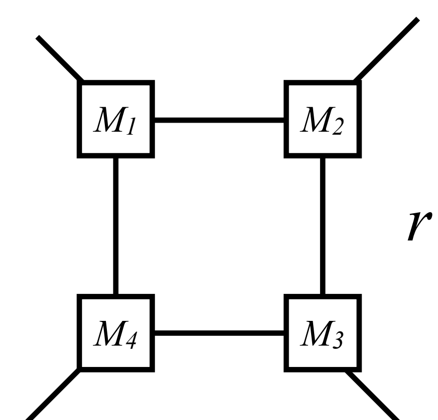
(Q. Zhao, et al arXiv:1606.05535)

COIL-100 dataset = 32 x 32 x 3 x 7200 テンソル

ピクセル　色　画像数



テンソルリング分解



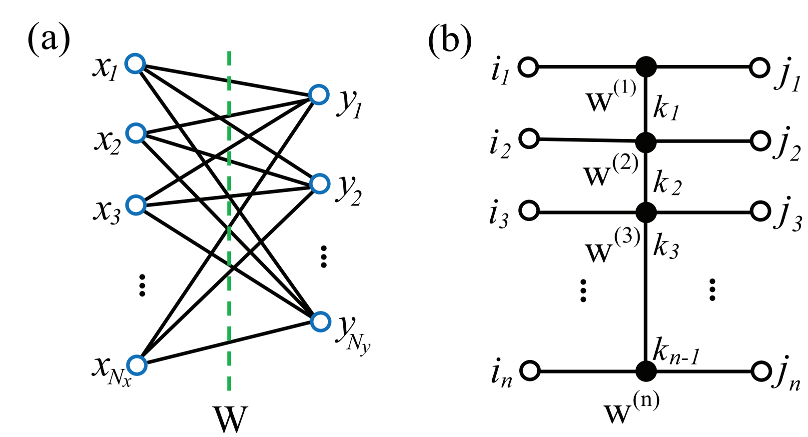
例２：ニューラルネットワークの重み行列

(Z.-F. Gao et al, Phys. Rev. Research **2**, 023300 (2020).)

x_i: input neuron (pixel)

y_i: output neuron

W_{ij}: weight matrix connecting x and y



コンテンツ

- はじめに
  - テンソルとテンソルネットワーク
  - 量子状態の表現と古典計算の困難
  - テンソルネットワークの基礎
- 量子状態の情報圧縮
  - テンソルネットワーク分解
  - 量子状態のエンタングルメント
- 種々のテンソルネットワークと量子エンタングルメント
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 量子物性への応用
  - 2次元無限系の計算手法
  - Kitaev模型への応用例
  - 量子コンピュータへの期待と応用例
- まとめ

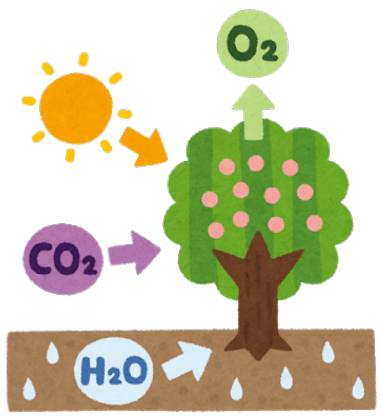
量子多体問題

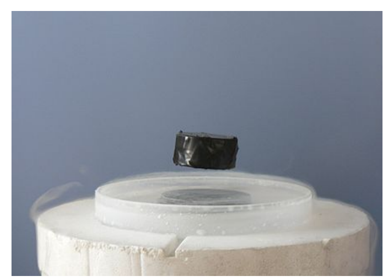
物質科学における多彩な現象

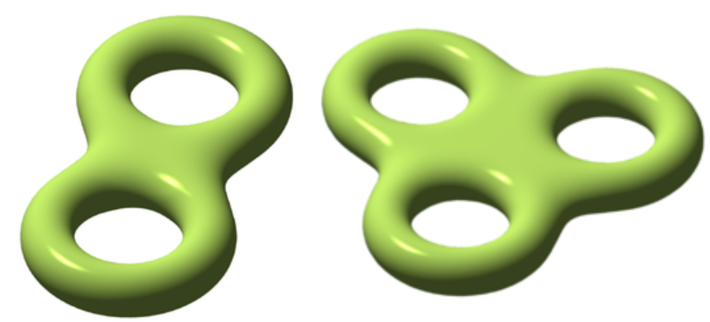
- 化学反応
- 超伝導
- トポロジカル状態
- …

多数の"粒子"が量子力学に従って"運動"

量子多体問題







wikipedia"マイスナー効果", "トーラス"より

量子力学の支配方程式＝シュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle = \mathcal{H}|\Psi\rangle$$

$\mathcal{H}$ ：ハミルトニアン（行列）

$|\Psi\rangle$ ：状態ベクトル

時間に依存しない場合

$$\boxed{\mathcal{H}|\Psi\rangle = \underbrace{E}_{\text{エネルギー}}|\Psi\rangle}$$

＝ 固有値問題

量子ビットの多体系

1 qubit

1つの量子ビットの状態は2つの基底ベクトルで表現

$|0\rangle, |1\rangle$　　$\boxed{\text{2次元ベクトル}}$

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

重ね合わせ？　$* \ |\alpha^2| + |\beta|^2 = 1$

確率 $P(|0\rangle) = |\alpha|^2$ で状態 $|0\rangle$

確率 $P(|1\rangle) = |\beta|^2$ で状態 $|1\rangle$

$= 1 - P(|0\rangle)$

を観測

2 qubits

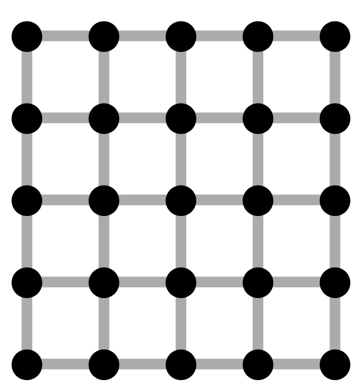
2つの量子ビット系の状態は4つの基底ベクトルで表現

$|0\rangle \otimes |0\rangle, |0\rangle \otimes |1\rangle, |1\rangle \otimes |0\rangle, |1\rangle \otimes |1\rangle$　$\boxed{\text{4次元ベクトル}}$

（簡略化した表現： $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$

$$|\Psi\rangle = C_{00}|00\rangle + C_{01}|01\rangle + C_{10}|10\rangle + C_{11}|11\rangle = \begin{pmatrix} C_{00} \\ C_{01} \\ C_{10} \\ C_{11} \end{pmatrix}$$

N qubits



状態を表すベクトルの次元 $\underline{2^N}$

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1, i_2, \ldots i_N\}} \Psi_{i_1 i_2 \ldots i_N} |i_1 i_2 \ldots i_N\rangle$$

指数関数的に大きい！

$2^{10} = 1024 \sim 10^3$

$2^{20} \sim 10^6, 2^{100} \sim 10^{30}$

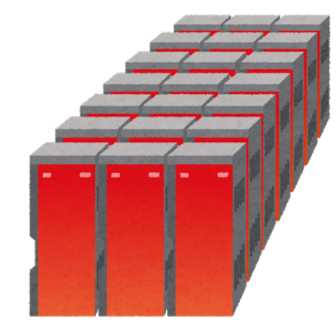
量子多体問題の困難

シュレディンガー方程式：$\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$

*N*量子ビットの場合　$|\Psi\rangle$ ：2^N次元のベクトル
　　　　　　　　　　$\mathcal{H}$ ：$2^N \times 2^N$の行列

- ベクトル空間の次元は"粒子数"に対して指数関数的に大きい
- 量子多体問題〜「巨大な行列」の固有値問題

古典コンピュータでこの運動方程式を厳密に解くには、
膨大なメモリと膨大な計算時間が必要



スパコンを用いても、 50 qubits程度しか計算できない

古典計算機でどれくらい頑張れる？

量子コンピュータ＝高度に制御された量子系

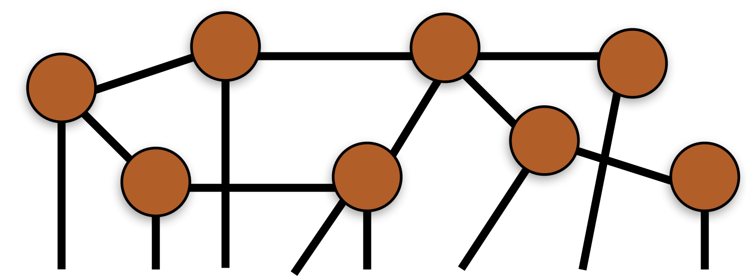
古典計算機では計算できないことを
“計算”できる可能性！

コンテンツ

- はじめに
  - テンソルとテンソルネットワーク
  - 量子状態の表現と古典計算の困難
  - テンソルネットワークの基礎
- 量子状態の情報圧縮
  - テンソルネットワーク分解
  - 量子状態のエンタングルメント
- 種々のテンソルネットワークと量子エンタングルメント
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 量子物性への応用
  - 2次元無限系の計算手法
  - Kitaev模型への応用例
  - 量子コンピュータへの期待と応用例
- まとめ

テンソルネットワークの数値計算

テンソルネットワークを用いた応用の基本計算要素



- **テンソルの縮約**
  - 基本的に、2つずつ縮約計算をする
  - テンソルを行列に変形し、BLASなどを用いる
- **テンソルの低ランク近似**
  - 特異値分解による低ランク近似の拡張
  - 近似的な縮約を行う目的などに用いられる
  - 多くの場合、テンソルを行列に変形し、行列の特異値分解を用いる
- **テンソルの線形問題**
  - テンソルから構成される行列の（一般化）固有値問題
  - 量子多体問題、テンソル分解などの"最適化"で使用

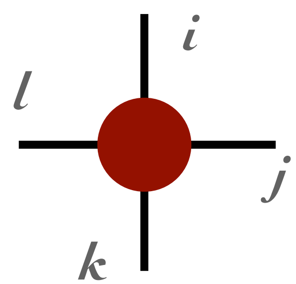
テンソルの基本演算は、（現状は）行列に変形して行われる

cf. TBLIS テンソル向けのBLAS（BLIS= BLAS-like Library Instantiation Software)
https://github.com/devinamatthews/tblis

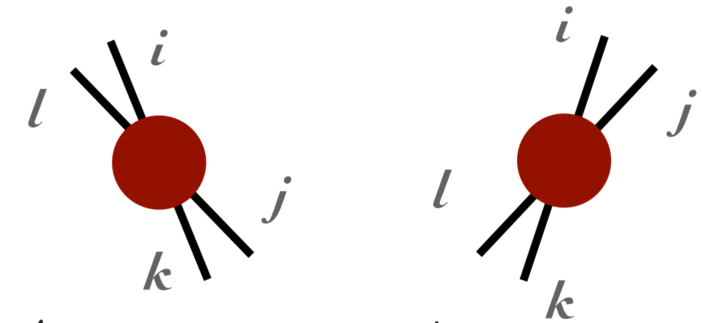
テンソルの行列への変形

テンソルの足をまとめて行列とみなす

ダイアグラム



$A_{i,j,k,l}$



$A_{\underline{(i,l)},(j,k)}$ $A_{(i,j),(k,l)}$

$i,\ l = 0,\ 1$のとき

$(0,0) \to 0$
$(0,1) \to 1$
$(1,0) \to 2$
$(1,1) \to 3$

テンソル	$A_{i,j,k,l}$	→	$A_{(i,l),(j,k)}$	$A_{(i,j),(k,l)}$
形状	$\chi\times\chi\times\chi\times\chi$		$\chi^2\times\chi^2$	$\chi^2\times\chi^2$

- テンソル用のライブラリで簡単に行える。（例：numpy.reshape)
- 行列への変形は一般に、一意ではない
  - どの様に行列化するかは、目的に合わせる

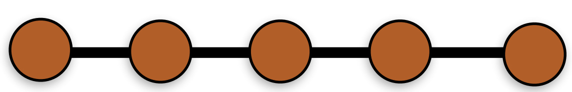
テンソルネットワークの縮約

テンソルネットワーク縮約の計算量

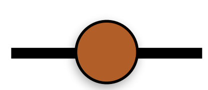
ループのないツリー型の構造以外では、

計算量はテンソル数に関して、指数関数的に増大する

長さNのchain



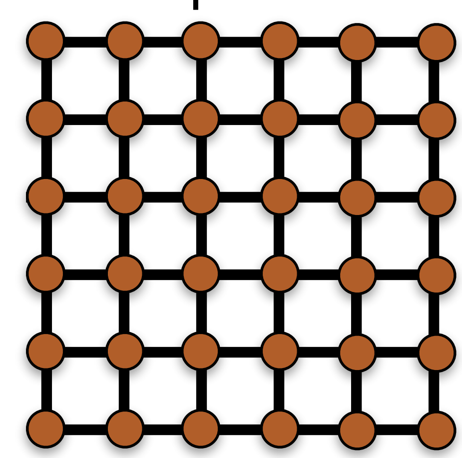
局所テンソル：



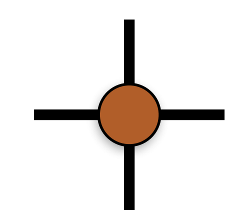
$\chi \times \chi$

端から順に縮約：$O(N\chi^2)$

$L\times L$のsquare lattice

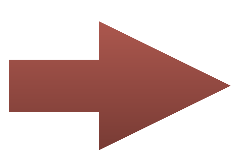


局所テンソル：



$\chi \times \chi \times \chi \times \chi$

端から順に縮約：$O(L^2\chi^L)$



大規模なテンソルネットワーク縮約は近似的に評価

2d 規則TNに対する汎用的アプローチ：

- テンソル繰り込み
- 行列積状態法
- 角転送繰り込み群

＊不規則でも同種の近似は可能

コンテンツ

- はじめに
    - テンソルとテンソルネットワーク
    - 量子状態の表現と古典計算の困難
    - テンソルネットワークの基礎
- 量子状態の情報圧縮
    - テンソルネットワーク分解
    - 量子状態のエンタングルメント
- 種々のテンソルネットワークと量子エンタングルメント
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 量子物性への応用
    - 2次元無限系の計算手法
    - Kitaev模型への応用例
    - 量子コンピュータへの期待と応用例
- まとめ

量子状態の圧縮可能性

指数関数的に大きな状態空間を古典計算機で全て扱うことは不可能

実効的な次元を減らしたい

どんな時に情報を圧縮して表現できるだろうか？

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1, i_2, \ldots i_N\}} \Psi_{i_1 i_2 \ldots i_N} |i_1 i_2 \ldots i_N\rangle$$

（１）ほとんどの係数がゼロ（またはとても小さい）

例：古典的状態 $|\Psi\rangle = |01011\ldots00\rangle$

非ゼロの成分に対応する基底の情報（整数）のみを保持

（２）係数の間になんらかの相関構造が存在

例：直積状態 $|\Psi\rangle = |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle \otimes \cdots$

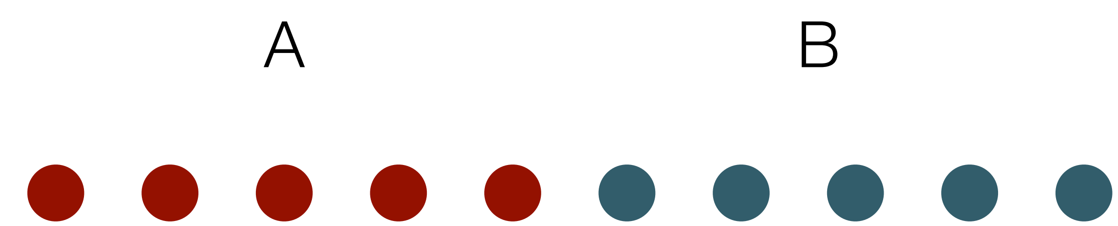
$$|\phi_1\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

$$|\phi_1\rangle = |01\rangle - |10\rangle$$

相関構造と独立な成分だけを保持

行列の情報圧縮：低ランク近似

量子系を二つの部分に分ける



$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} \underline{M_{i,j}} |A_i\rangle \otimes |B_j\rangle$$

係数を表す「行列」を近似して情報圧縮したい！

低ランク近似：

行列Mの低ランク行列での近似　$\mathrm{rank}(\tilde{M}) = R < \mathrm{rank}(M)$

$\boxed{\text{いらない情報をそぎ落として、重要な情報だけを残す}}$

近似の精度

$$\epsilon = \|M - \tilde{M}\| \qquad ||X|| \equiv \sqrt{\sum_{i,j} X_{ij}^2}$$

$$\min_{\tilde{M}_{ij};\mathrm{rank}\tilde{M}=R} \|A - \tilde{A}\|$$

を満たす最適な低ランク近似は

特異値分解（SVD）から得られる

行列の情報圧縮：特異値分解

特異値分解：　任意の*N*×*M*行列は以下の形に一意に分解できる

$$M_{i,j} = \sum_{k=1}^{\min(N,M)} U_{ik}\lambda_k V_{jk}^*$$

λ_k　：特異値　$\lambda_k \geq 0$　$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \cdots$ と並べると便利

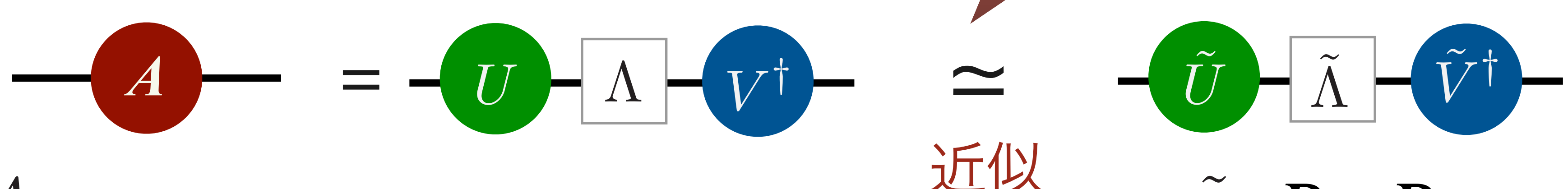
U_{ik}, V_{jk}^*　：一般化ユニタリ行列　$\sum_i U_{ik}U_{il}^* = \delta_{kl}$　$\sum_i V_{jk}V_{jl}^* = \delta_{kl}$

rank(A) = 非ゼロの特異値の数

*M*の最適な*R*ランク近似：　特異値を大きい方から*R*個だけ残し、

残りを

これのテンソルへの拡張？



A :$M\times N$

(M ≦ N)

Λ :$M\times M$

U, V:(M,N)$\times M$

$\tilde{\Lambda}$:$R\times R$

$\tilde{U}, \tilde{V}$:(M,N)$\times R$

テンソルネットワーク分解

ターゲット: 局所空間の積の構造を持つベクトル空間（テンソル）

$$\vec{v} \in \mathbb{C}^M \qquad \mathbb{C}^M = \mathbb{C}^a \otimes \mathbb{C}^a \otimes \cdots \mathbb{C}^a$$

$$M \sim a^N$$

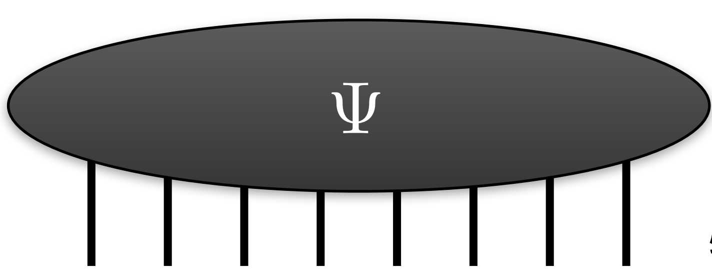
*局所的な空間の次元は異なっても良い

例：量子状態

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1,i_2,\dots i_N\}} \underline{\Psi_{i_1 i_2 \dots i_N}} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle$$

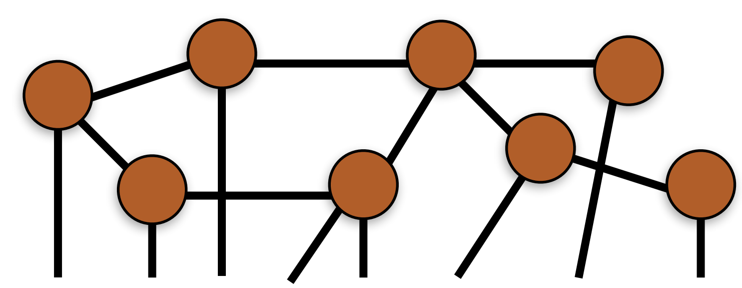
係数はテンソル

量子多体状態



量子相関の
特徴を利用した近似

テンソルネットワーク分解



~e^Nの独立要素

~$O(N)$の独立要素

良いテンソルネットワーク？

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1, i_2, \ldots i_N\}} \underline{\Psi_{i_1 i_2 \ldots i_N}} |i_1 i_2 \ldots i_N\rangle$$

係数はテンソル

$\sim e^N$の独立要素

$\sim O(N)$の独立要素

良いネットワーク = 量子的な相関を適切に捉えているもの

量子相関が小さい：$|\Psi\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle$ （直積状態）

量子相関が大きい：$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \otimes |1\rangle + |1\rangle \otimes |0\rangle)$ （ベル状態）

量子相関の定量的な特徴づけ？

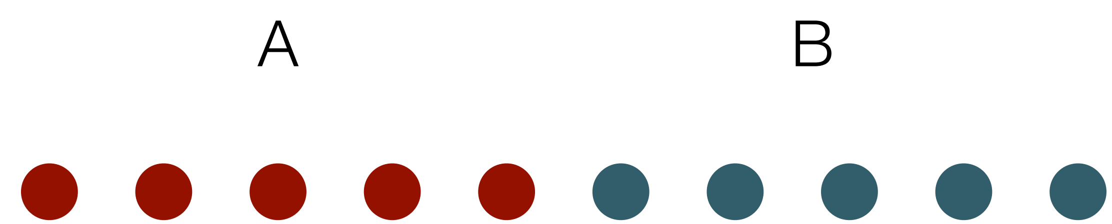
コンテンツ

- はじめに
  - テンソルとテンソルネットワーク
  - 量子状態の表現と古典計算の困難
  - テンソルネットワークの基礎
- 量子状態の情報圧縮
  - テンソルネットワーク分解
  - 量子状態のエンタングルメント
- 種々のテンソルネットワークと量子エンタングルメント
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 量子物性への応用
  - 2次元無限系の計算手法
  - Kitaev模型への応用例
  - 量子コンピュータへの期待と応用例
- まとめ

量子状態のシュミット分解

量子状態： $|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1,i_2,\dots i_N\}} \Psi_{i_1 i_2 \dots i_N} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle$

シュミット分解

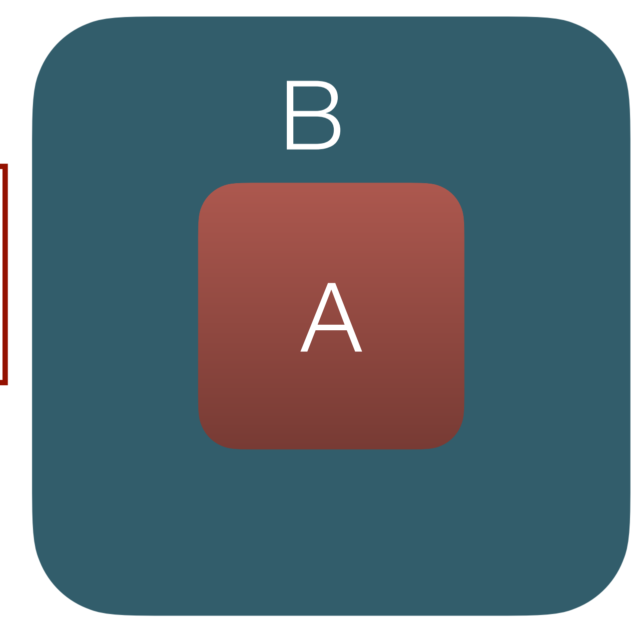


量子系を二つの部分に分ける

量子状態は一般にそれぞれの空間での
適切な直交基底の重ね合わせで表現できる

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} M_{i,j} |A_i\rangle \otimes |B_j\rangle = \sum_i \lambda_i |\alpha_i\rangle \otimes |\beta_i\rangle$$

$$M_{i,j} \equiv \Psi_{\underbrace{(i_1,\dots)}_{A},\underbrace{(\dots,i_N)}_{B}} \qquad |A_i\rangle = |i_1, i_2, \dots\rangle$$
$$|B_j\rangle = |\dots, i_{N-1}, i_N\rangle$$



正規直交基底 $\langle A_i|A_j\rangle = \langle B_i|B_j\rangle = \delta_{i,j},$
$\langle \alpha_i|\alpha_j\rangle = \langle \beta_i|\beta_j\rangle = \delta_{i,j}$

シュミット係数 $\lambda_i \geq 0$

特異値分解とシュミット分解

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} M_{i,j} |A_i\rangle \otimes |B_j\rangle$$

特異値： $\lambda_m \geq 0$

特異値分解

$$M_{i,j} = \sum_m U_{i,m} \lambda_m V^\dagger_{m,j}$$

特異ベクトル：

$$\sum_i U^\dagger_{m,i} U_{i,m'} = \delta_{m,m'}$$

$$\sum_j V^\dagger_{m,j} V_{i,m'} = \delta_{m,m'}$$

シュミット分解との関係：

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} M_{i,j} |A_i\rangle \otimes |B_j\rangle = \sum_m \lambda_m |\alpha_m\rangle \otimes |\beta_m\rangle$$

$$|\alpha_m\rangle = \sum_i U_{i,m} |A_i\rangle$$

$$|\beta_m\rangle = \sum_j V^\dagger_{m,j} |B_j\rangle$$

$$\langle \alpha_m | \alpha_{m'} \rangle = \langle \beta_m | \beta_{m'} \rangle = \delta_{m,m'}$$

量子状態の特異値分解 = シュミット分解

非ゼロのシュミット係数の数は、行列Mのランクに対応

量子状態のシュミットランク

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} M_{i,j} |A_i\rangle \otimes |B_j\rangle = \sum_m \lambda_m |\alpha_m\rangle \otimes |\beta_m\rangle$$

シュミットランク＝非ゼロのシュミット係数の数

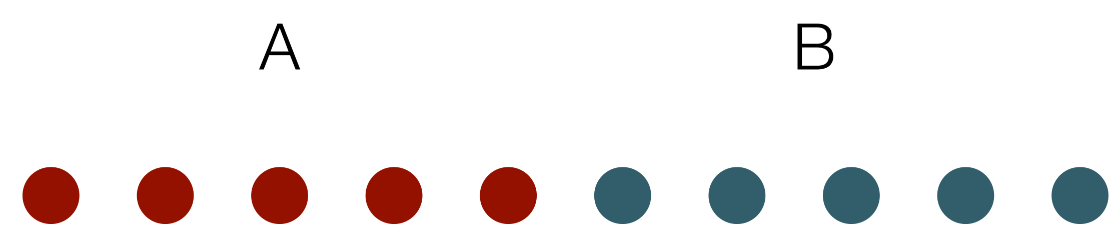
シュミットランクは二つの “領域” A, Bの間の量子相関を特徴づける

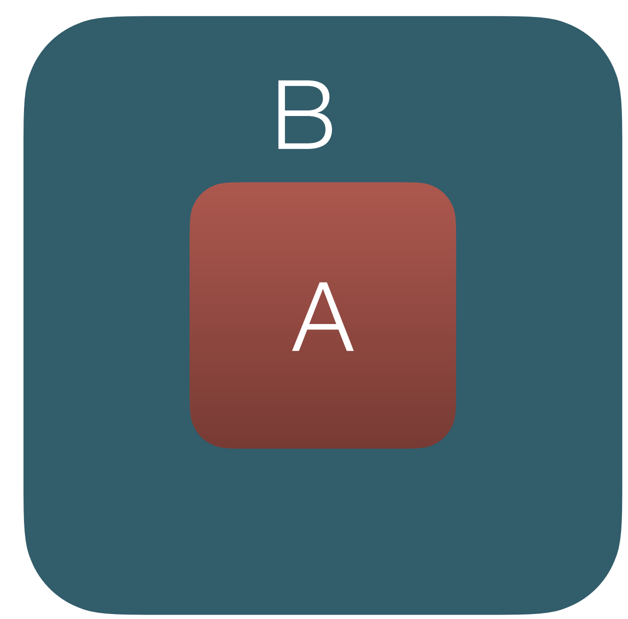
- シュミットランク = 1

$$|\Psi\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$$

量子状態はある二つの状態の単一の積で表される

直積状態





- シュミットランク > 1

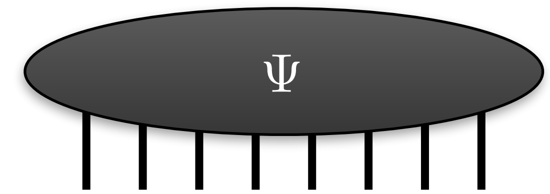
$$|\Psi\rangle = \sum_m \lambda_m |\alpha_m\rangle \otimes |\beta_m\rangle$$

量子状態は二つ以上の直積状態の和で表される

（非局所相関の期限。Cf. 2022年のノーベル物理学賞）

（補足）縮約密度行列

量子状態： $|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1, i_2, \ldots i_N\}} \Psi_{i_1 i_2 \ldots i_N} |i_1 i_2 \ldots i_N\rangle$

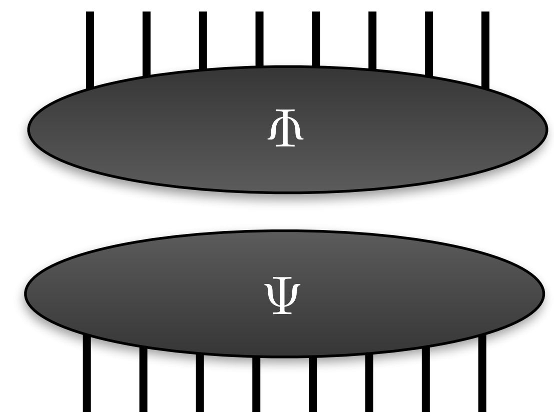


密度行列： $\rho_{ij} = \Psi_i \Psi_j^*$

$$i = (i_1, i_2, \ldots, i_N)$$

*Note: $\mathrm{rank}\ \rho = 1$

$\rho =$



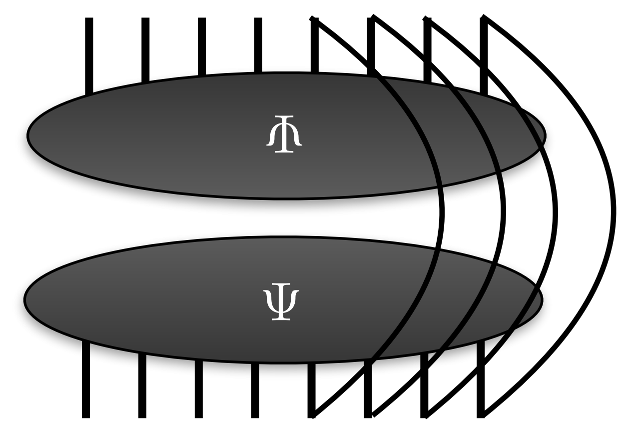
縮約密度行列：

密度行列の一部の自由度 (i_n)だけトレースをとる

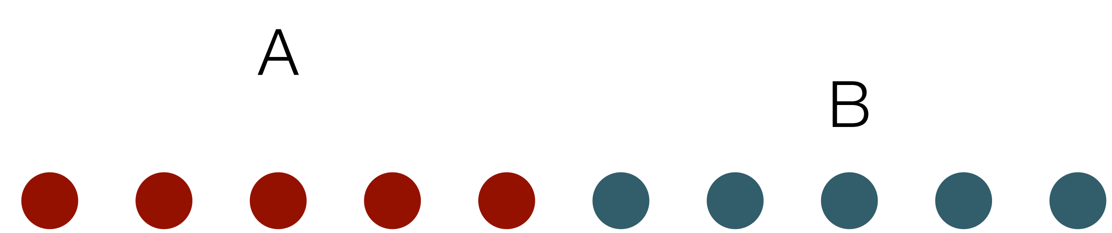
$\rho_A = \mathrm{Tr}_B \rho$: Aの空間で半正定値の正方行列

*Note: 一般に $\mathrm{rank}\ \rho_A > 1$

$\rho_A =$

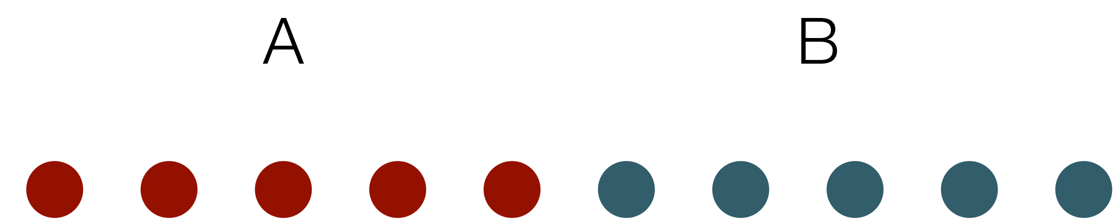


$$\boxed{(\rho_A)_{i_A, j_A} = \sum_{\underline{i_B}} \rho_{(i_A, \underline{i_B}), (j_A, \underline{i_B})}}$$



エンタングルメントエントロピー

エンタングルメントエントロピー（EE）：



部分系の縮約密度行列：$\rho_A = \mathrm{Tr}_B |\Psi\rangle\langle\Psi|$

エンタングルメントエントロピー $= \rho_A$ を確率分布として見た時のエントロピー

$$S = -\mathrm{Tr}\,(\rho_A \log \rho_A)$$

シュミット分解：$|\Psi\rangle = \sum_i \lambda_i |\alpha_i\rangle \otimes |\beta_i\rangle$

$$\rho_A = \sum_i \lambda_i^2 |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$$

$$S = -\sum_i \lambda_i^2 \log \lambda_i^2 \qquad (\sum_i \lambda_i^2 = 1)$$

エンタングルメントエントロピーはシュミット係数の二乗を確率分布とした時のエントロピー

（これより、$S = -\mathrm{Tr}(\rho_B \log \rho_B)$ で計算しても同じ値になる)

エンタングルメントエントロピーの振る舞い

エンタングルメントエントロピー= シュミット係数のスペクトルと関係

$$S = -\mathrm{Tr}(\rho_A \log \rho_A) = -\sum_i \lambda_i^2 \log \lambda_i^2$$

- $\mathrm{rank}\rho_A = 1$

$$\lambda_1 = 1, \lambda_j = 0 \ (j \neq 1) \Rightarrow S = 0$$

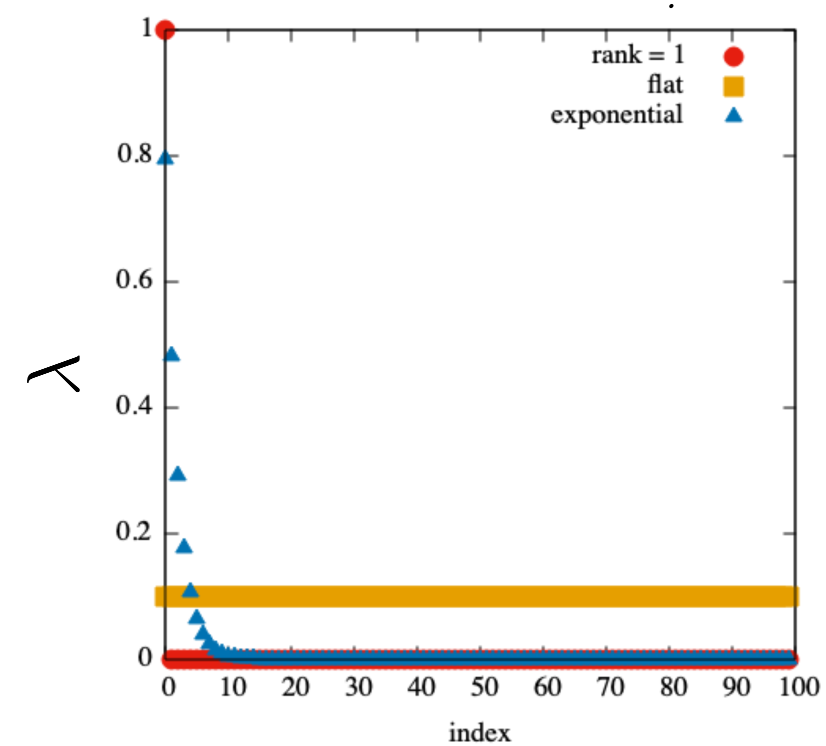
- 平なスペクトル

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \Rightarrow S = \log n$$

- 指数関数的な減少

$$\lambda_i \propto e^{-\alpha i} \Rightarrow S = 1 - \log 2\alpha \ (\alpha \ll 1, \alpha n \to \infty)$$

Normalization: $(\sum_i \lambda_i^2 = 1)$



減衰が遅いと大きなエントロピー

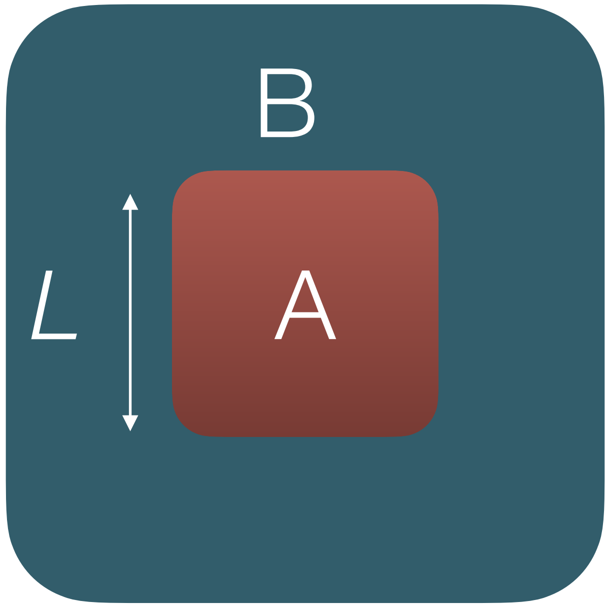
エンタングルメントエントロピーの面積則

一般の量子状態：

EE は 部分系の体積（量子ビットの数）に比例する

$$S = -\mathrm{Tr}\left(\rho_A \log \rho_A\right) \propto L^d$$

(c.f. random vector)



低エネルギーの量子状態：

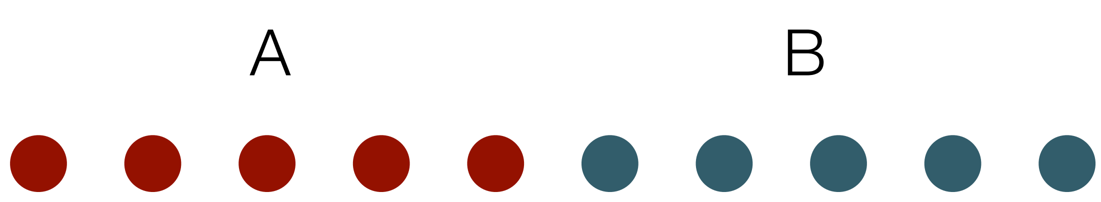
多くの場合、EEは部分系の境界面積に比例する

J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio, Rev. Mod. Phys, 277, **82** (2010)

$$S = -\mathrm{Tr}\left(\rho_A \log \rho_A\right) \propto L^{d-1}$$

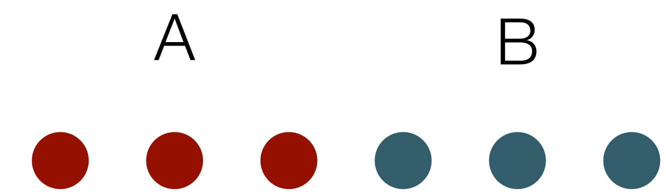
一次元的な相互作用をする量子系の場合 M.B. Hastings, J. Stat. Mech.: Theory Exp. P08024 (2007)

$$S = O(1)$$



自然界に現れる量子状態は広大なヒルベルト空間のうち
面積則を満たす小さな空間内にいる！

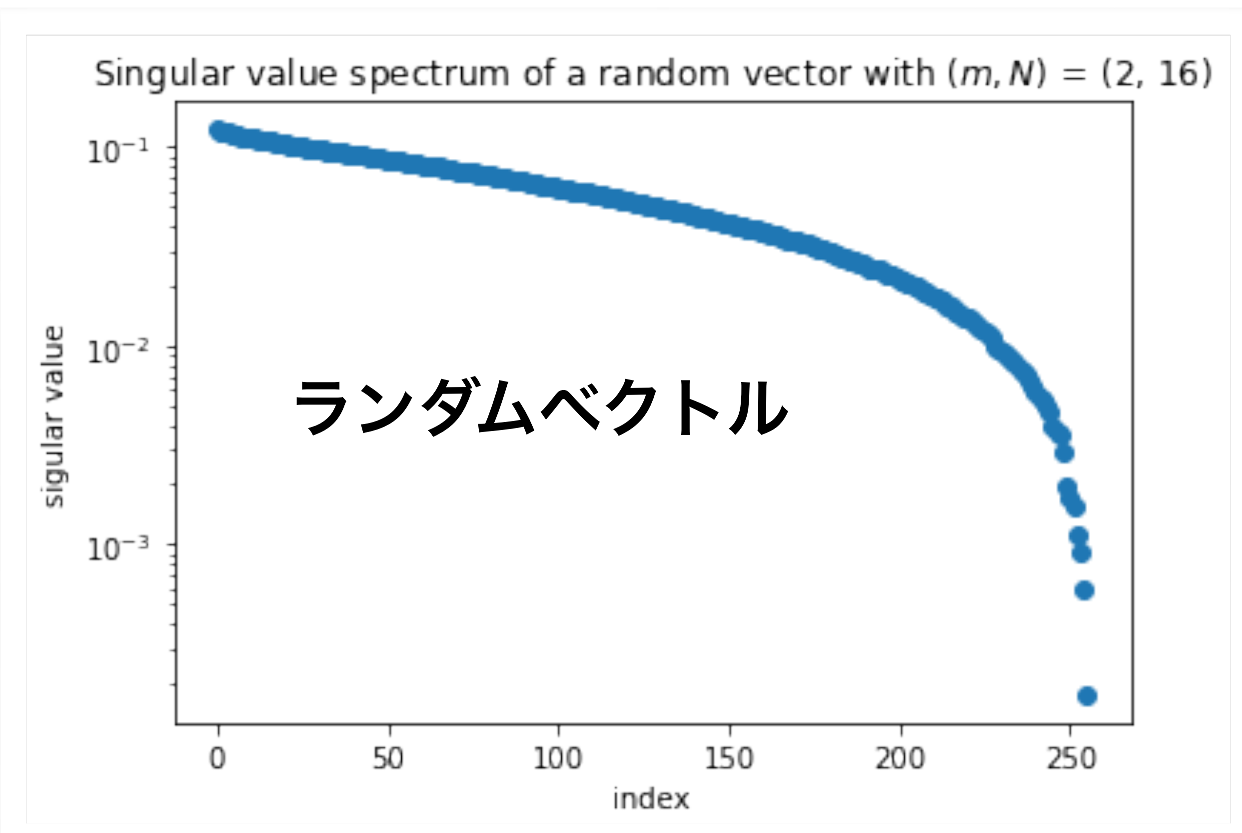
シュミット係数の振る舞い

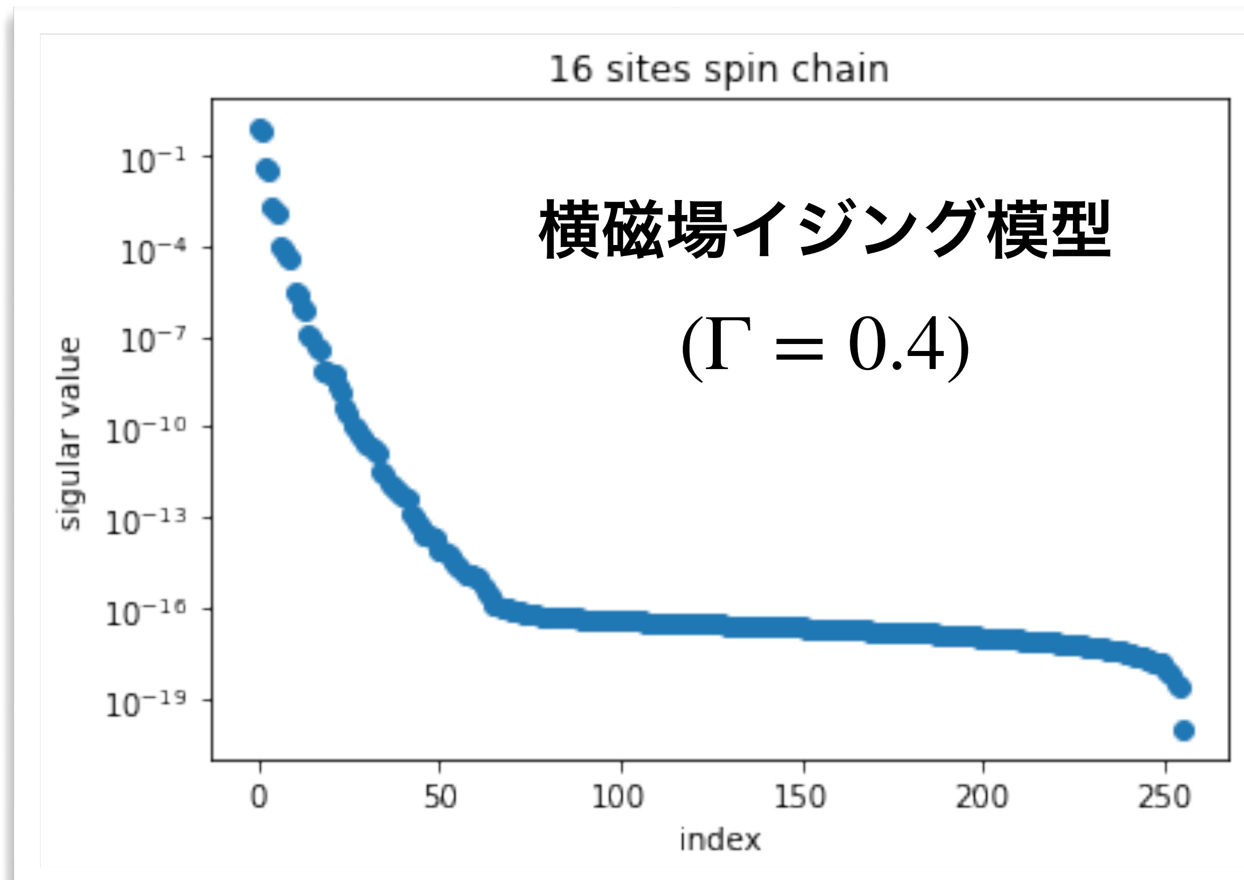


16スピン（16 量子ビット）の例

横磁場イジング模型

$$\mathcal{H} = -\sum_{i=1}^{L-1} S_{i,z}S_{i+1,z} - \Gamma\sum_{i=1}^{L} S_{i,x}$$

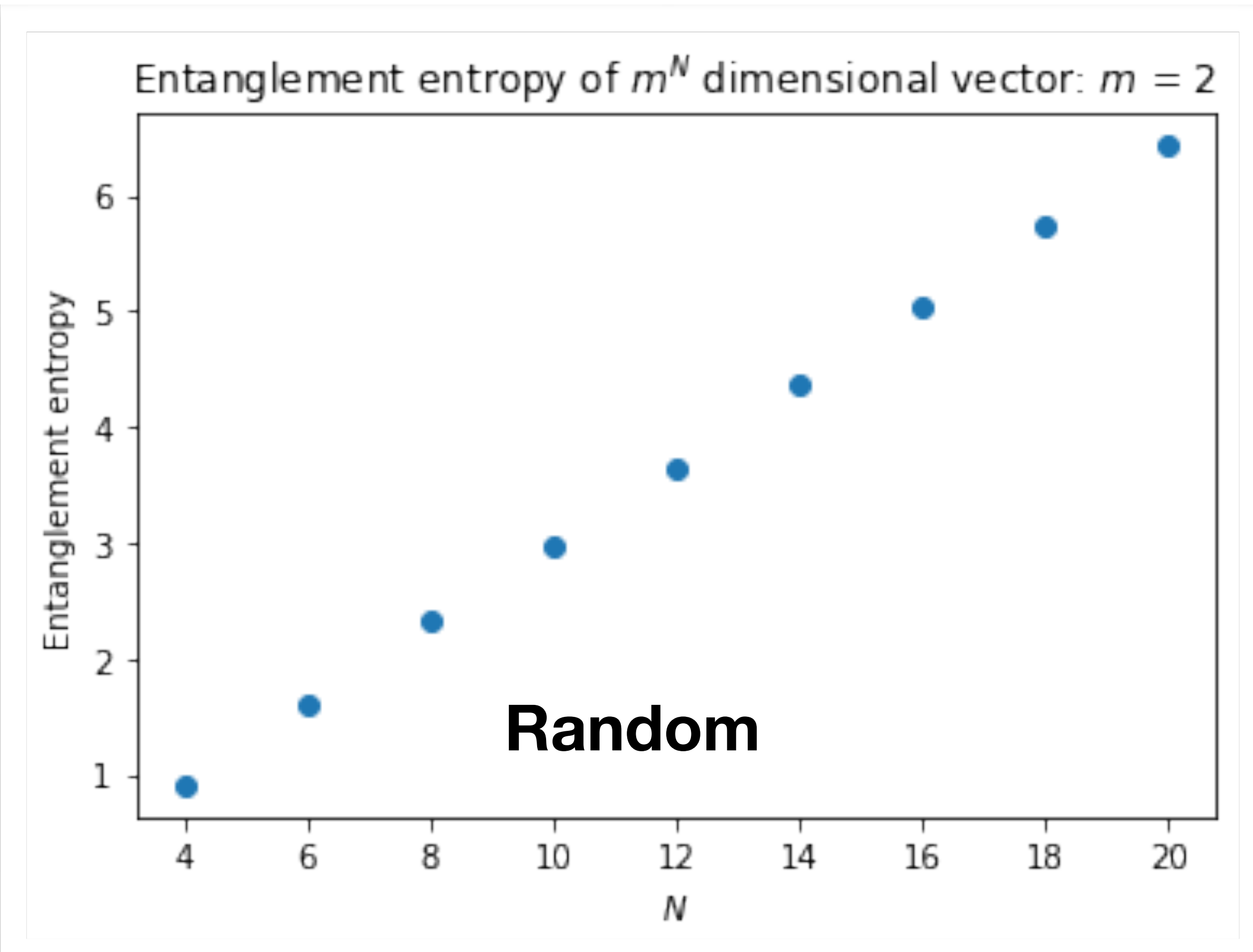


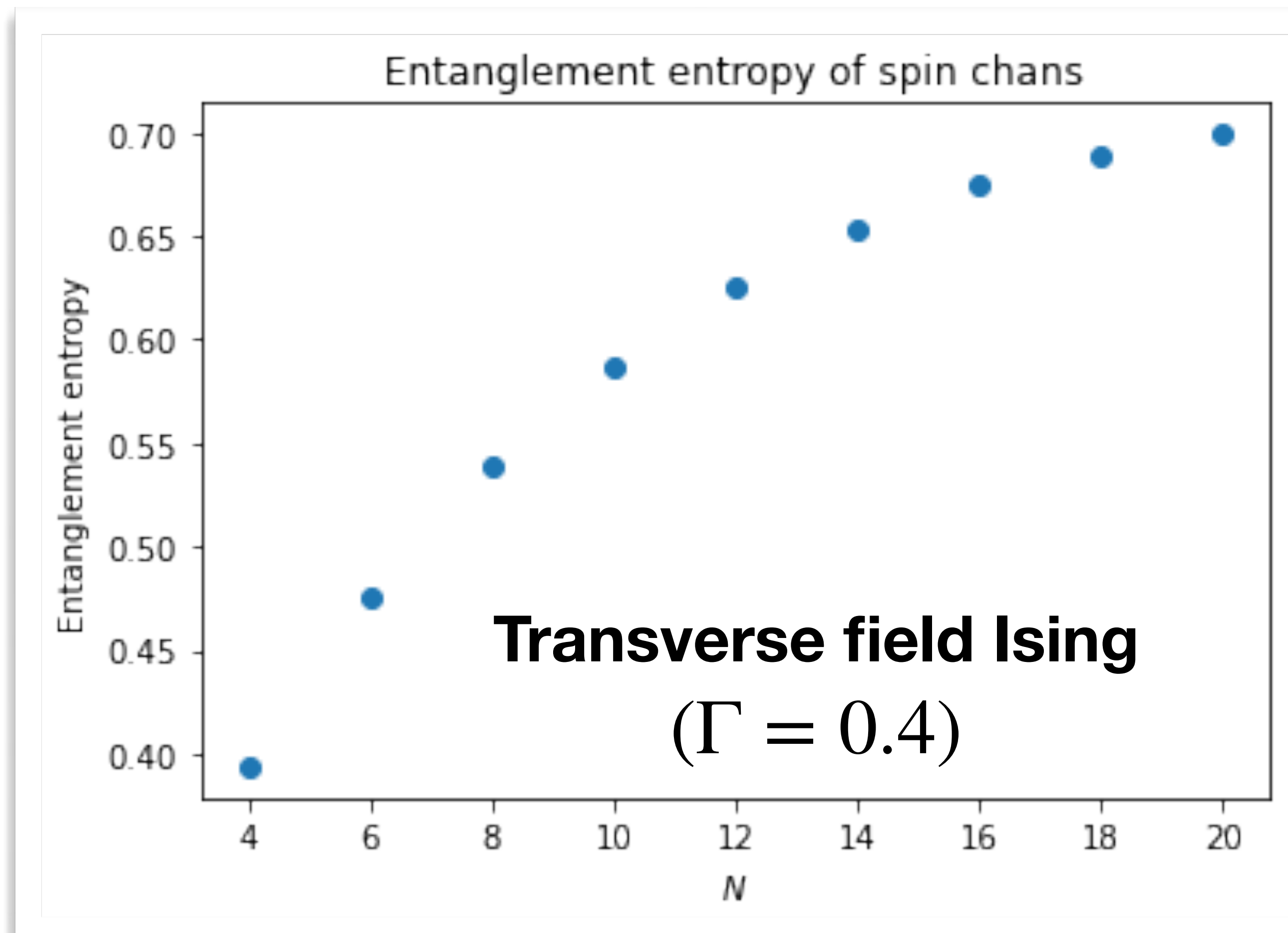


物理系の最低エネルギー状態は
シュミット係数が早く減衰

エンタングルメントエントロピーのスケーリング

$\vec{v} \in \mathbb{C}^{2^N}$





ランダムベクトル：体積則

最低エネルギー状態：面積則

コンテンツ

- はじめに
  - テンソルとテンソルネットワーク
  - 量子状態の表現と古典計算の困難
  - テンソルネットワークの基礎
- 量子状態の情報圧縮
  - テンソルネットワーク分解
  - 量子状態のエンタングルメント
- 種々のテンソルネットワークと量子エンタングルメント
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 量子物性への応用
  - 2次元無限系の計算手法
  - Kitaev模型への応用例
  - 量子コンピュータへの期待と応用例
- まとめ

テンソルネットワークによる情報圧縮

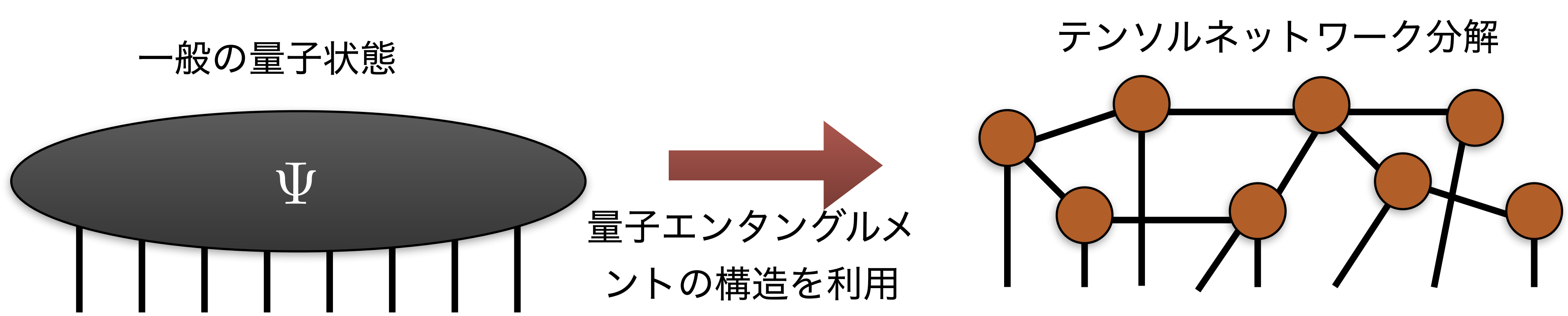
指数関数的に大きな状態空間を古典計算機で全て扱うことは不可能

実効的な次元を減らしたい

テンソルネットワーク分解：

情報のエンタングルメントに注目することで、

適切な部分空間を構成



行列積状態 (MPS)

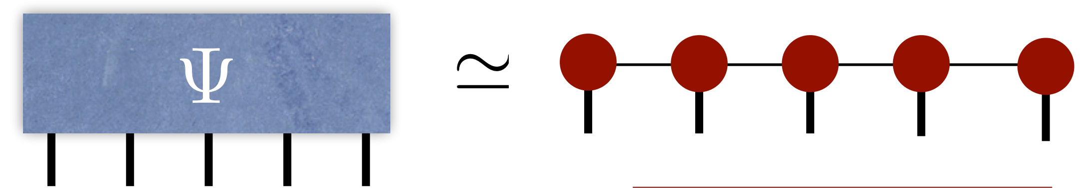
Good reviews:

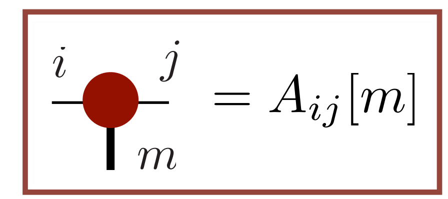
(U. Schollwöck, Annals. of Physics **326**, 96 (2011))
(R. Orús, Annals. of Physics **349**, 117 (2014))

N本足のテンソル（ベクトル）を行列の積で表現

MPS

$$\Psi_{i_1 i_2 \dots i_N} \simeq A_1[i_1]A_2[i_2]\cdots A_N[i_N]$$





$A[i]$: index i の行列

注：

- MPS は応用数理では"tensor train decomposition" とも呼ばれている

(I. V. Oseledets, SIAM J. Sci. Comput. **33**, 2295 (2011))

- 直積状態は 1×1 "行列" (スカラー) のMPSで表現できる

$$|\Psi\rangle = |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle \otimes \cdots$$

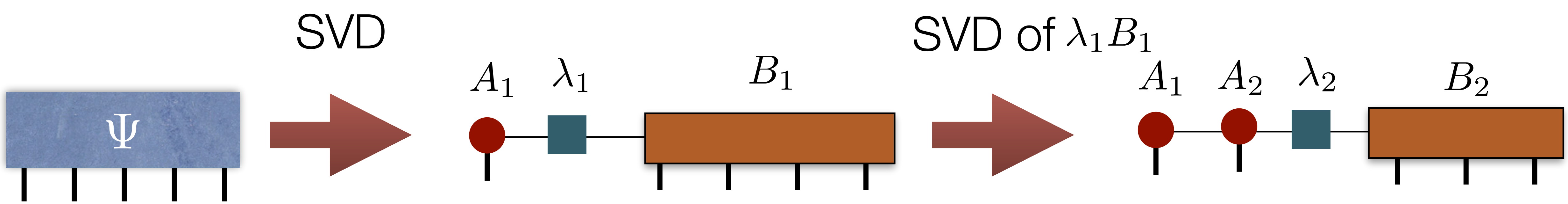
$$\Psi_{i_1 i_2 \dots i_N} = \phi_1[i_1]\phi_2[i_2]\cdots\phi_N[i_N]$$

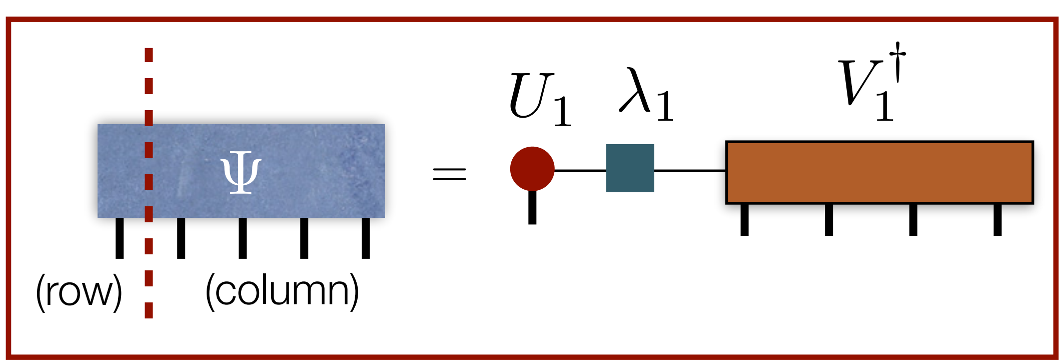
$$\phi_n[i] \equiv \langle i|\phi_i\rangle$$

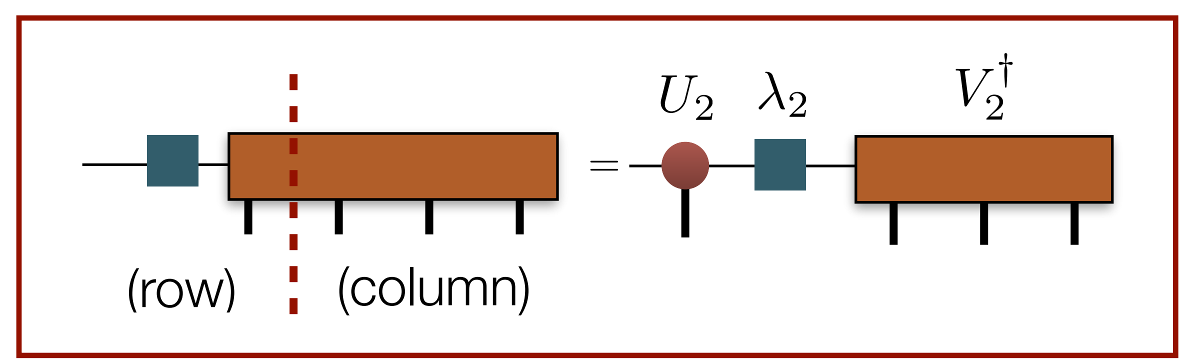
行列積状態への厳密な変換

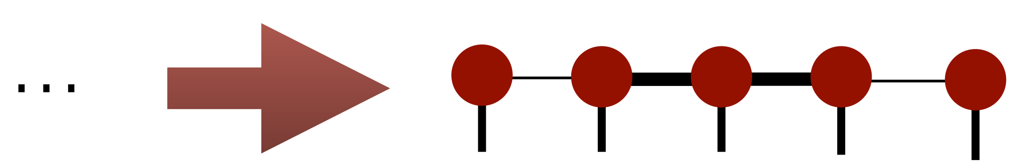
任意のテンソル（ベクトル）は特異値分解を繰り返すことで

厳密なMPS表現に常に変換できる







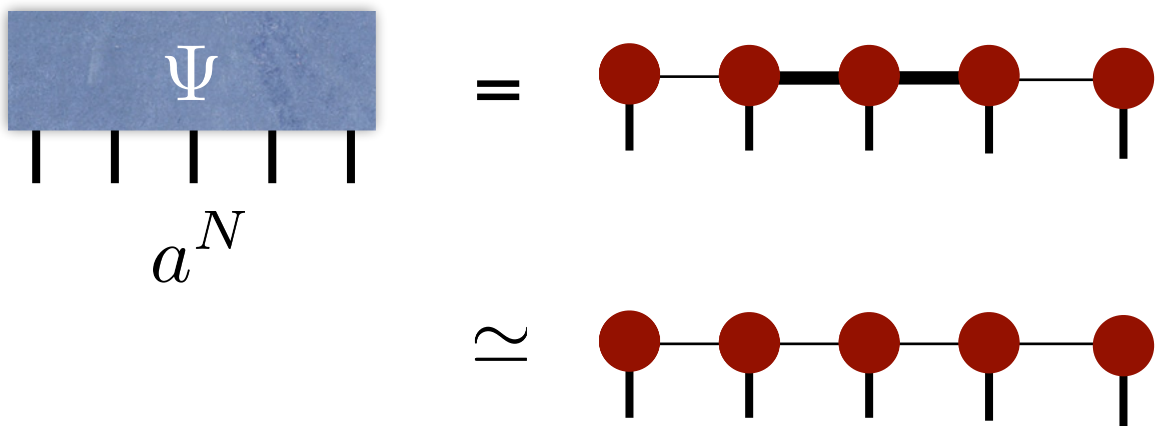


この構成では行列の次元は場所に依存

最大のボンド次元 = $a^{N/2}$

a:各足の次元

行列積状態における低ランク近似



$\boxed{\text{最大ボンド次元} = a^{N/2}}$

a^N

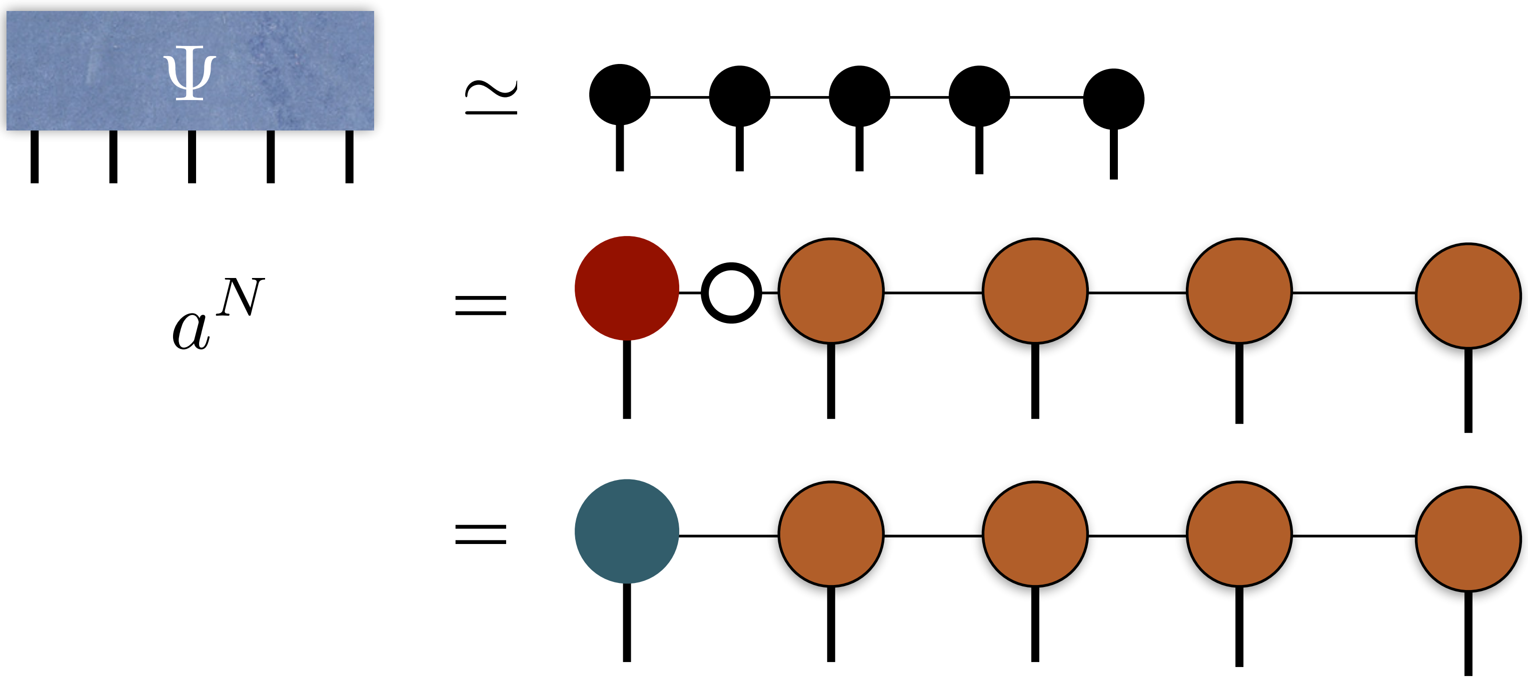
$\boxed{\text{最大ボンド次元} = \chi}$

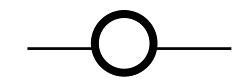
$\propto N a \chi^2$

もし、もとのテンソルがボンド次元 χ の行列積状態で精度良く近似できれば、Nの指数関数のデータ量をNの多項式にまで大幅に減らせる！

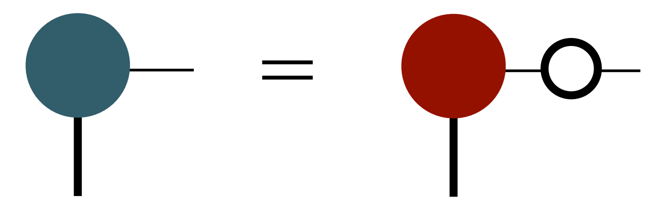
- もし、エンタングルメントエントロピーがN に依存しない（S ~ O(1)）ならば、ボンド次元 χ が N に依存しないようにできる。
- 逆に、 EEが N と共に増大する場合、（同じ近似精度を保つには）、χ もN と共に増大させる必要がある。

補足：行列積状態とカノニカル形式

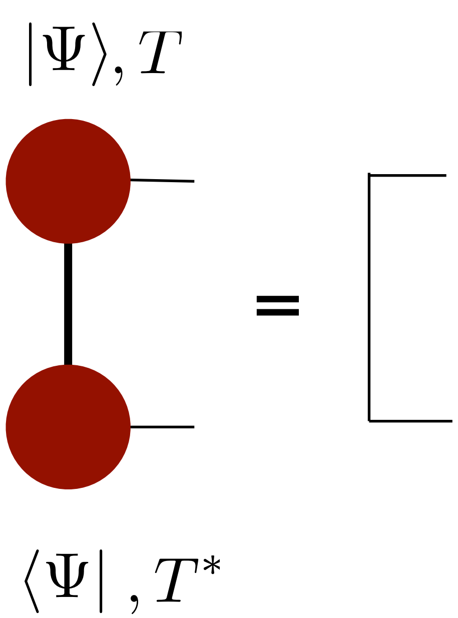




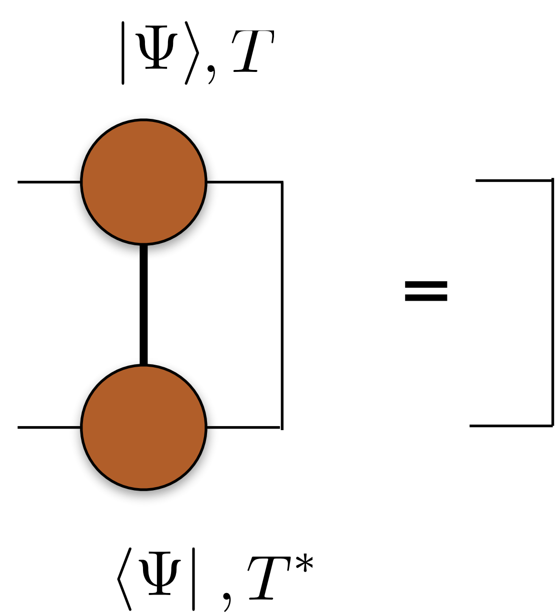
:シュミット係数に対応する
対角行列



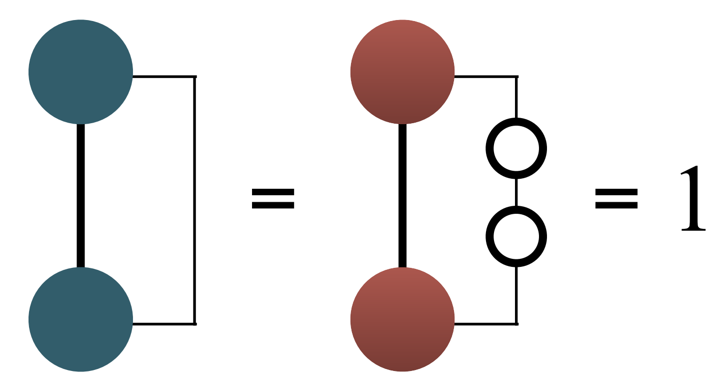
左カノニカル条件：



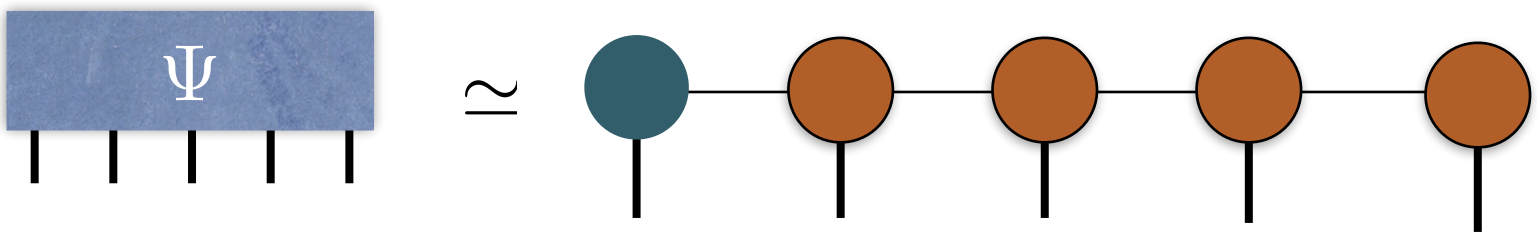
右カノニカル条件：

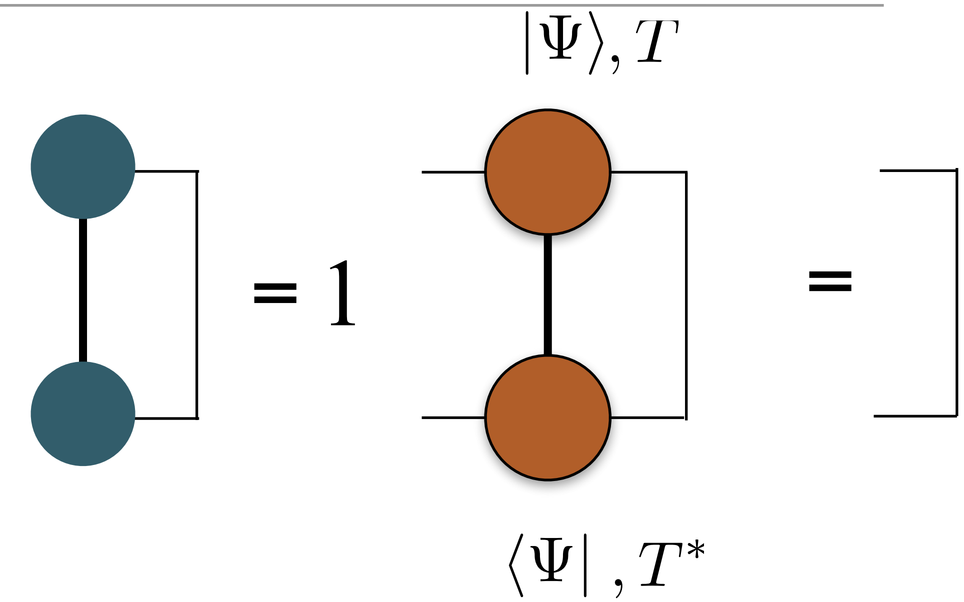


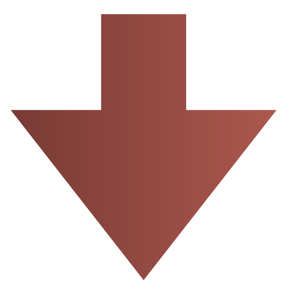
“規格化"

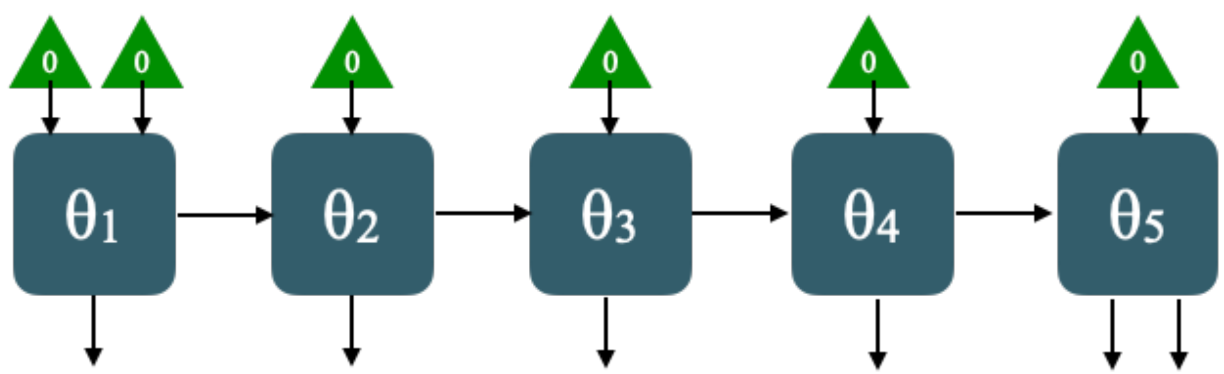


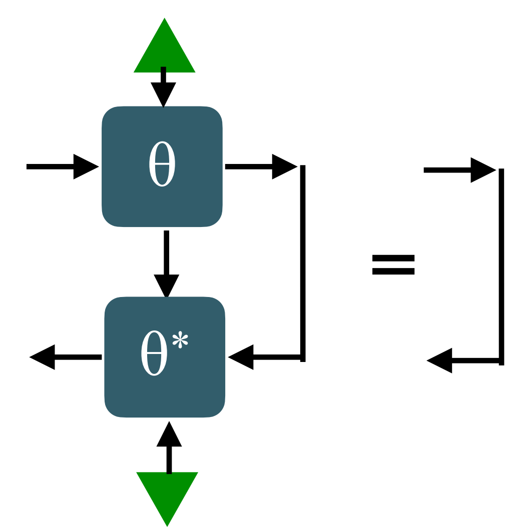
補足：行列積状態の量子回路への埋め込み





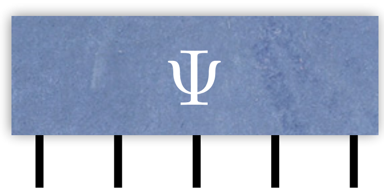




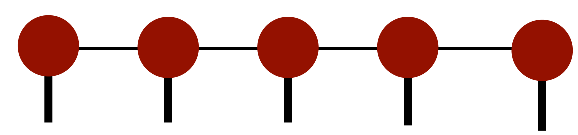


MPSは、カノニカル形式に変換することで
量子回路に “容易に”埋め込める

エンタングルメントエントロピーの上限

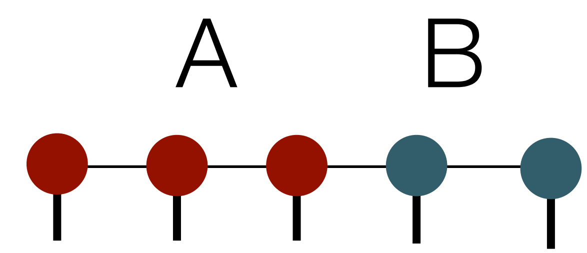


$\simeq$

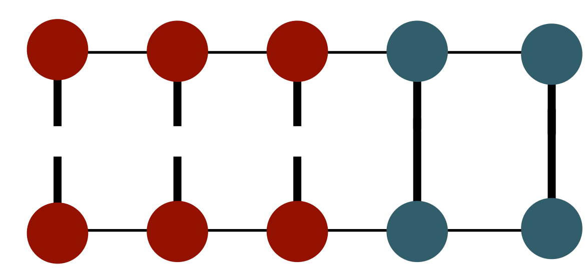


$\equiv |\tilde{\Psi}\rangle$:MPS with χ

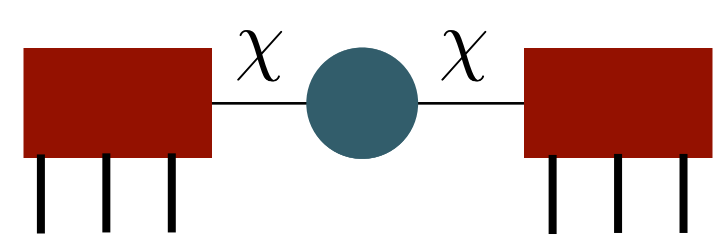
領域Aの縮約密度行列



$$\rho_A = \mathrm{Tr}_B |\tilde{\Psi}\rangle\langle\tilde{\Psi}| =$$



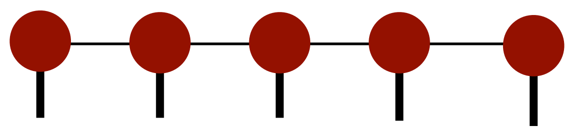
★ ρ_Aの構造：



$$\boxed{\begin{array}{l} \mathrm{rank}\ \rho_A \leq \chi \\ S_A = -\mathrm{Tr}\ \rho_A \log \rho_A \leq \log \chi \end{array}}$$

MPS表現のために必要なボンド次元

$$\boxed{S_A = -\mathrm{Tr}\,\rho_A \log \rho_A \leq \log \chi}$$



MPSでは、EEの上限は長さ（量子ビットの数）に依存しない

MPSの長さ $\Leftrightarrow$ 状態ベクトルの次元

N $\qquad$ a^N

元の量子状態のEE	MPS表現に必要なボンド次元
$S_A = O(1)$	$\chi = O(1)$
$S_A = O(\log N)$	$\chi = O(N^\alpha)$
$S_A = O(N^\alpha)$	$\chi = O(c^{N^\alpha})$

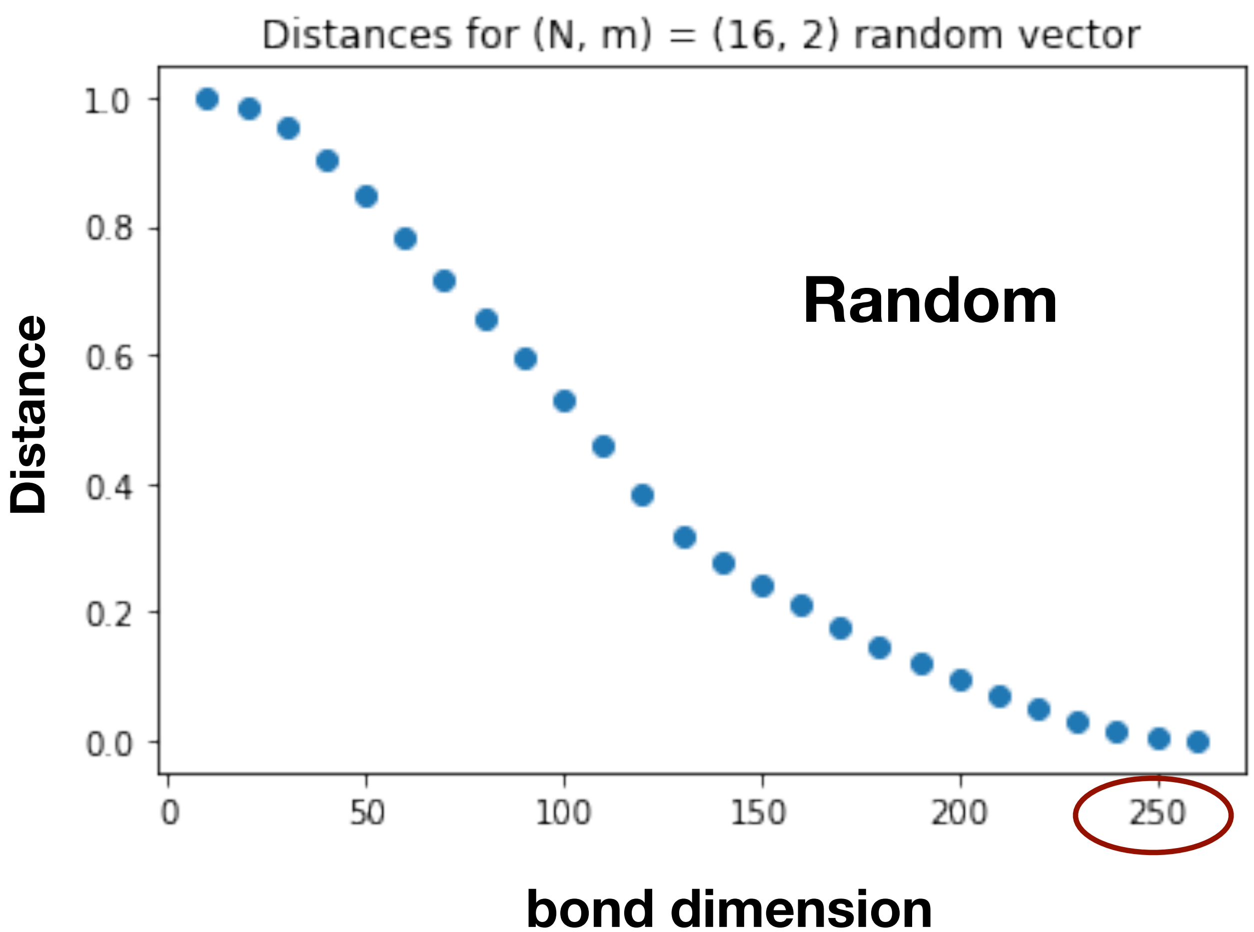
$(\alpha \leq 1)$

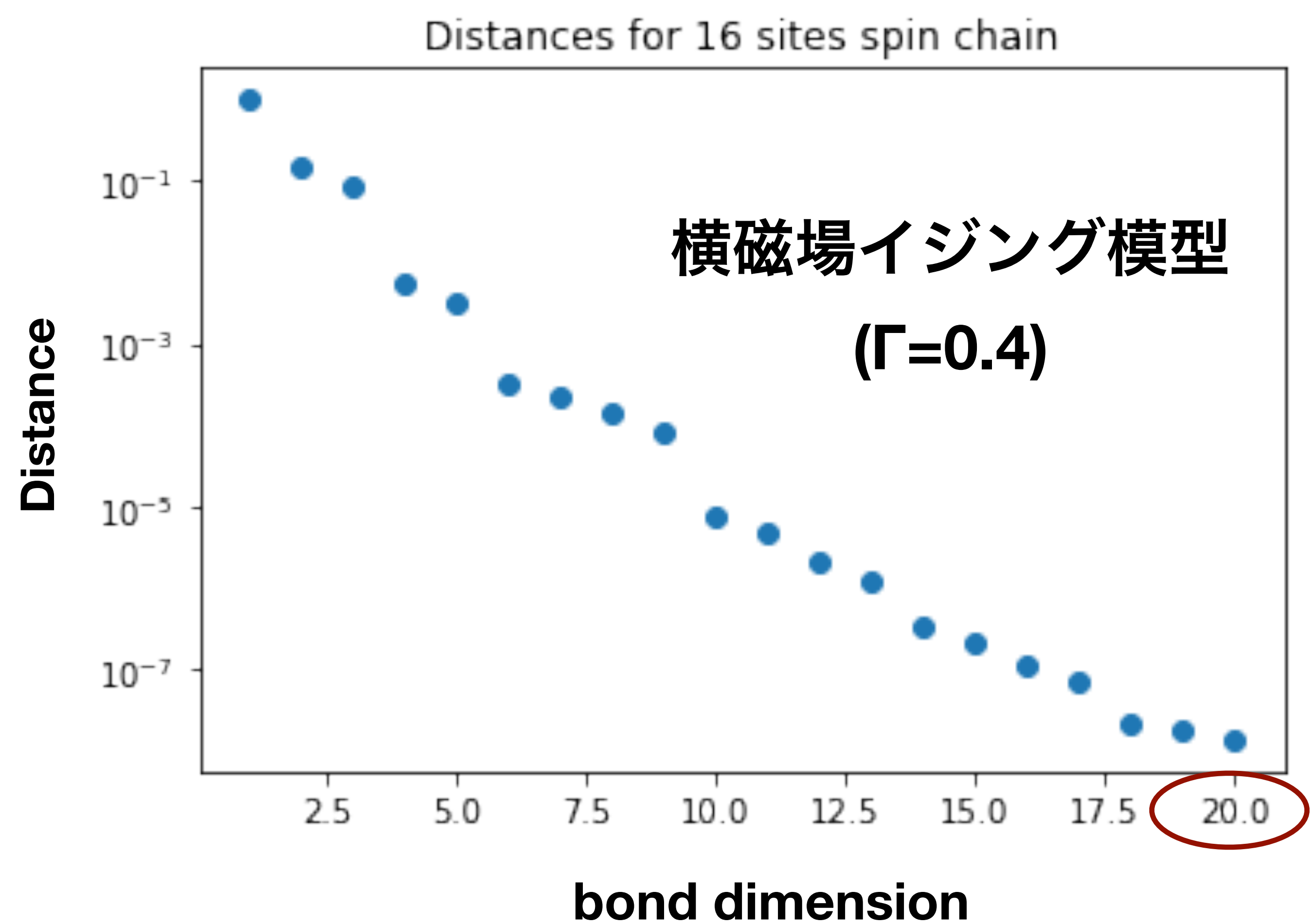
MPSの近似精度

16 量子ビットの場合

元の量子状態との距離： $\| |\Psi\rangle - |\Psi_{\mathrm{MPS}}\rangle \|$

$$\mathcal{H} = -\sum_{i=1}^{L-1} S_{i,z}S_{i+1,z} - \Gamma \sum_{i=1}^{L} S_{i,x}$$





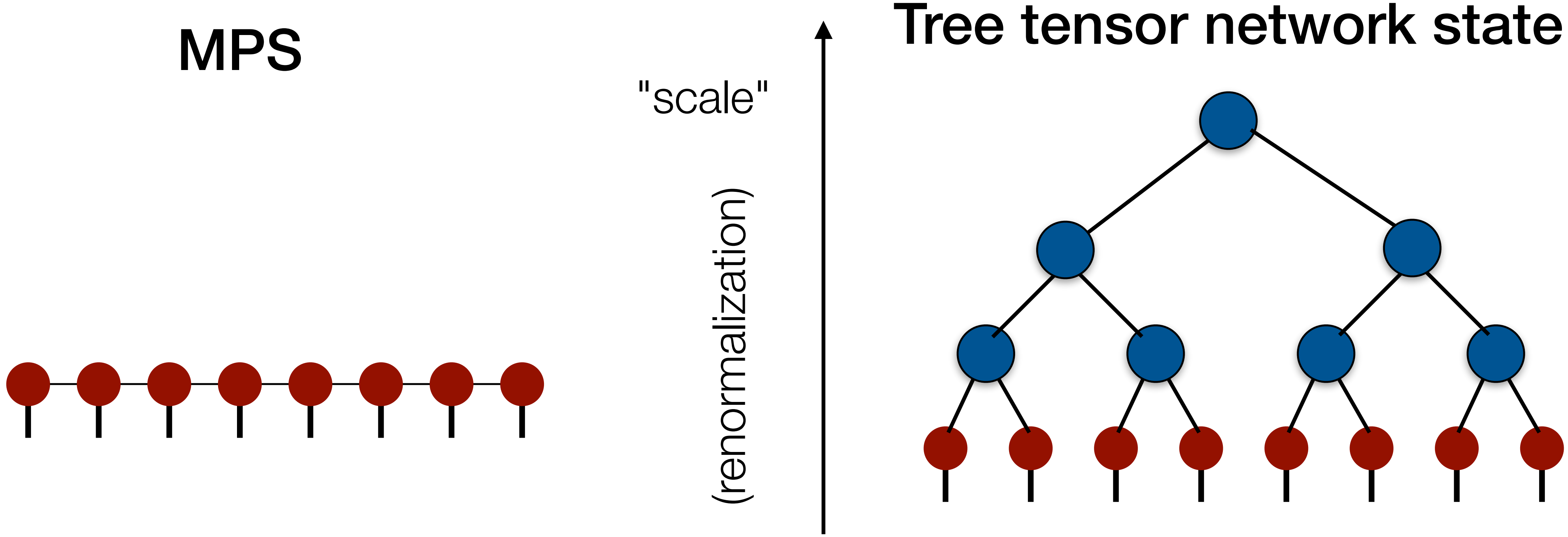
階層構造を持つテンソルネットワーク

物理系の量子臨界点など

- 相関長が発散し特徴的な長さスケールがなくなる（スケール不変性）
- 一次元の場合EEが $S = \log N$となり量子ビット数に依存する

スケール不変性を示す単純なテンソルネットワーク

Tree tensor network state (TTN)



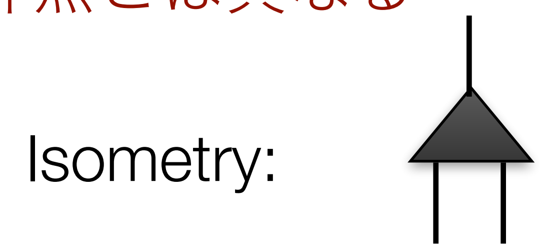
TTNのエンタングルメントエントロピー

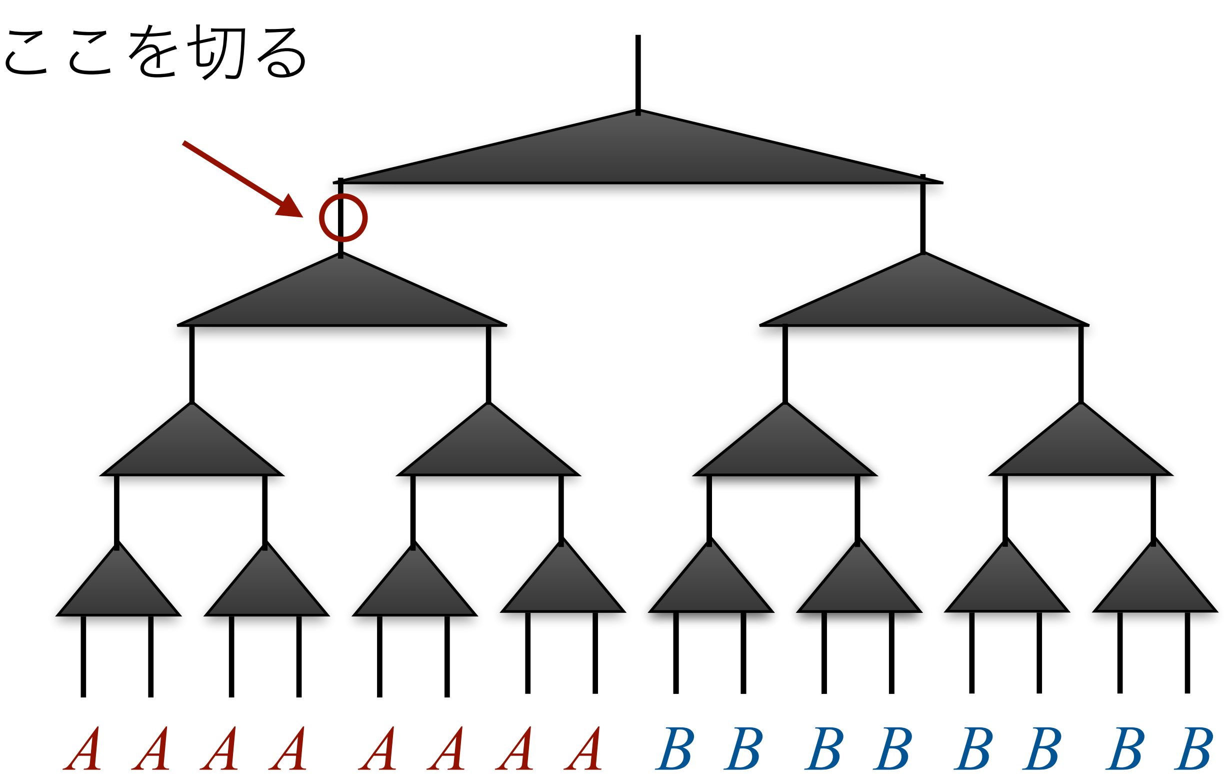
木構造のため、二つの領域はただ一つのボンドでのみでつながる

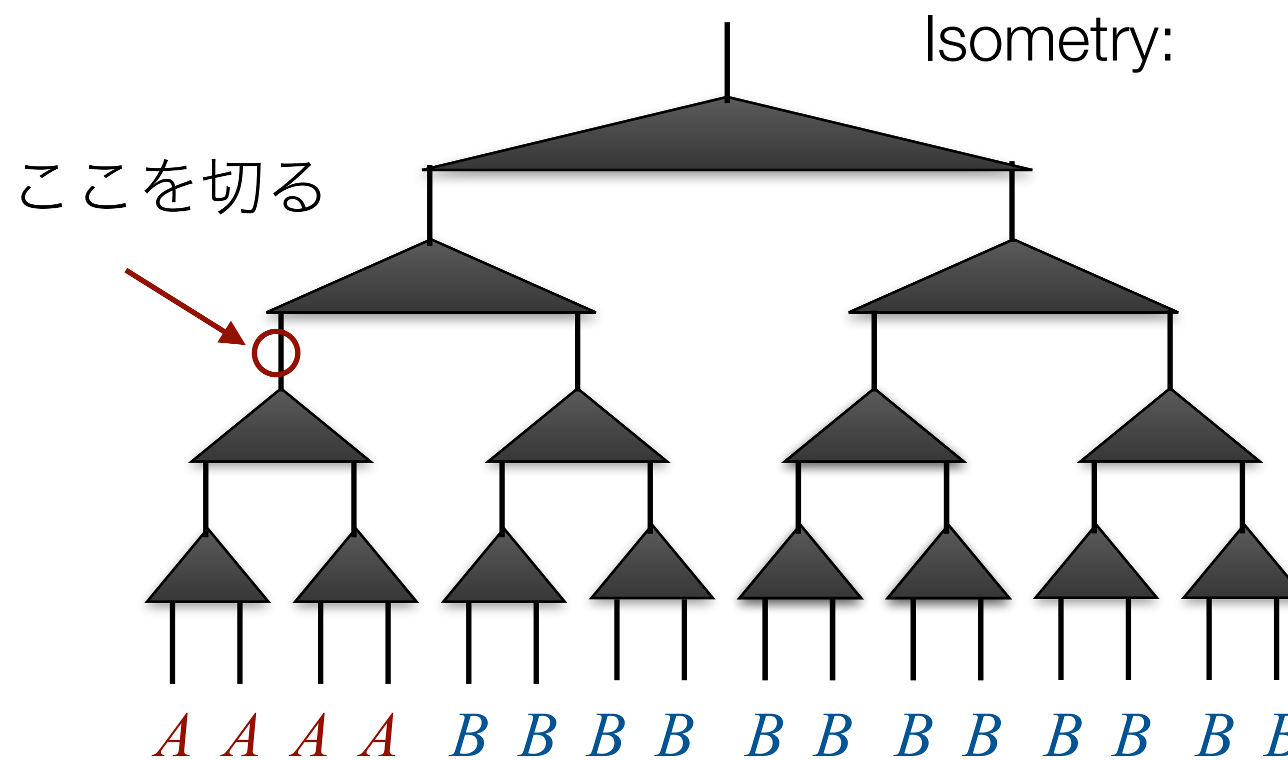
TTNのエンタングルメントエントロピーはMPSと同様のスケーリング

$$\boxed{S_A = -\mathrm{Tr}\ \rho_A \log \rho_A \leq \log \chi}$$

TTNはスケール不変な振る舞いを表せるが、その量子相関は量子臨界点とは異なる





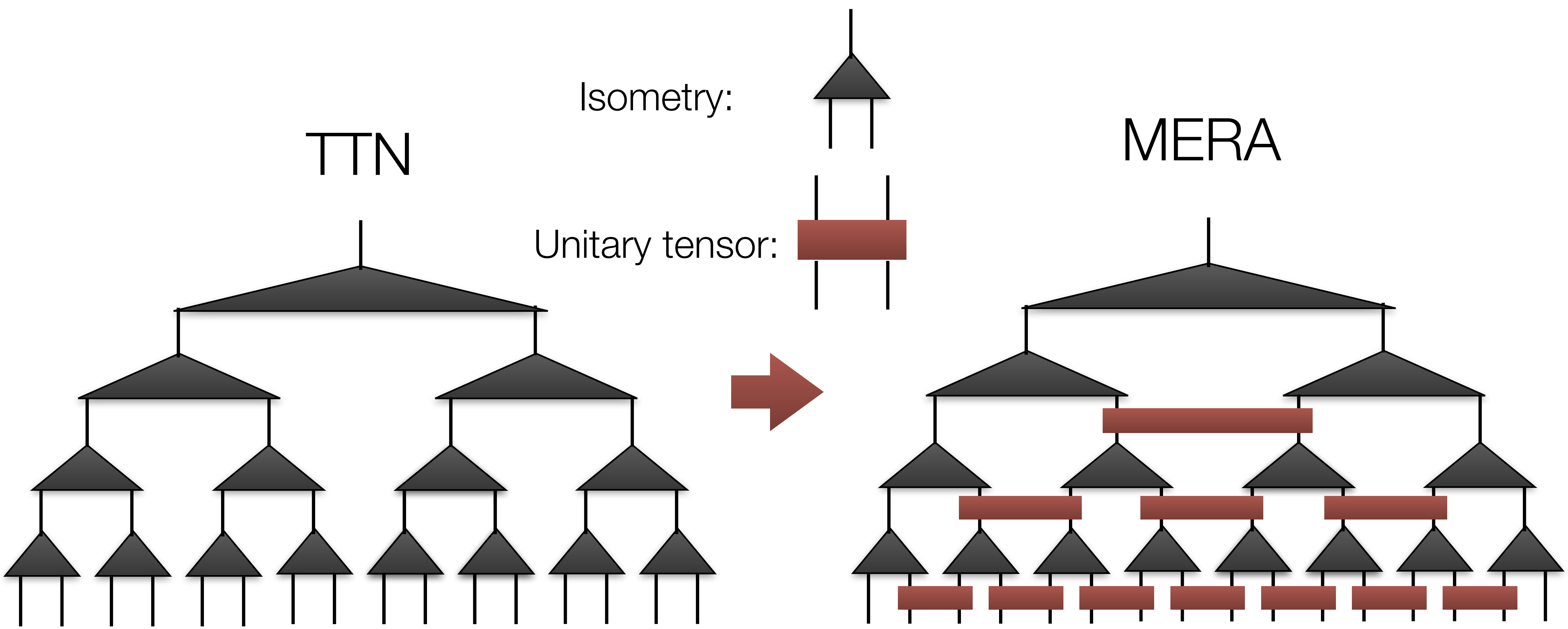


MERA

(G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **99**, 220405 (2007))
(G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **101**, 110501 (2008))

Multi-scale Entanglement Renormalization Ansatz (**MERA**)

アイソメトリーの前に、ユニタリ変換を挿入する



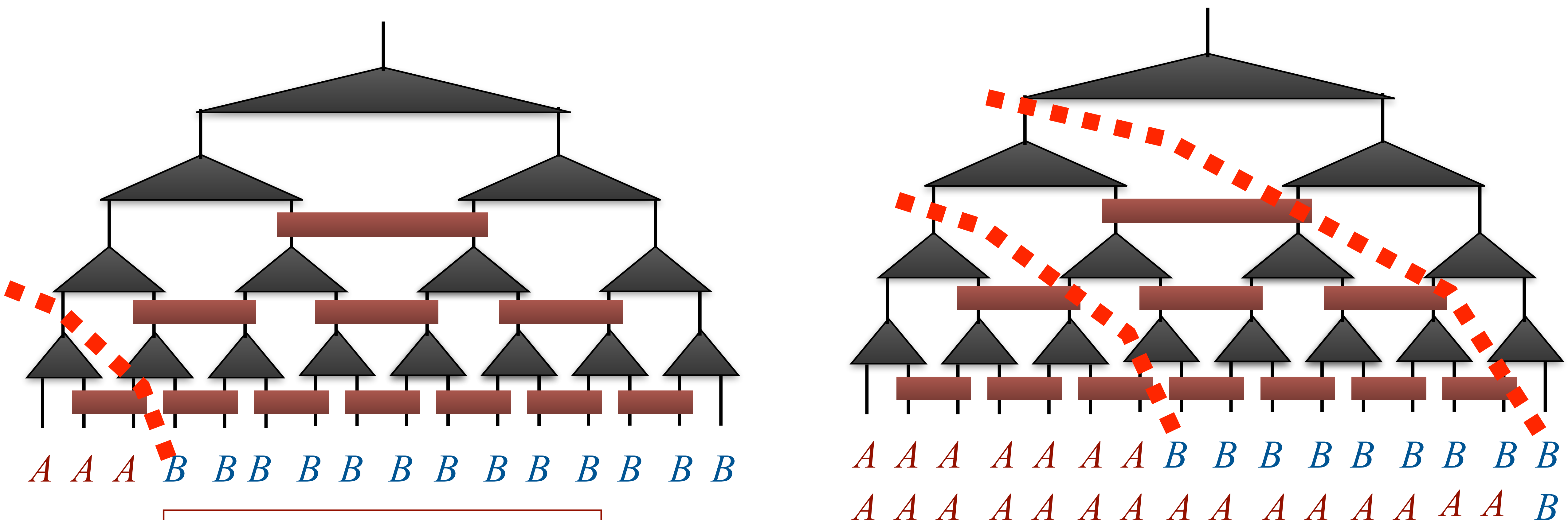
MERAのエンタングルメントエントロピー

新しく挿入したユニタリ変換の影響で、
二つの領域をつなぐボンドの数が対数的に増大

$N_c(N)$:N-site 領域での最小の切断ボンド数

$$\text{rank}\ \rho_A \leq \chi^{N_c(N)} \sim \chi^{\log N}$$
$$S_A = -\text{Tr}\ \rho_A \log \rho_A \leq (\log \chi) \log N$$

$$N = 2^{N_c} - 1$$
$$N_c \sim \log_2 N$$



最小の切断ボンド数 = 2

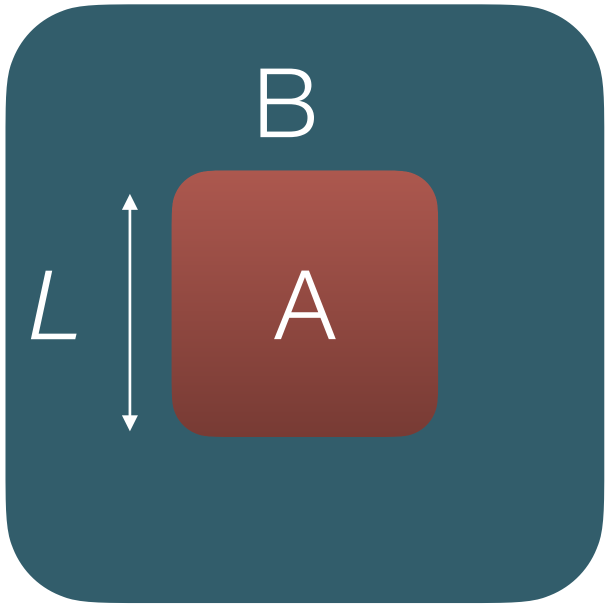
最小の切断ボンド数 = 3

最小の切断ボンド数 = 4

二次元以上の場合の面積則

EEの面積則

$$S = -\mathrm{Tr}\left(\rho_A \log \rho_A\right) \propto L^{d-1}$$



d =1 （一次元系）ではMPSが面積則を満たす

Q. MPSを単純に$d > 1$ に拡張できる？

A. テンソル積状態 Tensor Product State (TPS)!

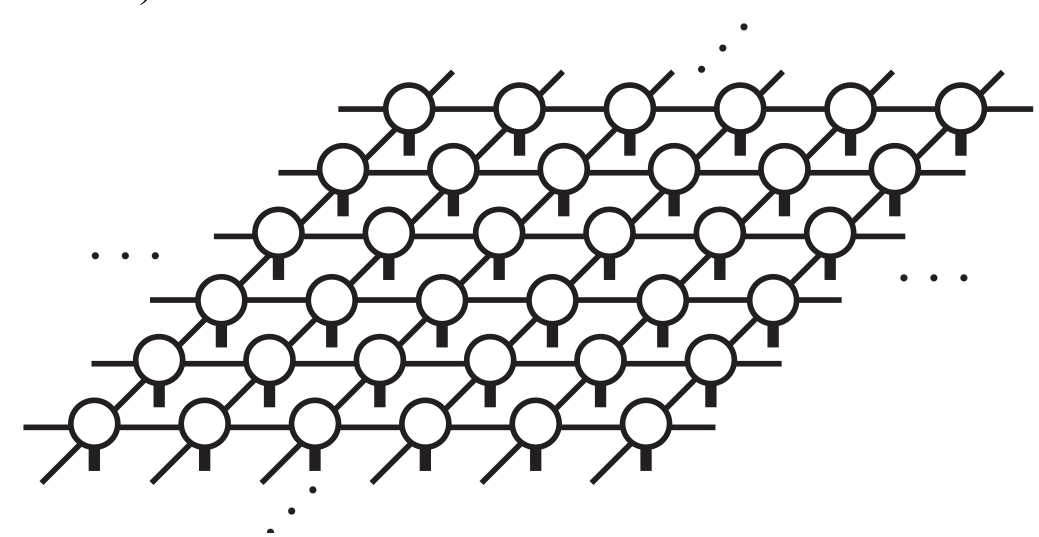
テンソル積状態（TPS）：面積則を満たすTNS

TPS (Tensor Product State) (AKLT, T. Nishino, K. Okunishi, …)

PEPS (Projected Entangled-Pair State)

(F. Verstraete and J. Cirac, arXiv:cond-mat/0407066)

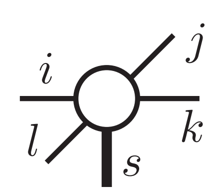
例：2次元正方格子のTPS



4+1 階のテンソルがが敷き詰められたネットワーク

局所自由度：*s*

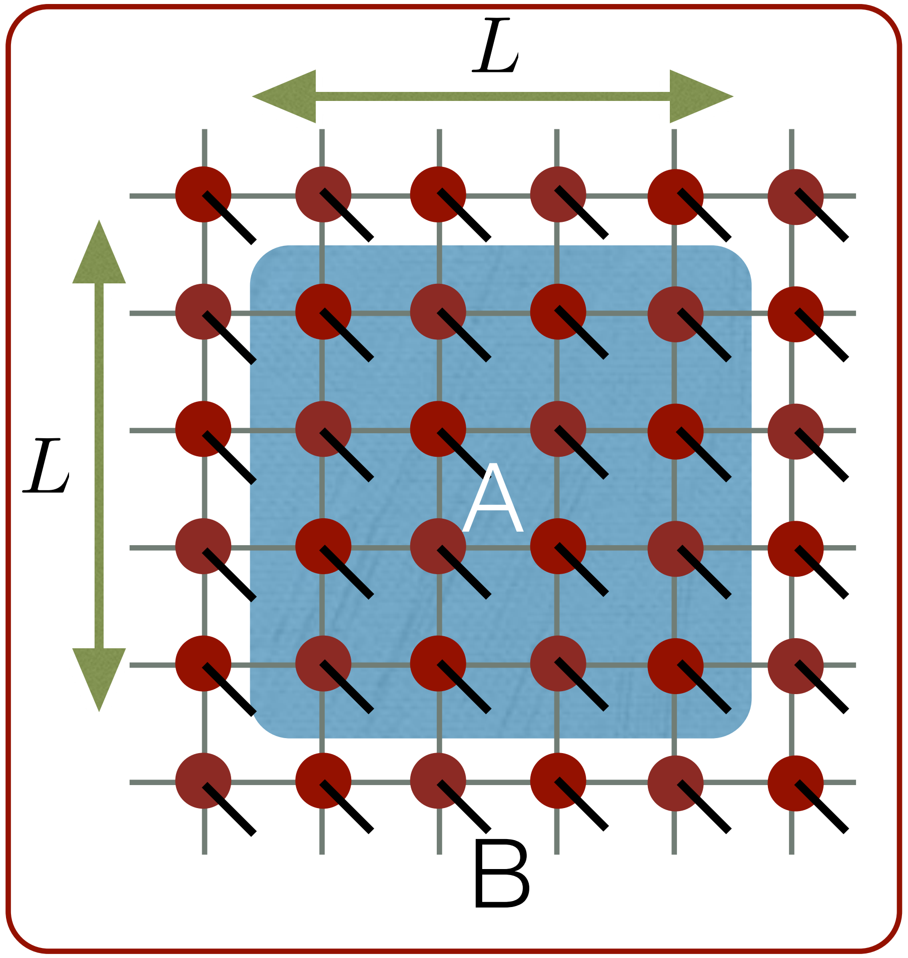
Virtual自由度：*i, j, k, l*

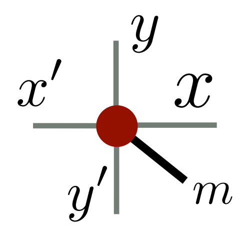
$T_{ijkl}[s] =$ 

各インデックスの次元＝**ボンド次元（*D*）**

変分波動関数としての精度に関係するパラメタ　**（*D*→∞で厳密に）**

TPS (PEPS)のエンタングルメントエントロピー





ボンド次元 = *D*

領域 A と B をつなぐボンドの数

$N_c(L) = 4L$ （正方格子）

$N_c(L) = 2dL^{d-1}$ (*d* 次元の超立方格子)

$$\mathrm{rank}\ \rho_A \le D^{N_c(L)} \sim D^{2dL^{d-1}}$$

$$S_A = -\mathrm{Tr}\ \rho_A \log \rho_A \le 2dL^{d-1} \log D$$

TPS は面積則を満たすことができる!

TPSを用いることで高次元の量子多体状態を効率的に近似できる

MPSとTPSの違い

テンソルネットワークの縮約コスト

d 次元の超立法格子： $N = L^d$

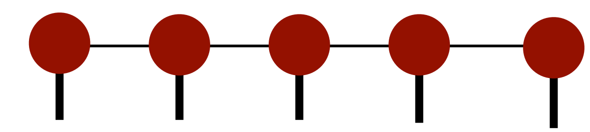
MPS: $O(N)$

TPS: $O(e^{L^{d-1}})$

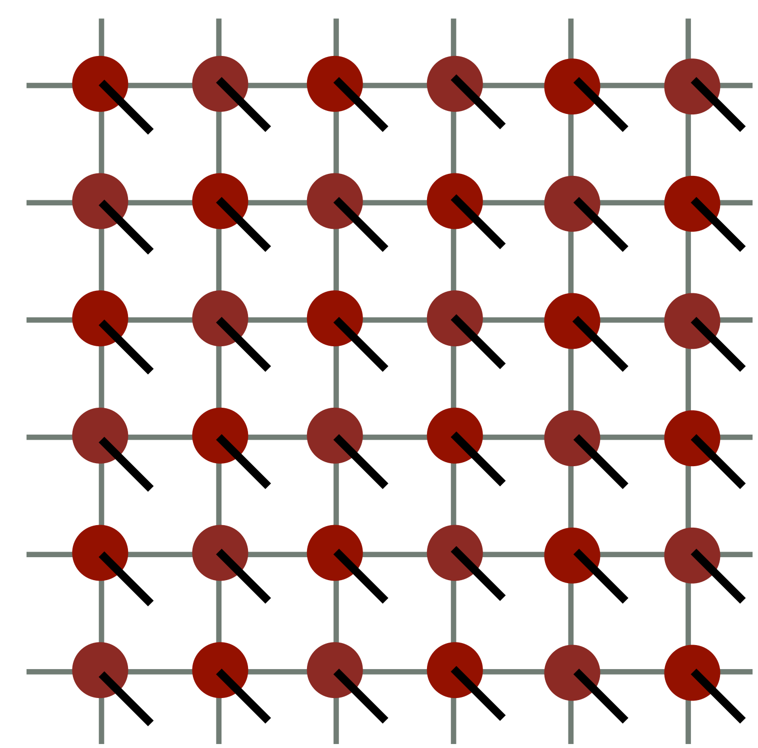
d > 1 では仮にTPS表現が得られたとしても、
テンソルネットワークを厳密に縮約して
期待値などを計算することは不可能

TPSの計算では、通常
は近似的な縮約を行う

MPS

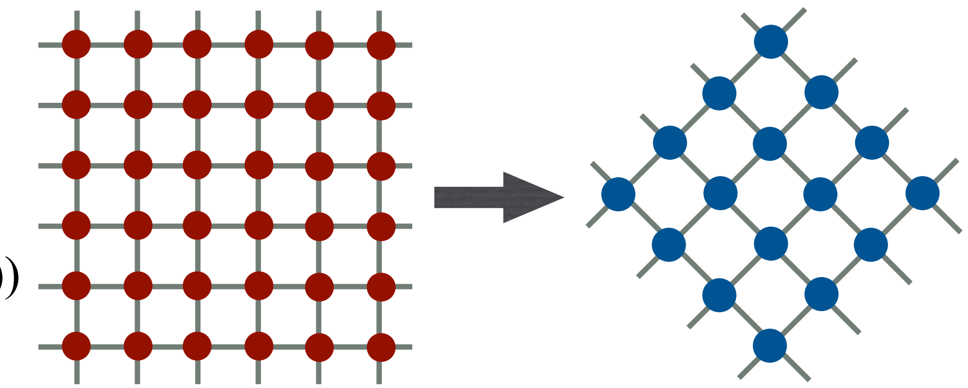


TPS
(PEPS)

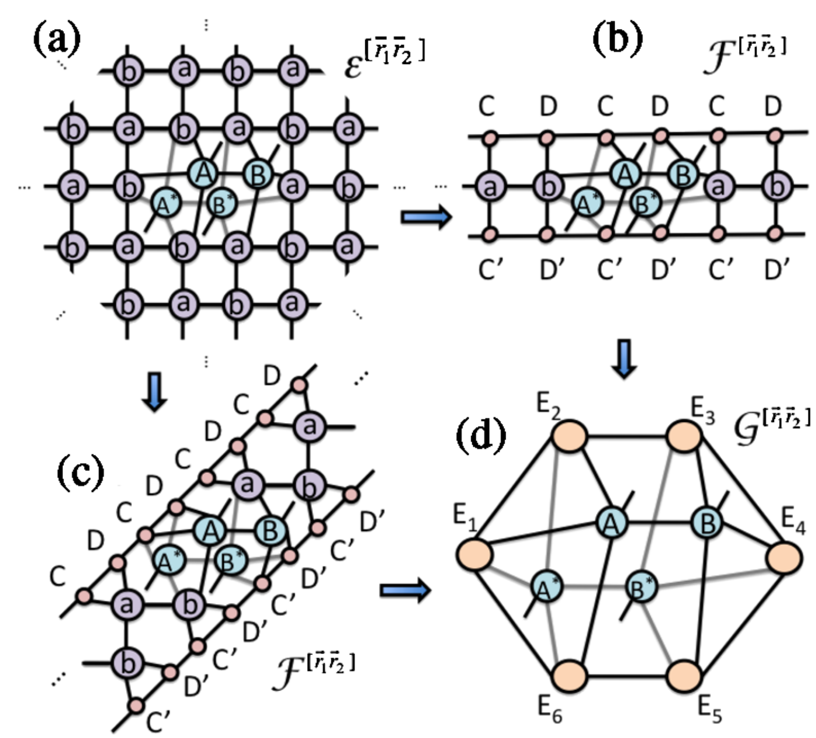


種々の近似的なTPSの縮約方法

- テンソル繰り込み群
  - TRG, HOTRG, SRG, TNR, loop-TNR, ...
- 境界MPS法
  - (Y. Hieida *et al* (1999) , J. Jordan *et al*, Phys. Rev. Lett. **101**, 250602 (2008))



- 角転送行列法
  - T. Nishino and K. Okunishi, JPSJ **65**, 891 (1996), R. Orús *et al*, Phys. Rev. B **80**, 094403 (2009).
- 単層での縮約法
  - bMPS: H. J. Liao *et al,* PRL **118**, 137202 (2017), Z. Y. Xie *et al*,PRB **96**, 045128 (2017).
  - CTM: Chih-Yuan Lee *et al*, PRB **98**, 224414 (2018) .
- 平均場環境法
  - S. Jharomi and R. Orús, PRB **99**, 195105 (2019).

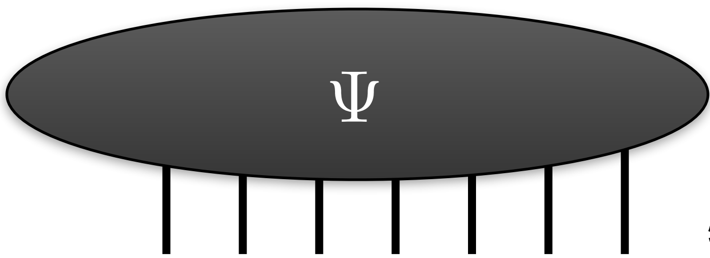


コンテンツ

- はじめに
  - テンソルとテンソルネットワーク
  - 量子状態の表現と古典計算の困難
  - テンソルネットワークの基礎
- 量子状態の情報圧縮
  - テンソルネットワーク分解
  - 量子状態のエンタングルメント
- 種々のテンソルネットワークと量子エンタングルメント
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 量子物性への応用
  - 2次元無限系の計算手法
  - Kitaev模型への応用例
  - 量子コンピュータへの期待と応用例
- まとめ

量子系でのテンソルネットワークの利用

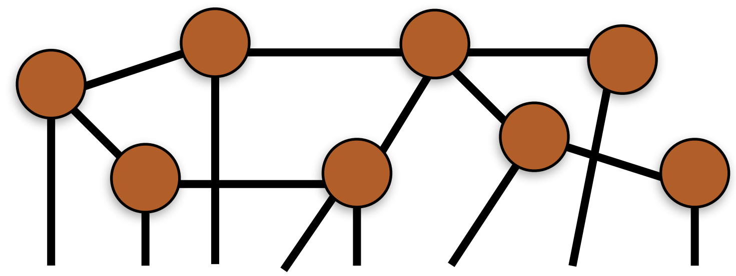
量子多体状態



~e^Nの独立要素

量子相関の特徴を利用した近似

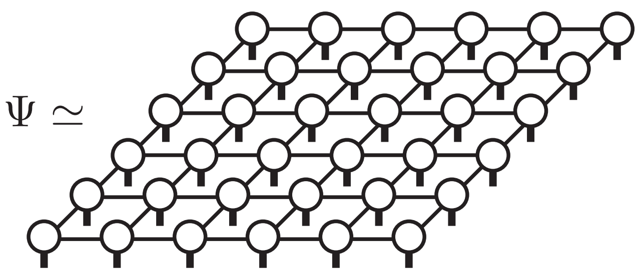
テンソルネットワーク分解



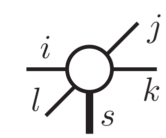
~$O(N)$の独立要素

PEPS, TPS (for 2d system)

$\Psi \simeq$



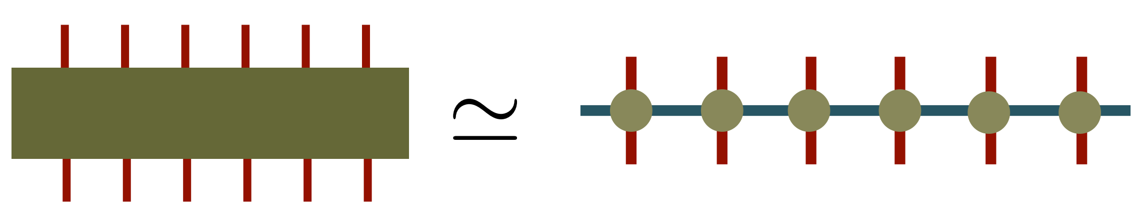
$T_{ijkl}[s] =$



適切なテンソルネットワーク表現を用いると量子ビット数Nに対して、
多項式の計算量で量子多体問題を高精度に計算できる場合がある

- 低エネルギー状態の計算
  - 変分法により固有値問題を解く
- 量子ダイナミクス
  - 量子エンタングルメントが大きくない範囲（短時間、浅い量子回路…）
- 同じ枠組みで、混合状態も取り扱える

$\rho(\beta) =$



量子系以外でのテンソルネットワークの利用

テンソルネットワーク分解のターゲット

局所空間の積の構造を持つベクトル空間（テンソル）

$\vec{v} \in \mathbb{C}^M$ $\qquad$ $\mathbb{C}^M = \mathbb{C}^a \otimes \mathbb{C}^a \otimes \cdots \mathbb{C}^a$

$M \sim a^N$

*局所的な空間の次元は異なっても良い

このような構造を持つものは量子状態以外にもある

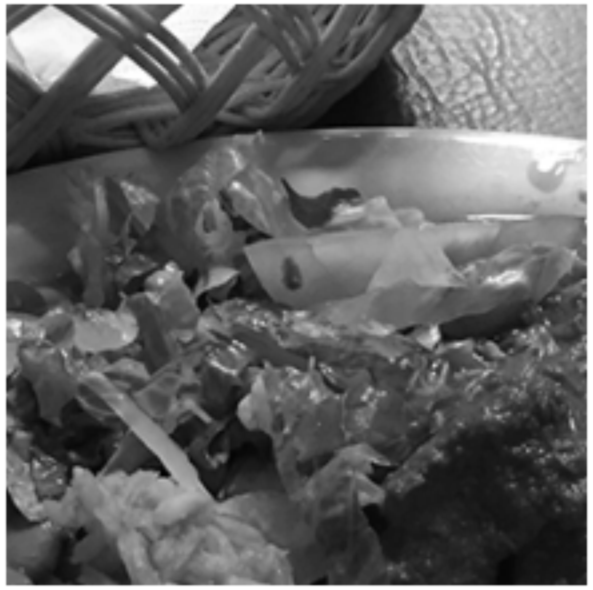
画像データ：

256 × 256 ピクセル → 2^{16} 次元のベクトル

→ 16-本足のテンソル (a = 2)

256=2^8

256=2^8



確率分布：

例：イジングモデル

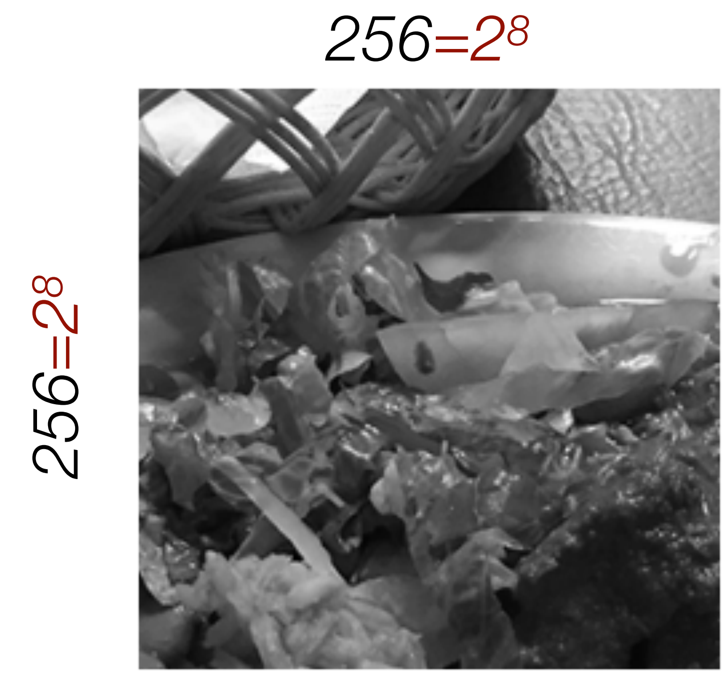
$$P(\{S_i\}) = \frac{e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j}}{Z}$$

→ 2^N ベクトル →N-本足のテンソル (a = 2)

画像圧縮への適用例

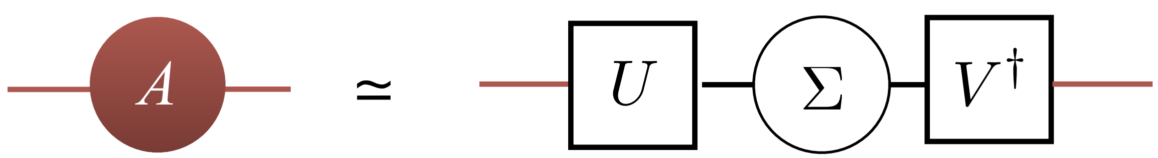
例：画像データの圧縮

256 × *256* ピクセルの画像

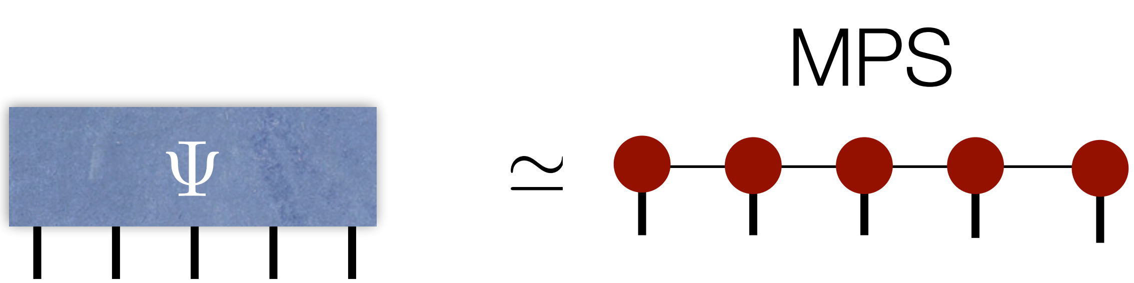


*2*種類のデータ構造

1. *256* × *256* の行列（画像見たまま）
   - 単純な特異値分解を適用可能

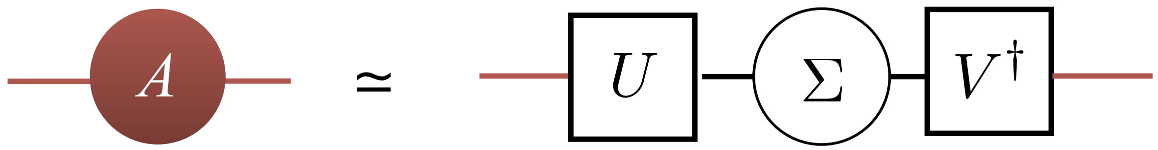


2. *2* × *2* × ...× *2*の*16*本足のテンソル
   - *MPS*による近似を適用できる形
   - どのように変形するか、足を並べるのかの自由度がある



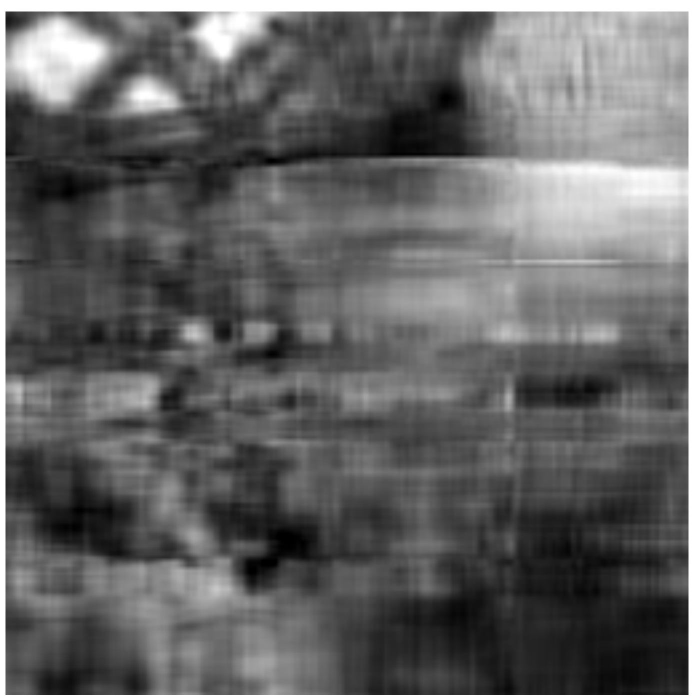
特異値分解による画像の圧縮

1. 256×256 の行列（画像見たまま）



近似精度：$\Delta \equiv \|A - \tilde{A}\|/\|A\|$

データ量：$D \equiv 256 \times \chi + \chi \times 256 + \chi = 513\chi$



$\chi = 10$

$\Delta = 0.2025$

$D = 5130$

$\chi = 20$

$\Delta = 0.1529$

$D = 10260$

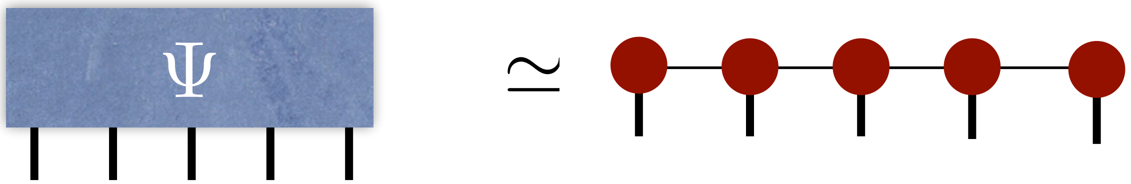
$\chi = 50$

$\Delta = 0.0885$

$D = 25650$

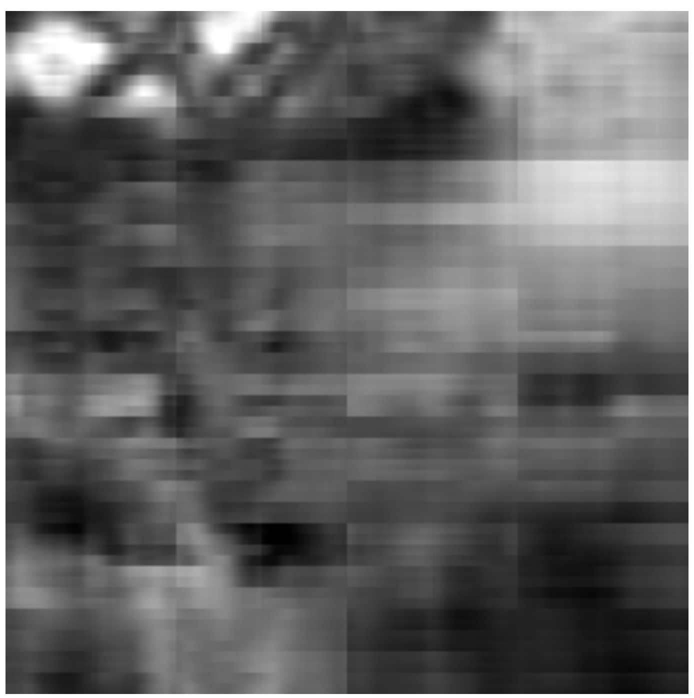
MPSによる画像の圧縮：case 1

2. 2 × 2 × ...× 2の16本足のテンソル



近似精度：$\Delta \equiv \|A - \tilde{A}\| / \|A\|$

データ量：$D \simeq N\chi_{max}^2$



$\chi_{max} = 10$

$\Delta = 0.2405$

$D = 2088$

$\chi_{max} = 20$

$\Delta = 0.1873$

$D = 6760$

$256 = 2^8$

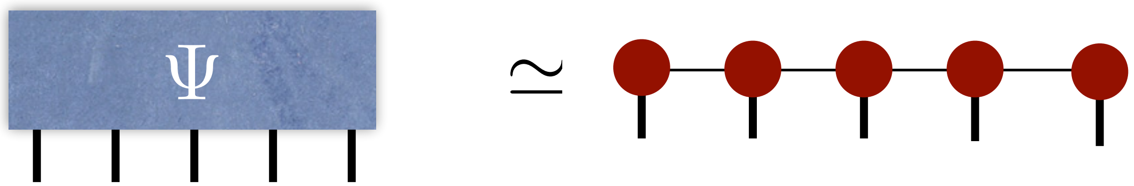
0	1	2	...	254	255
256	257	258	...		
				...	$2^{16}-1$

数字を二進数表記して

16本足のテンソル化

画像の圧縮：テンソル化依存性

2. $2 \times 2 \times \ldots \times 2$の16本足のテンソル

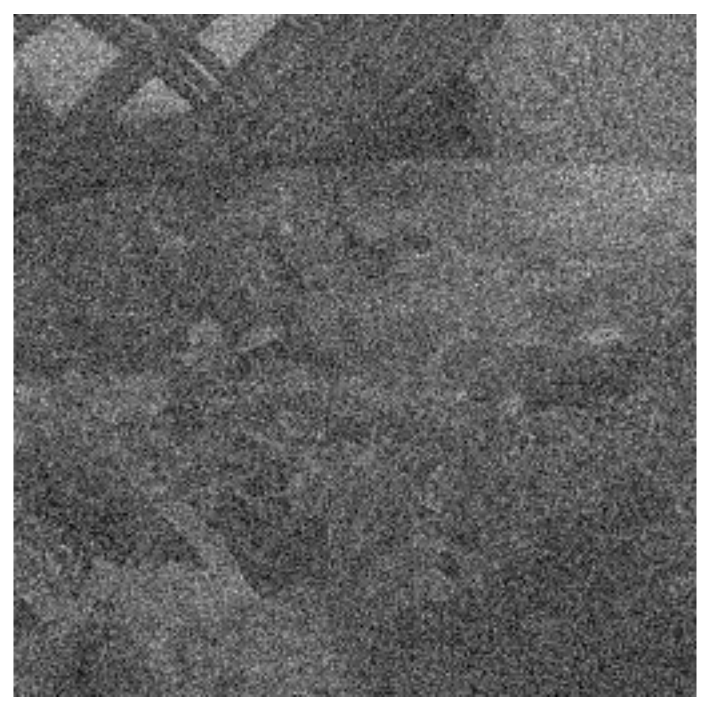


$$\chi_{max} = 50$$

$$D = 29128$$

case 1

$$\Delta = 0.1122$$

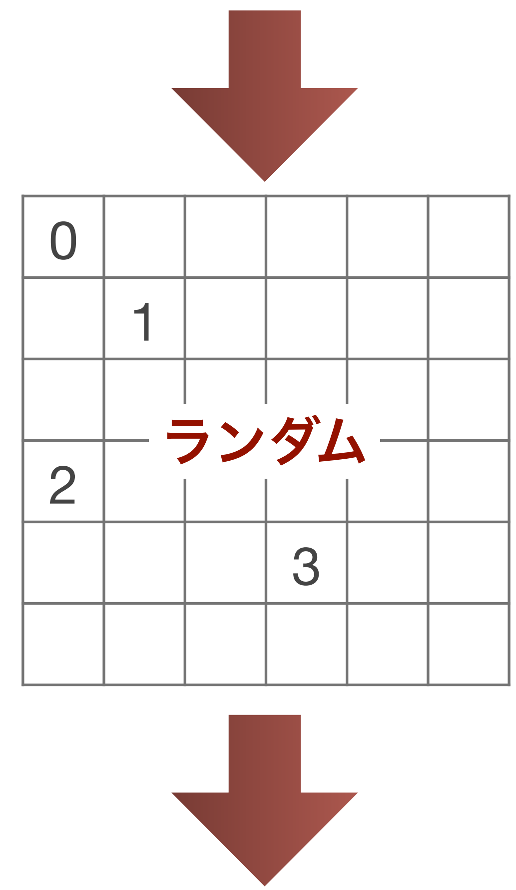


ランダム

$$\Delta = 0.4227$$

256=2⁸

256=2⁸

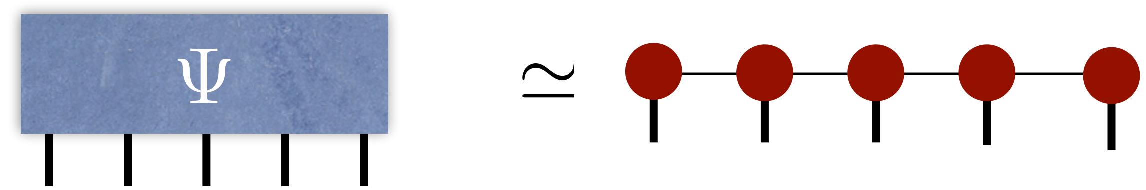


数字を二進数表記して

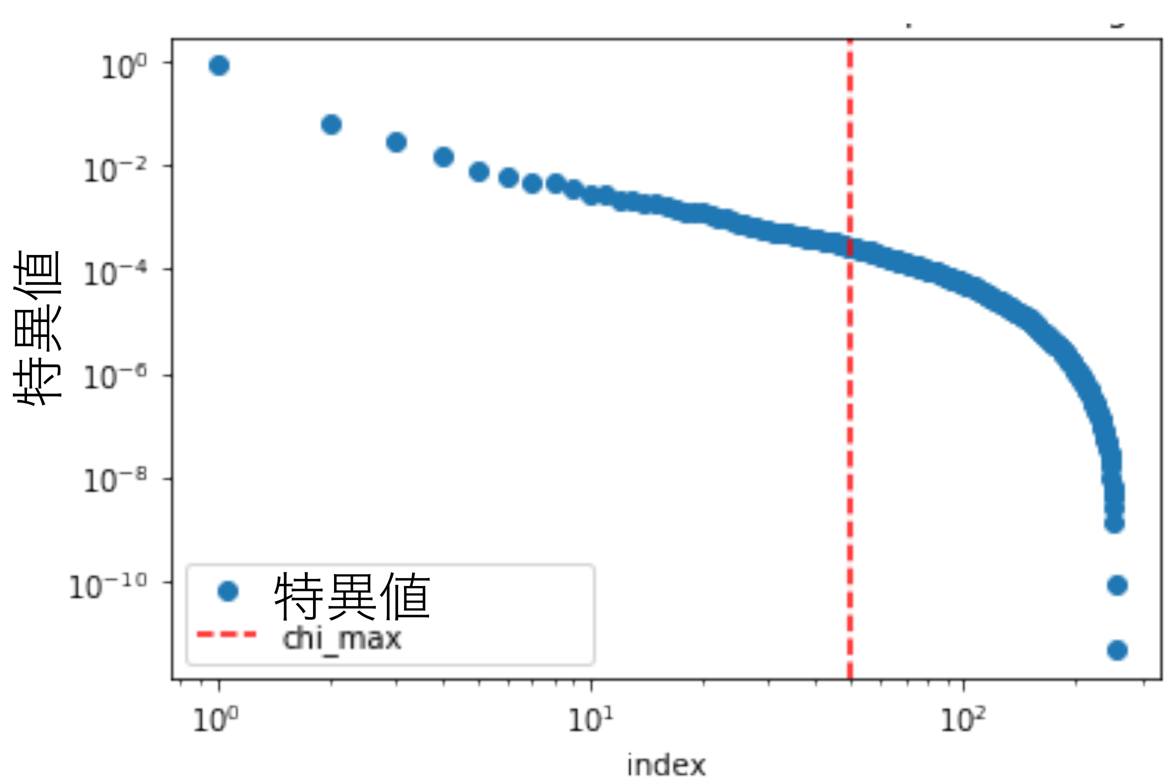
16本足のテンソル化

低ランク近似と特異値スペクトル

2. *2 × 2 × ...× 2の16本足のテンソル*

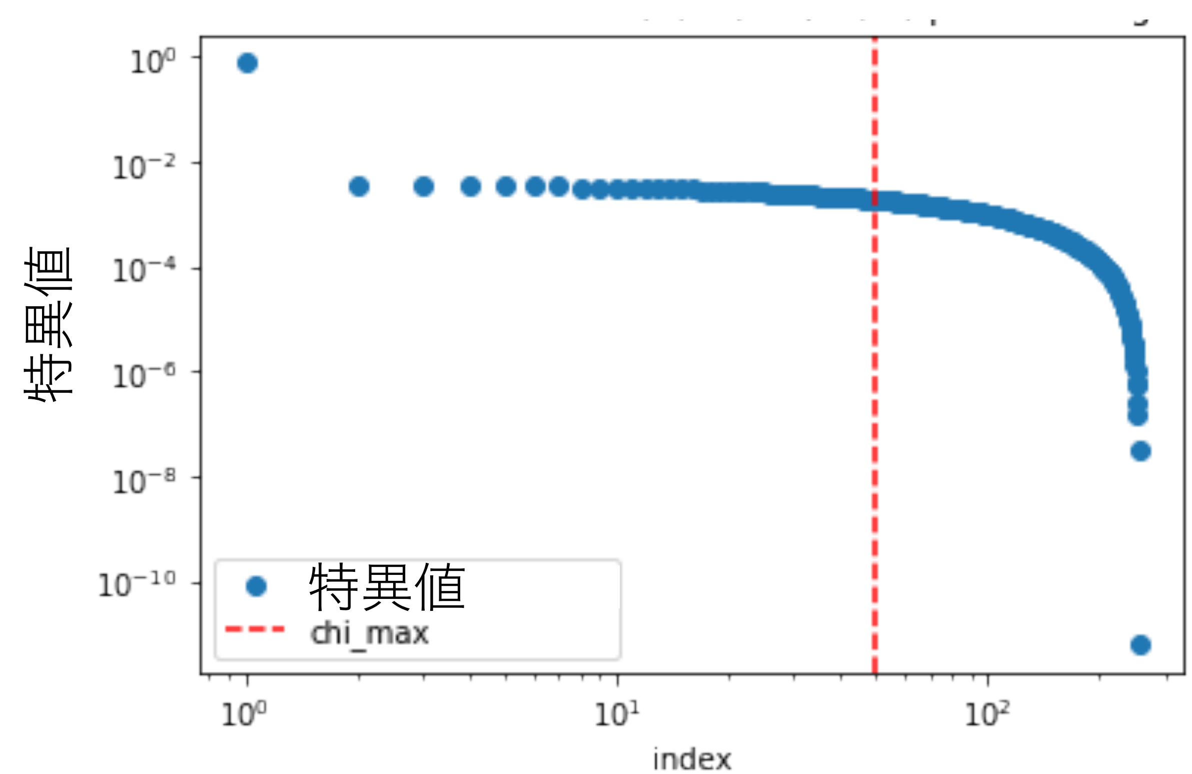


"中央"で分割した時の特異値



case 1

$\Delta = 0.1122$



ランダム

$\Delta = 0.4227$

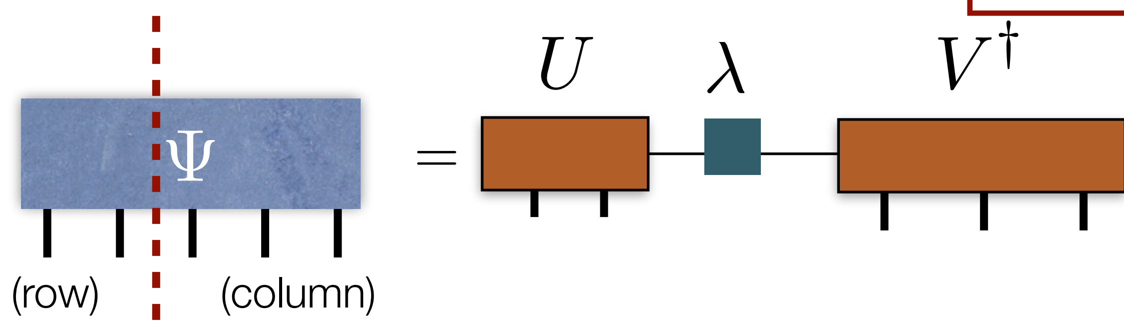
テンソル化の方法で"エンタングルメント"が違う

エンタングルメントエントロピー

テンソルを"左右"に分解した際の
特異値 λ の分布

→

左右の情報の相関
（エンタングルメント ）
を特徴付ける



エンタングルメントエントロピー＝規格化された特異値のエントロピー

$$\tilde{\lambda}_i \equiv \lambda_i / \sqrt{\sum_i \lambda_i^2}$$

→

$$S = -\sum_i \tilde{\lambda}_i^2 \log \tilde{\lambda}_i^2$$

$$0 \leq S \leq \log \chi$$

χ：特異値の総数

例：画像の特異値スペクトル

	case 1	random
$\chi_{max} = 50$ での誤差	$\Delta = 0.1122$	$\Delta = 0.4231$
エントロピー	$S = 0.9494$	$S = 1.801$

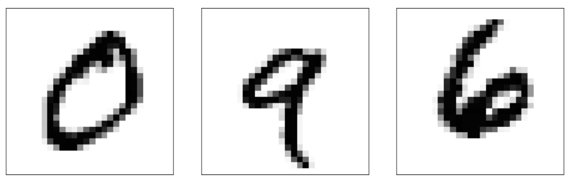
$\log 256 \simeq 5.545$

テンソルネットワークによる生成モデル

教師なしの生成モデル

Z.-Y. Han et al, Phys. Rev. X **8**, 031012 (2018).

N ピクセルの白黒画像



バイナリデータ $\vec{v} \in \mathbb{V} = \{0,1\}^{\otimes N}$

画像の確率分布： $P(\vec{v})$

$\vec{v} \sim (0,1,0,1,\ldots,0,0)$ ＝0 と 1の並び

量子ビットの古典状態と同じ構造！

$\vec{v} \to |0101\ldots00\rangle = |\vec{v}\rangle$

ボルンマシン表現：

Z.-Y. Han et al, Phys. Rev. X **8**, 031012 (2018).

確率分布を量子状態と対応づけて考える

$$P(\vec{v}) = \frac{|\Psi(\vec{v})|^2}{Z} \quad \left(Z = \sum_{\vec{v}} |\Psi(\vec{v}_i)|^2\right)$$

$$|\Psi\rangle = \sum_i \Psi(\vec{v}_i)|\vec{v}_i\rangle$$

＊量子状態 $|\Psi\rangle$ を測定すると確率 $\dfrac{|\Psi(\vec{v}_i)|^2}{Z}$ で状態 $|\vec{v}_i\rangle$ が観測される。

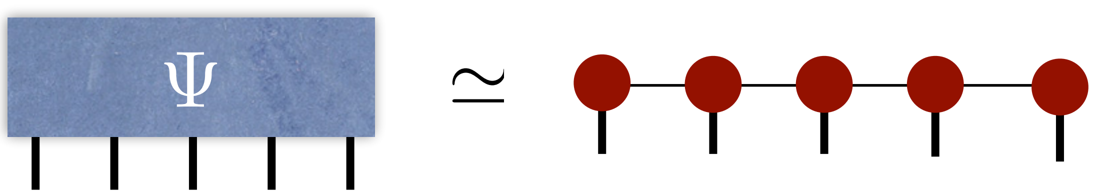
教師なしの生成モデル

Z.-Y. Han et al, Phys. Rev. X **8**, 031012 (2018).

ボルンマシン

$$P(\vec{v}) = \frac{|\Psi(\vec{v})|^2}{Z} \qquad \left(Z = \sum_{\vec{v}} |\Psi(\vec{v}_i)|^2\right)$$

対応する量子状態にテンソルネットワーク表現を使える

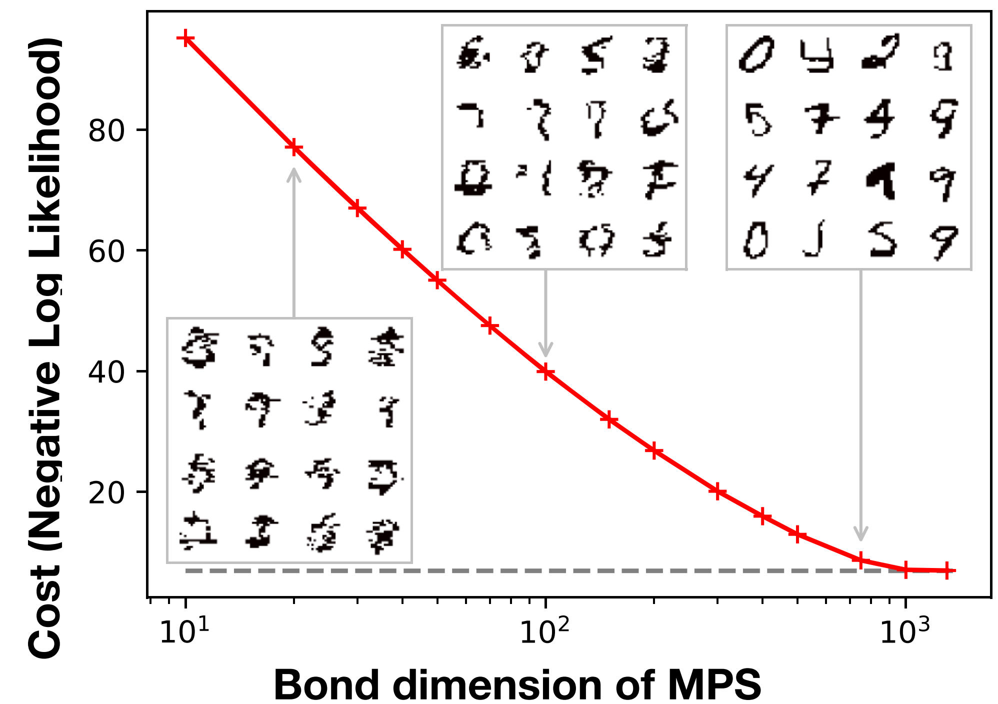


*この場合、事前には、どのようなネットワーク構造が有効かは分からない

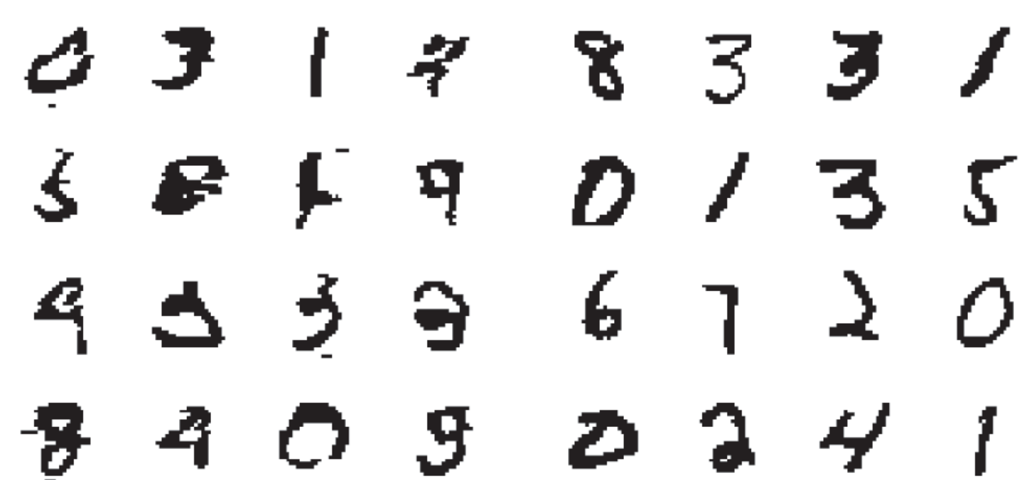
例えば、最適なMPSを負の対数尤度を最小化することで求められる

$$F = -\frac{1}{\mathbb{T}} \sum_{\vec{v} \in \mathbb{T}} \ln P(\vec{v})$$

$\mathbb{T}$：訓練データの集合



Images generation



(a) Generated

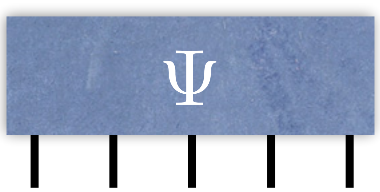
(b) Original

教師なしの生成モデル

ボルンマシン：

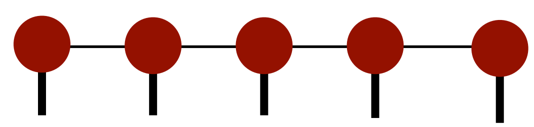
$$P(\vec{v}) = \frac{|\Psi(\vec{v})|^2}{Z}$$

量子系の場合と同様にテンソルネットワークの構造に応じて、性能が変化しうる



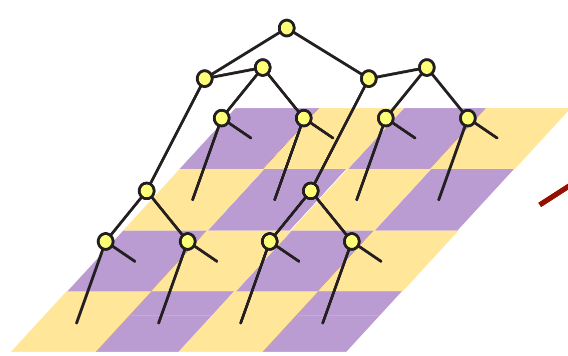
$\simeq$

MPS



$\simeq$

TTN



(S. Cheng et al, Phys. Rev. B **99**, 155131 (2019).より引用)

TABLE I. Test NLL of different models for the binary MNIST data set.

Model	Test NLL
Tree factor graph	175.8
MPS	101.5
TTN, 1D	96.9
TTN, 2D	94.3
RBM	86.3[a] [43]
VAE	84.8[a] [45]
PixelCNN	81.3 [10]

[a] Approximated NLL.

【ボルンマシン独自の問題】

＊ボルンマシンは量子状態の位相を無視

無数の異なる量子状態が同じ確率分布に対応

それぞれ量子エンタングルメントの量が異なり、TNでの近似精度も変わる

微分方程式への応用

微分方程式への応用

Nikita Gourianov et. al., Nat. Comput. Sci. **2**, 20 (2022).

非圧縮のNaiver-Stokes 方程式

$$\nabla \cdot V = 0$$

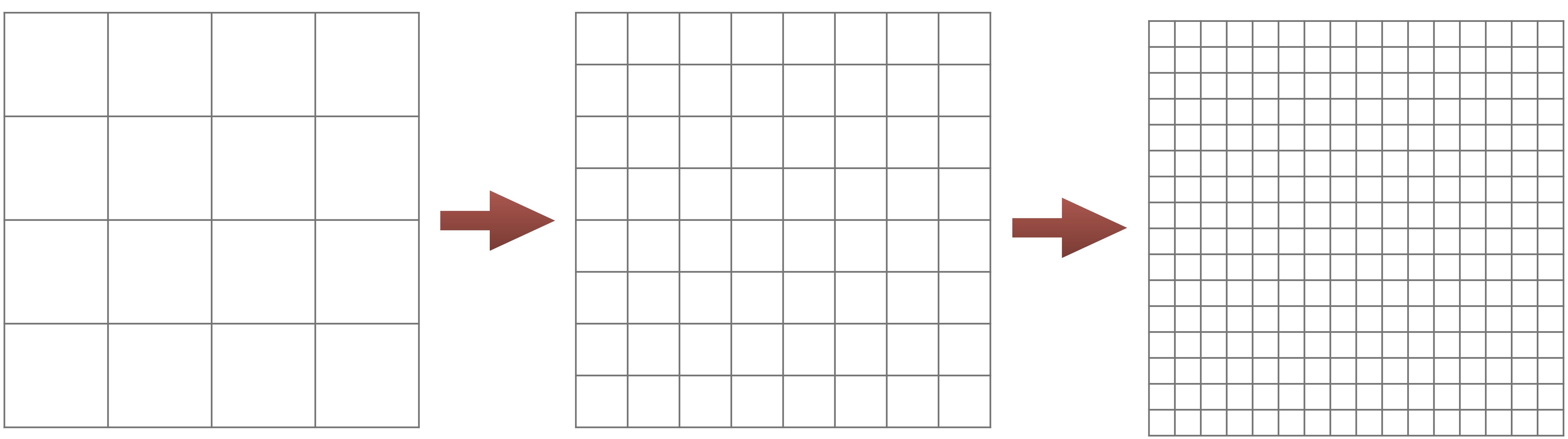
$$\frac{\partial V}{\partial t} + (V \cdot \nabla) V = -\nabla p + \nu \nabla^2 V,$$

直接法によるシミュレーション：離散化された格子グリッド上で微分方程式を解く

乱流のような複雑な問題を扱う場合、無数の長さスケールが混合するため、とても小さいメッシュが必要

$$V(t, r_q) = \sum_{i=1}^{K} u_i(t, r_q)\hat{\mathbf{e}}_i$$

4 × 4 grid　　8 × 8 grid　　16 × 16 grid



微分方程式への応用

Nikita Gourianov et. al., Nat. Comput. Sci. **2**, 20 (2022).

このような場合にテンソルネットワークによる情報圧縮が使える？

画像にTN分解を適用したように、原理的にはTNが使える。
ただし、その効率は、対象の物理（エンタングルメントの性質）に依存

この系のエンタングルメント？

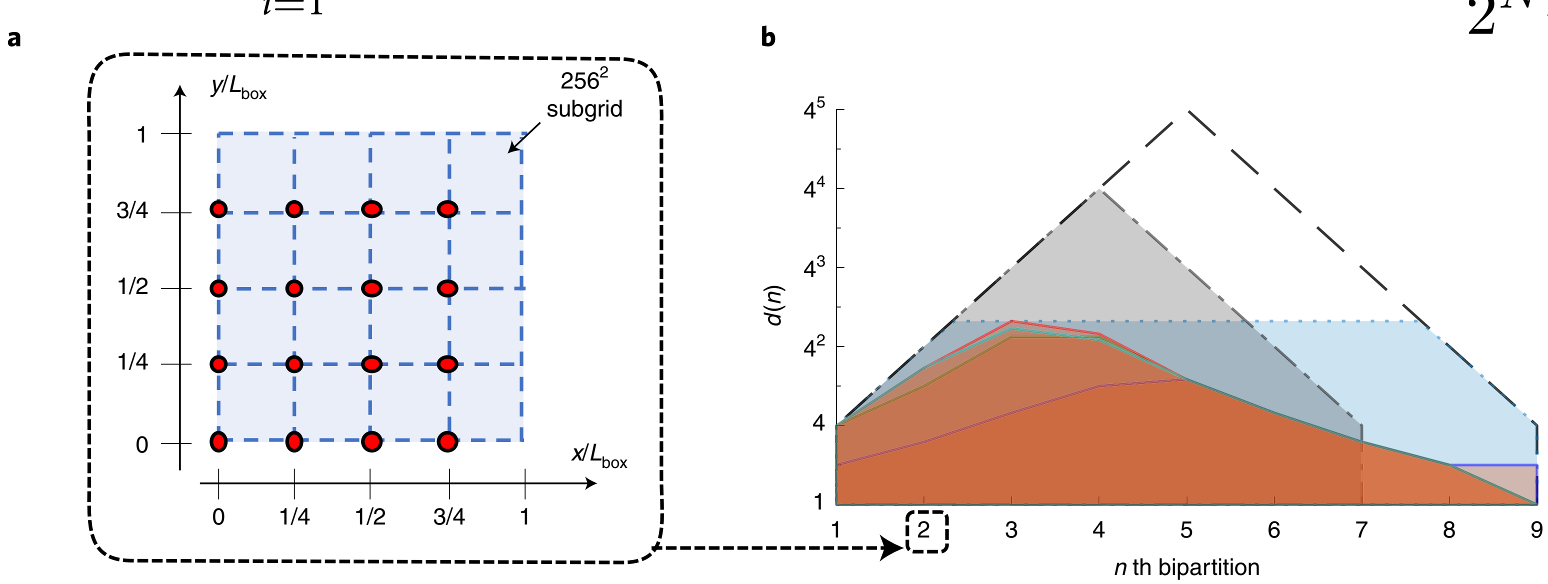
長い空間スケールと短い空間スケールの間のシュミット分解

$$u_i(t, r_q) = \sum_{\alpha=1}^{d(n)} \lambda_\alpha(t) R_\alpha(t, X_k) f_\alpha(t, x_l), \quad r_q = X_k + x_l.$$

$$V(t, r_q) = \sum_{i=1}^{K} u_i(t, r_q)\hat{\mathbf{e}}_i$$

＊画像と同様にグリッド点を二進数表記してテンソル化

$$2^N r_q = i_0 + 2^1 i_1 + 2^2 i_2 + \cdots + 2^{N-1} i_{N-1}$$



99%の近似精度を出すために必要なシュミット係数の数（rank）
→サイズに依存しない
1d 面積則！

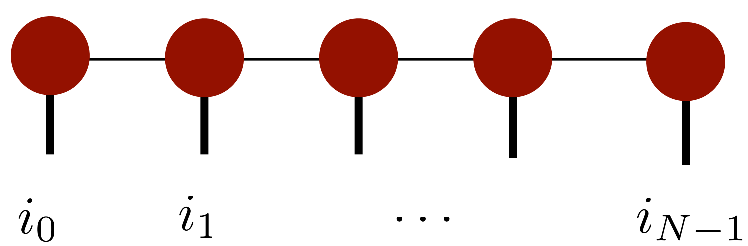
微分方程式への応用

Nikita Gourianov et. al., Nat. Comput. Sci. **2**, 20 (2022).

1次元の面積則が成立することから、MPSをこの系のシミュレーションに使えそう

1次元での2^N 格子点

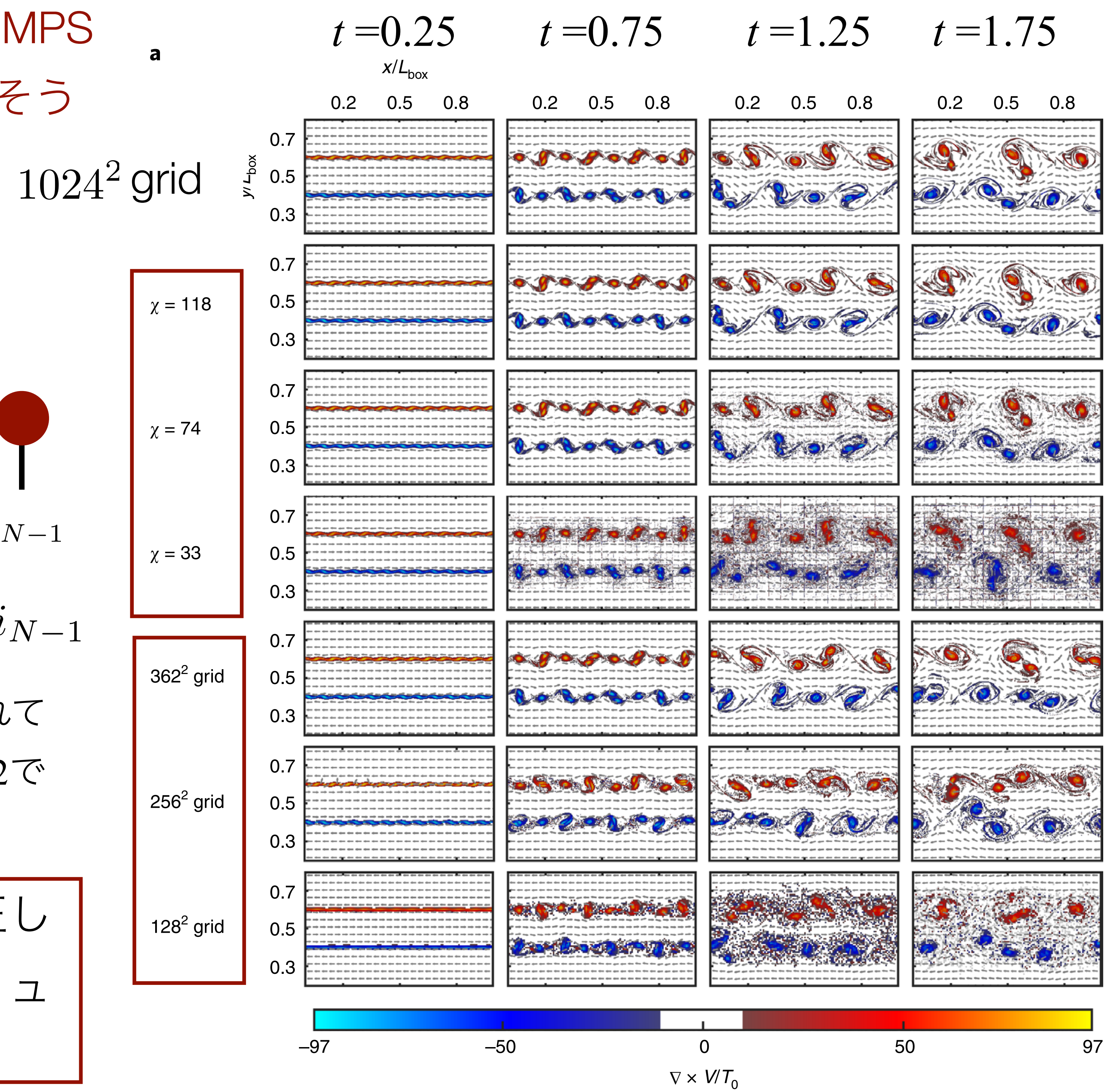
$$u_i(r_q) \simeq$$



$$2^N r_q = i_0 + 2^1 i_1 + 2^2 i_2 + \cdots + 2^{N-1} i_{N-1}$$

(実際の計算では2次元や 3次元系が扱われている。その場合、局所的な空間の次元が2ではなく、2^2 や 2^3になる)

MPSを使うことで、乱流を正しく捉えたまま、効率的なシミュレーションが可能に！



コンテンツ

- はじめに
    - テンソルとテンソルネットワーク
    - 量子状態の表現と古典計算の困難
    - テンソルネットワークの基礎
- 量子状態の情報圧縮
    - テンソルネットワーク分解
    - 量子状態のエンタングルメント
- 種々のテンソルネットワークと量子エンタングルメント
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 量子物性への応用
    - 2次元無限系の計算手法
    - Kitaev模型への応用例
    - 量子コンピュータへの期待と応用例
- まとめ

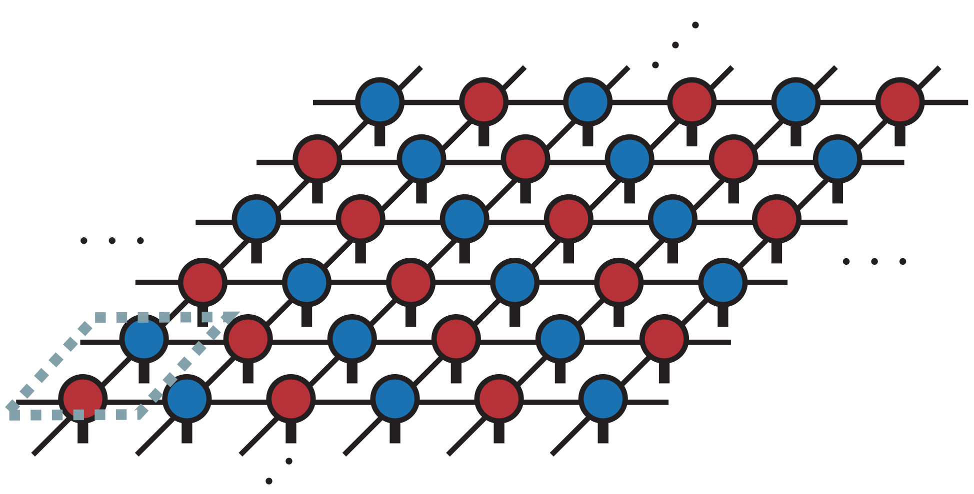
無限系のテンソル積状態：iTPS

状態ベクトルに並進対称性がある場合：　$\underline{T}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$

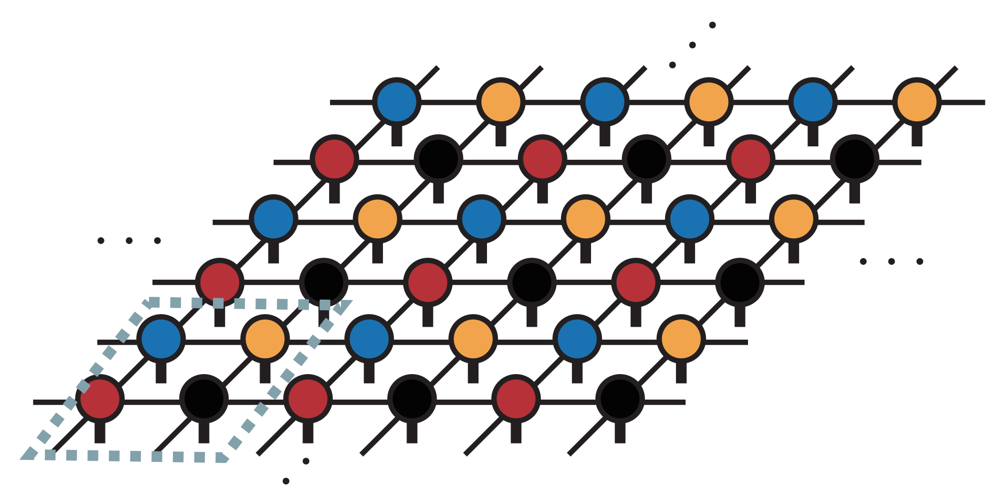
並進の演算子　位相はつかない

同じテンソルを周期的に（無限に）並べることで、

無限系の波動関数が有限の自由度で表現可能



2サイトユニットセル



4サイトユニットセル

＊対象の周期が不明な場合は、複数のユニットセルで
計算したエネルギーを比較し、適切なユニットセルを探す

iTPSを用いた計算アルゴリズム

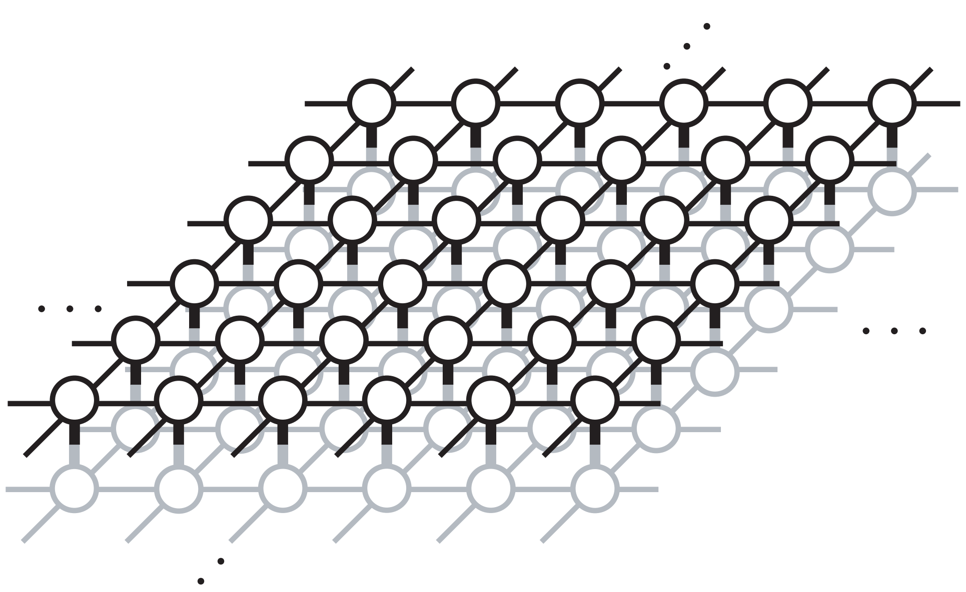
基底状態の物性を調べるためには、

1. エネルギー期待値などの物理量計算
2. iTPSの最適化

の二つの計算が少なくとも必要

＊TPSでは「テンソルネットワークの縮約」の厳密計算は困難

$\langle \Psi | \Psi \rangle =$



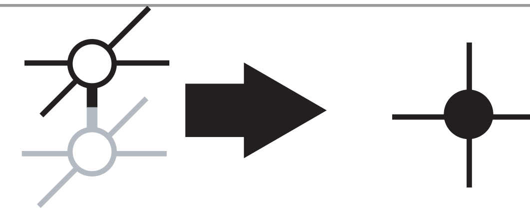
このネットワークの縮約には、
指数関数的に大きな計算量が必要

近似的な縮約

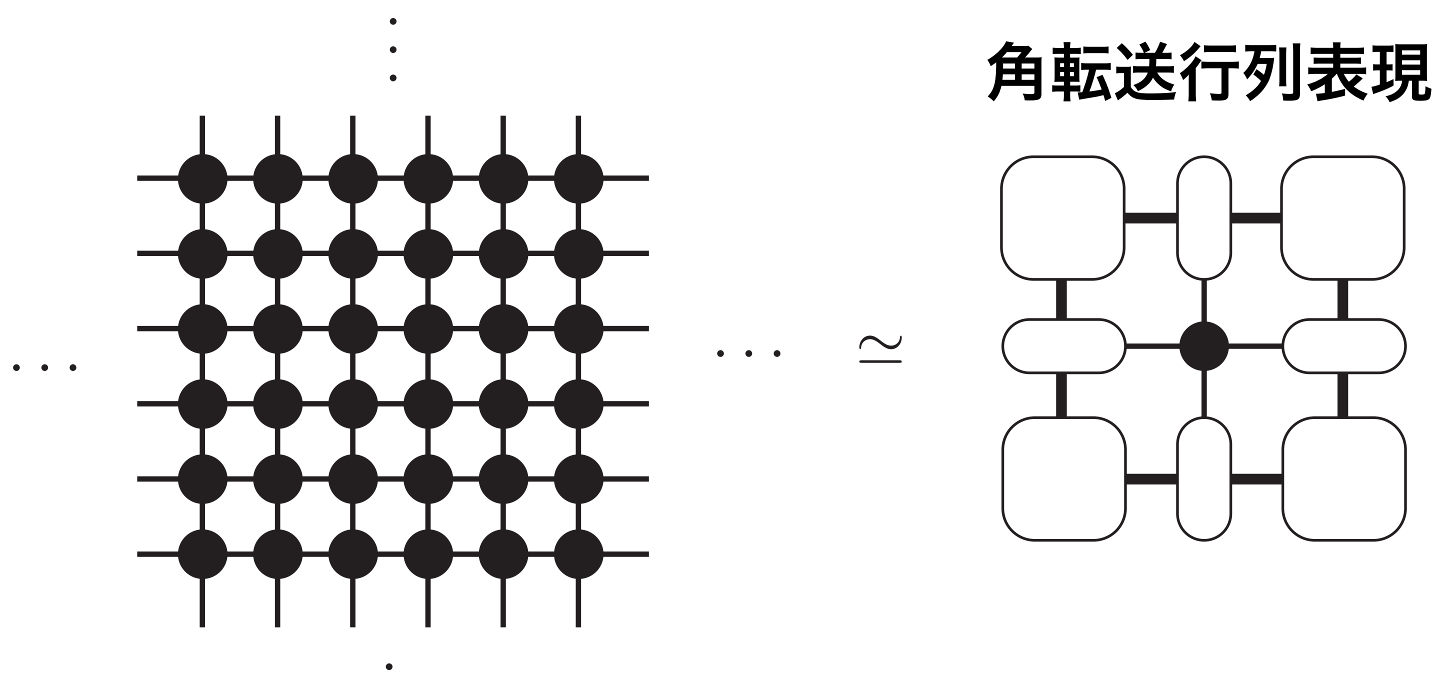
- テンソル繰り込み
- 境界MPS法
- 角転送行列法
- 平均場環境

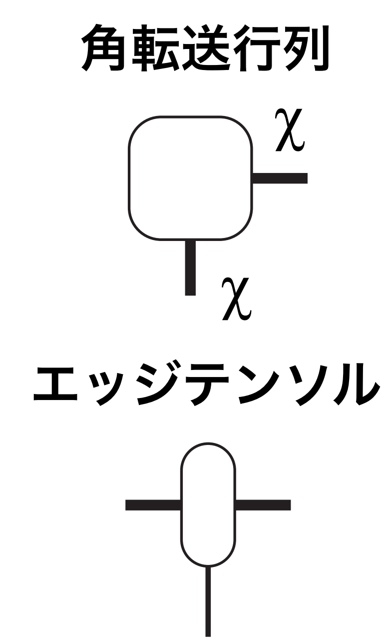
角転送行列法による近似的な縮約

先ほどのネットワークを簡略化：



$\langle \Psi | \Psi \rangle =$





無限に広がった環境を"ボンド次元"χの角転送行列で近似的に表現

角転送行列とエッジテンソルは、$O(\chi^2 D^6), O(\chi^3 D^4)$
のコストで計算可能（詳細はマニュアル・参考文献参照）

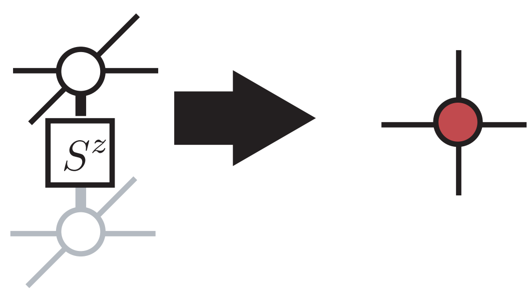
＊χは物理量が収束するように十分に大きく取る

＊通常、$\chi \propto O(D^2)$でスケールするため縮約コストは$O(D^{10})$

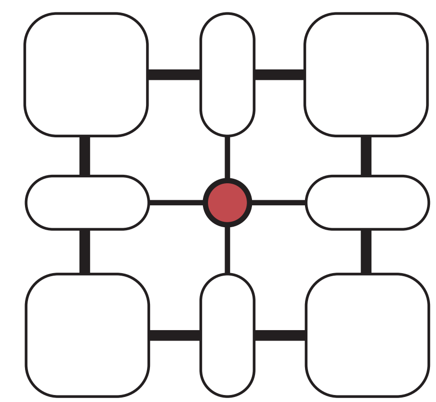
角転送行列法による物理量の計算

角転送行列を用いれば局所的な物理量は（比較的）簡単に計算可能

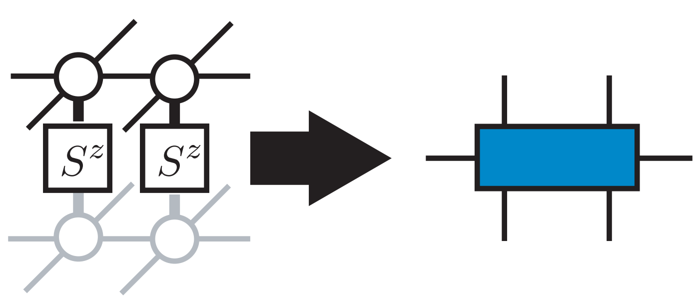
1サイト物理量：



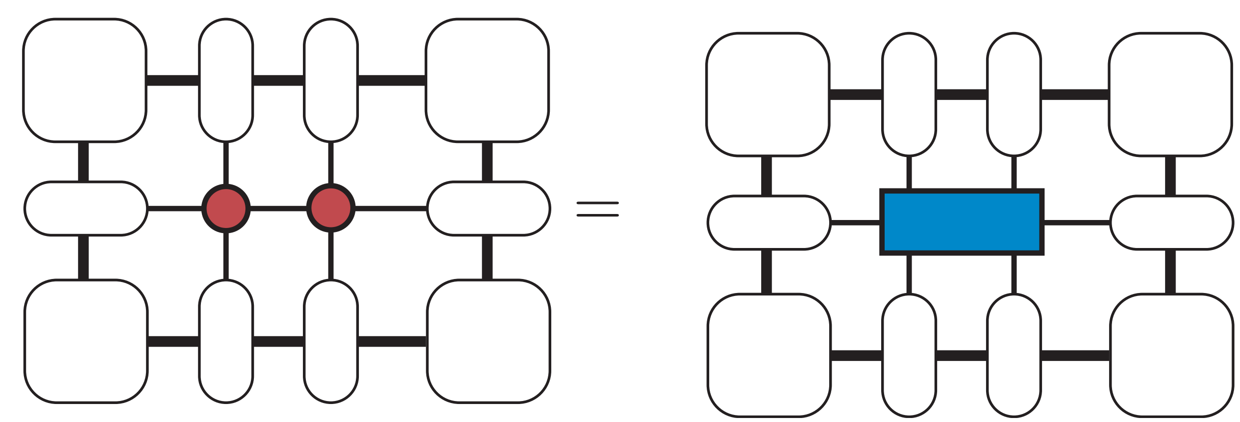
$$, \quad \langle \Psi | S^z | \Psi \rangle =$$



2サイト物理量：



$$, \quad \langle \Psi | S^z_i S^z_{i+1} | \Psi \rangle =$$



＊計算するダイアグラムが（２次元的に）大きくなると、縮約コストは大きく増える

- 対角方向に長距離の相関関数
- 大きなクラスタの多体相互作用

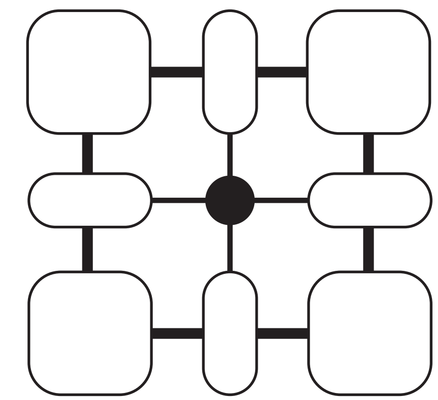
TeNeSでも原理的に計算可能だが、

長時間の計算が必要

角転送行列法と相関長

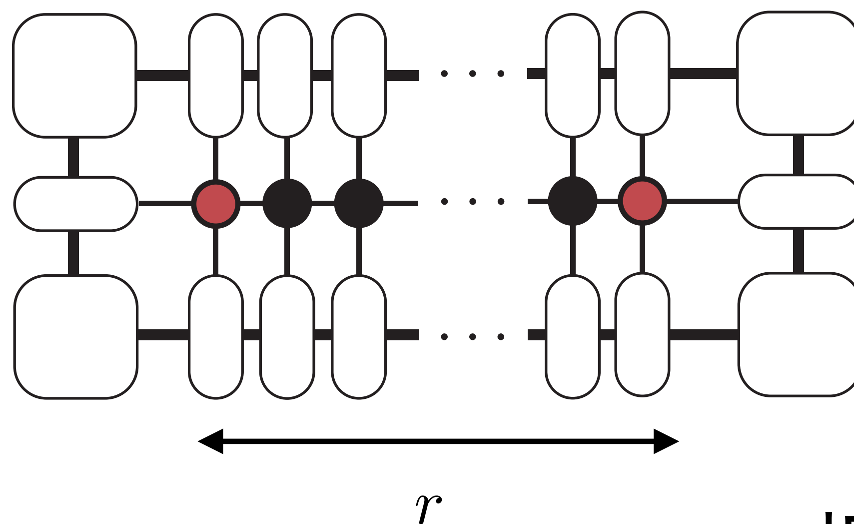
角転送行列を用いれば相関長も計算できる

角転送行列表現

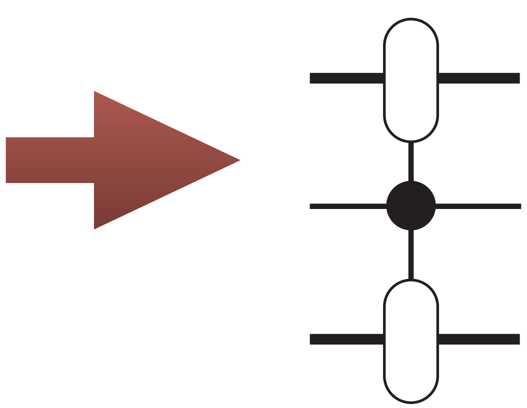


相関関数

$$\langle\Psi|S_i^z S_{i+r}^z|\Psi\rangle =$$



転送行列



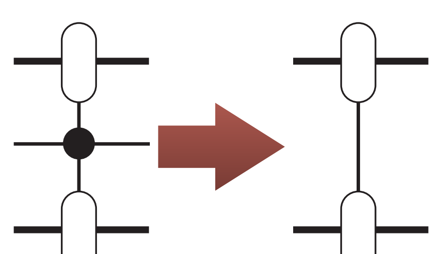
固有値：λ_i

$$|\lambda_0| \geq |\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \cdots$$

相関長

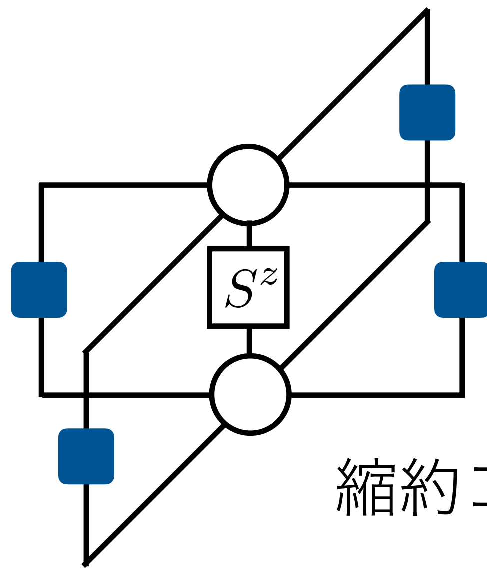
$$\frac{1}{\xi} = -\ln\frac{|\lambda_1|}{|\lambda_0|}$$

＊角転送行列が無限環境を表していることより、中心のテンソルは省略可能。

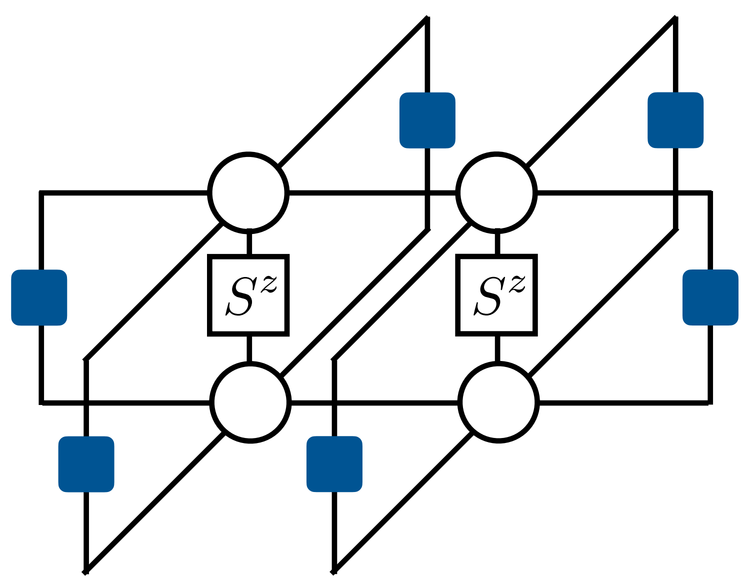


平均場環境

平均場環境：各ボンドに平均場的な環境を考えて期待値を計算

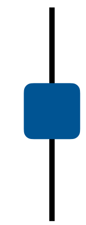
$\langle \Psi | S^z | \Psi \rangle =$ 

縮約コスト：$O(D^4)$

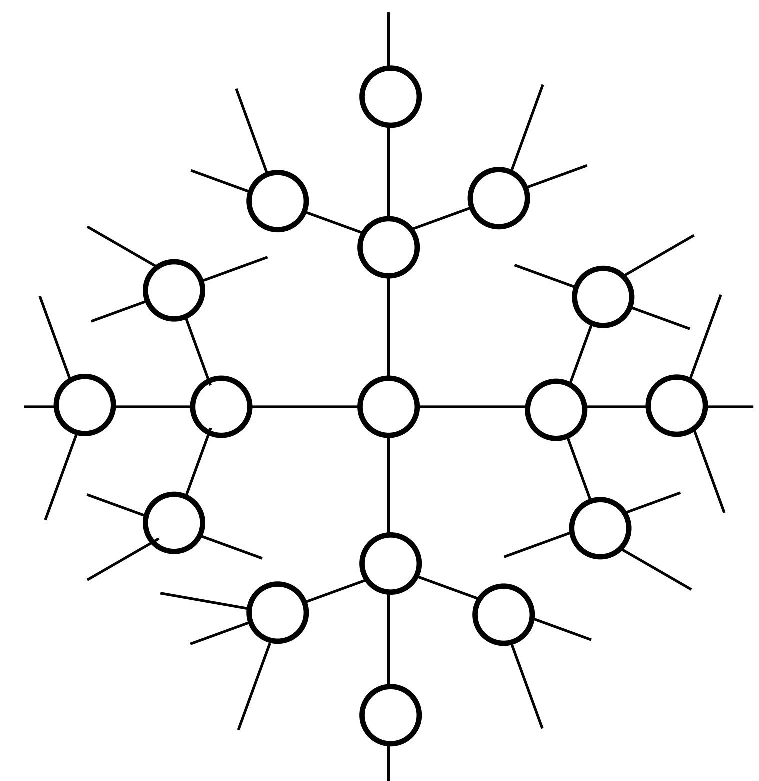
$\langle \Psi | S_i^z S_{i+1}^z | \Psi \rangle =$ 

縮約コスト：$O(D^5)$

計算が非常に軽くなるが、近似も大きい


: 平均場テンソル

テンソルネットワーク内の
ループ構造を無視する状況で正確



*正方格子では近似になるため、
エネルギーの変分的にならない

iTPSの最適化

iTPSの典型的な最適化法

1. 変分最適化法

エネルギー期待値を最小にする様にテンソルを変化させる

$$\min_A E(A) = \min_A \frac{\langle \Psi(A)|\hat{H}|\Psi(A)\rangle}{\langle \Psi(A)|\Psi(A)\rangle}$$

＊微分の計算が困難だったが、最近発展

P. Corboz, Phys. Rev. B **94**, 035133 (2016).

L. Vanderstraeten *et a*l , Phys. Rev. B **94**, 155123 (2016).

H.-J. Liao *et a*l, Phys. Rev. X **9**, 31041 (2019).

2. 虚時間発展法

長時間の虚時間発展で基底状態を得る

$$\lim_{M\to\infty} \left(e^{-\tau\mathcal{H}}\right)^M |\psi\rangle = \text{ground state}$$

虚時間発展演算子をかけると、iTPSのボンド次元が増大

➡ 同じボンド次元のiTPSに再度近似

iTPSの虚時間発展法

虚時間発展の分解：（仮定）ハミルトニアンは二体相互作用の和 $\mathcal{H} = \sum_{\{(i,j)\}} H_{ij}$

鈴木-トロッター分解

小さな時間刻みτ
での虚時間発展

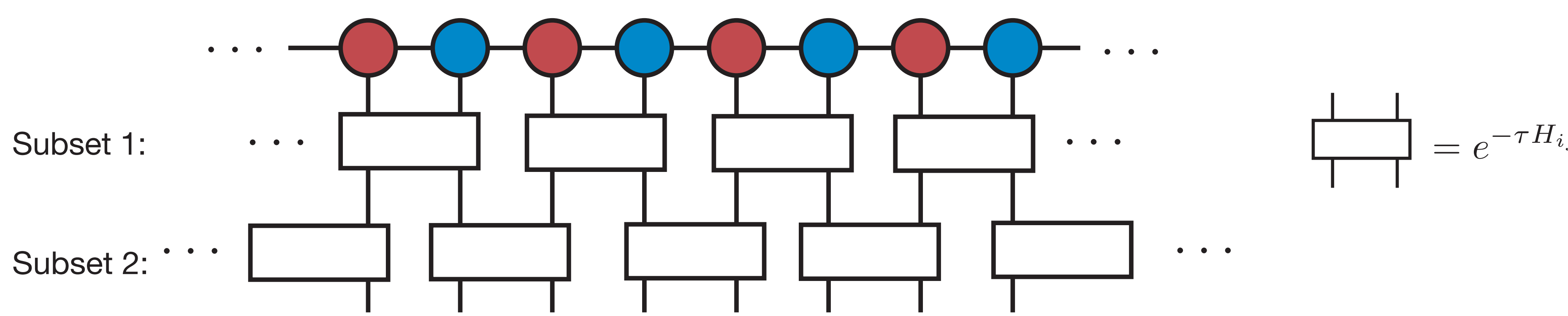
$$e^{-\tau\mathcal{H}} = \prod_{\{(i,j)\}} e^{-\tau H_{ij}} + O(\tau^2)$$

（＊より高次の近似を考えることもできる）

全体の虚時間発展

$$e^{-T\mathcal{H}}|\Psi_0\rangle = \left(\prod_{\{(i,j)\}} e^{-\tau H_{ij}}\right)^{N_\tau} |\Psi_0\rangle + O(\tau)$$

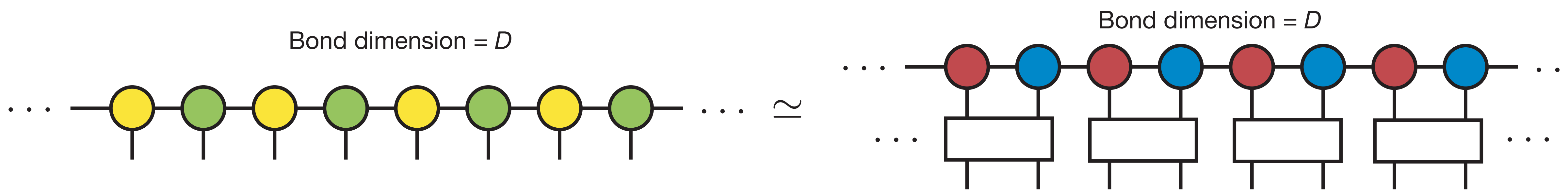
相互作用を
可換な組に分解



iTPSの虚時間発展法

打ち切りによる近似

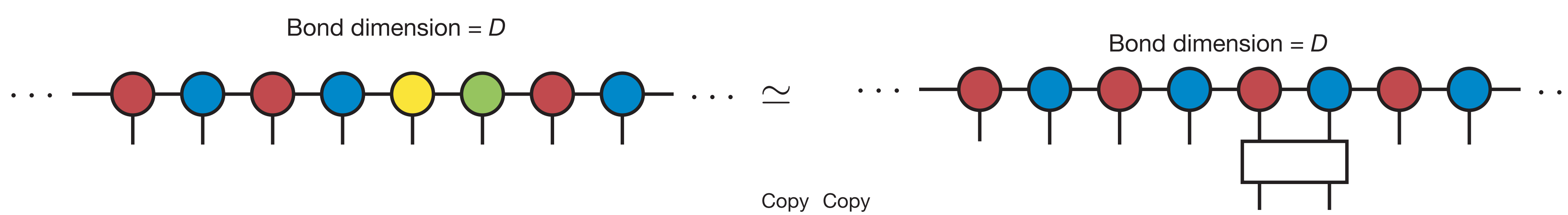
虚時間発展後の状態を再び、iTPSで近似する $|\Psi_\tau^{\mathrm{iTPS}}\rangle \simeq \prod_{\{(i,j)\in \mathrm{subset}_n\}} e^{-\tau H_{ij}}|\Psi^{\mathrm{iTPS}}\rangle$



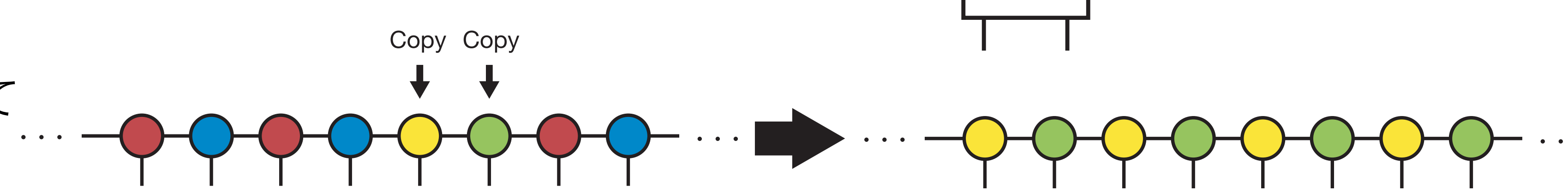
この近似は最小化問題： $\min \left\| |\Psi_\tau^{\mathrm{iTPS}}\rangle - \underline{\prod_{\{(i,j)\in \mathrm{subset}_n\}}} e^{-\tau H_{ij}}|\Psi^{\mathrm{iTPS}}\rangle \right\|^2$

並進対称性の影響で非線型の難しい最適化問題....

局所近似する： $\min \left\| |\Psi_\tau^{\mathrm{iTPS}}\rangle - \underline{e^{-\tau H_{ij}}}|\Psi^{\mathrm{iTPS}}\rangle \right\|^2$



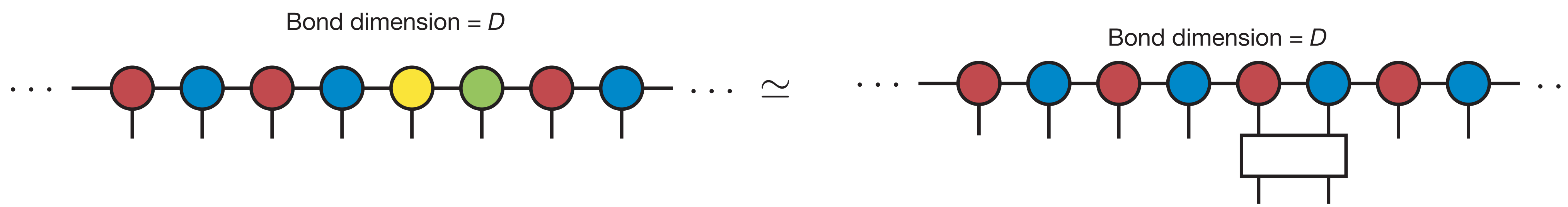
並進対称性を利用して全体にコピー



iTPSの虚時間発展法

最適化問題の解法

$$\min \left\| |\Psi_\tau^{\mathrm{iTPS}}\rangle - e^{-\tau H_{ij}} |\Psi^{\mathrm{iTPS}}\rangle \right\|^2$$

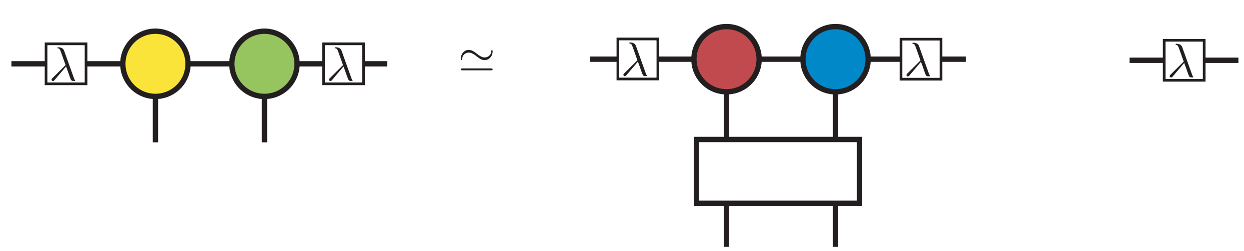


コスト関数は角転送行列を用いて計算可能：$O(D^{10})$

Full update法と呼ばれる　(cf. R. Orus *et al*, Phys. Rev. B **80**, 094403 (2009))

より計算の軽い近似最適化？

さらに近似した環境を用いて、完全な局所問題に置き換える

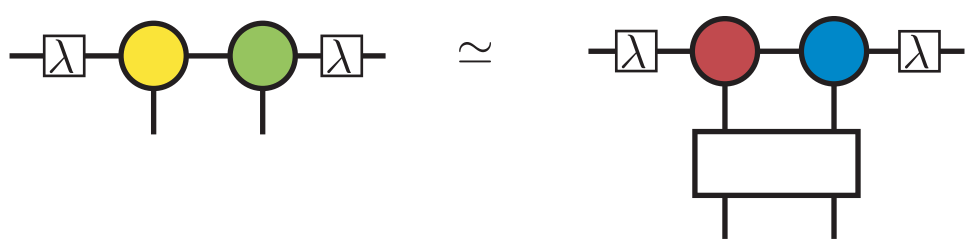


: 非負の対角行列=近似環境

Simple update法と呼ばれる　(H. G. Jiang *et al*, Phys. Rev. Lett. **101**, 090603 (2008))

iTPSの虚時間発展法

Simple update法 (H. G. Jiang *et al*, Phys. Rev. Lett. **101**, 090603 (2008))

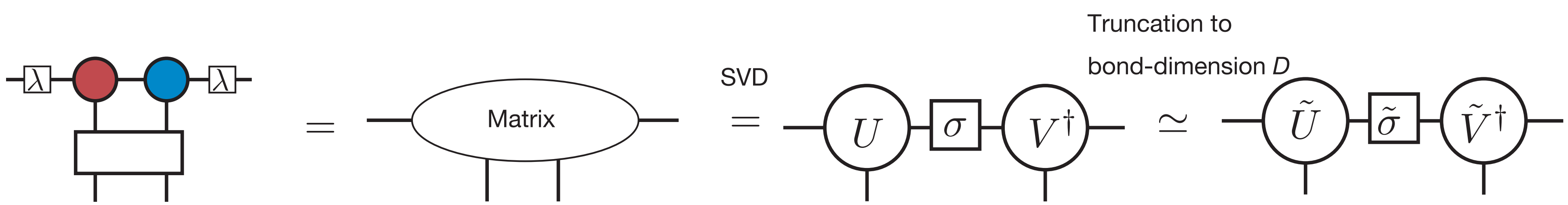


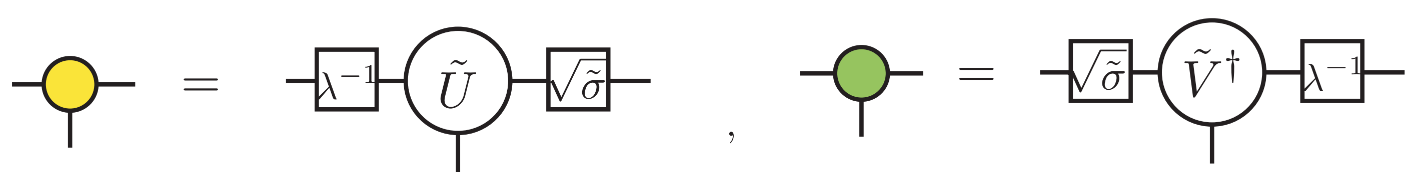
λ : 非負の対角行列=近似環境

縮約に出てきた平均場
と本質的に同一

右辺のダイアグラムを行列だと考え、特異値分解による低ランク近似

計算コスト：（QR分解を使うと）$O(D^5)$　とても軽い！





, $\lambda_{\mathrm{new}} = \sqrt{\tilde{\sigma}}$

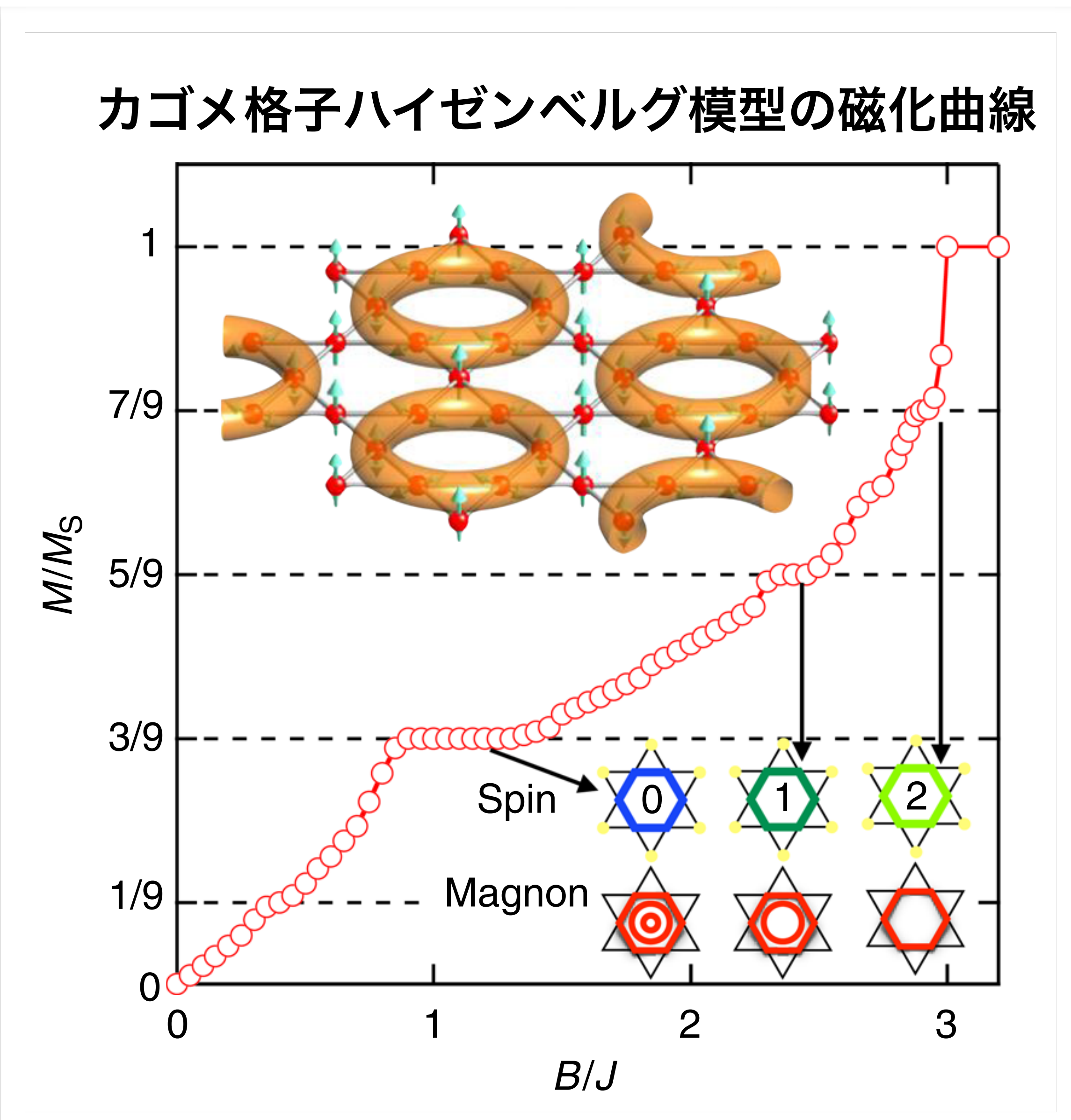
次のステップでの
環境として用いる

Simple update法のデメリット：

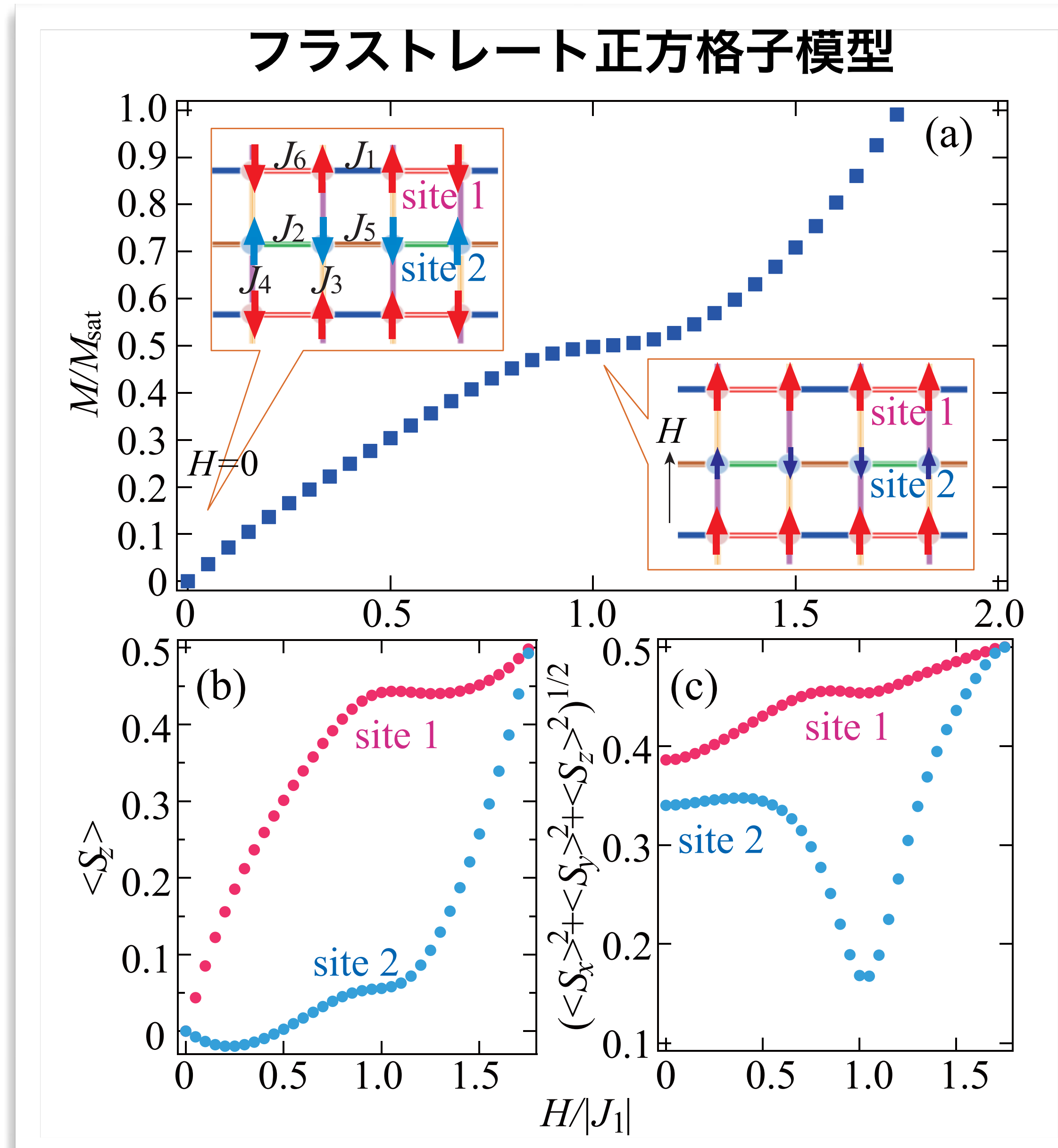
- 初期状態依存性が大きく、不適切な状態に最適化がトラップされる場合がある
- ランダムな状態から始めた場合、長距離相関を成長させることが苦手
  - 量子臨界点近傍などでは、full update法の方が良い

テンソルネットワーク法の適用例

例：（QMCのできない）フラストレート磁性体



R. Okuma, D. Nakamura, T. Okubo et al,
Nat. Commun. **10**, 1229 (2019).



H. Yamaguchi, Y. Sasaki, T. Okubo,
Phys. Rev. B **98**, 094402 (2018).

Tensor Netwok Solver (TeNeS)

Y. Motoyama, T. Okubo, et al., Comput. Phys. Commun. 279, 108437 (2022).

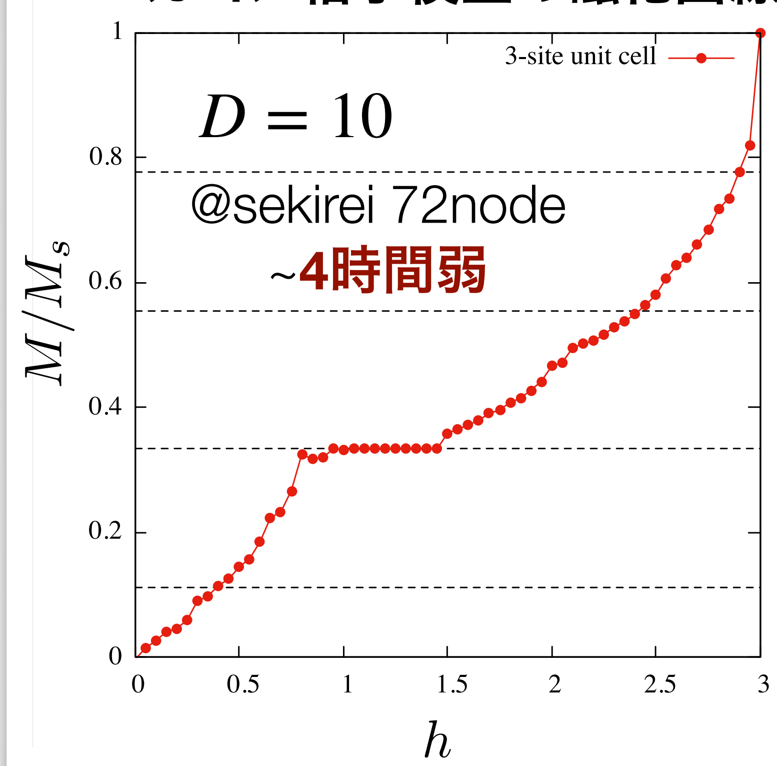
TeNeS

https://github.com/issp-center-dev/TeNeS

無限系のTPS（iTPS）を用いた変分法による基底状態計算

- ☑虚時間発展法によるテンソルの最適化
- ☑MPI/OpenMPによる大規模並列計算に対応
  - ☑mptensor（森田） によるテンソル演算の並列化
- ☑二次元の量子スピン系やボゾン系が簡単に計算可能
  - ☑mVMCやHPhiと類似のinput file
- ☑標準的な二次元格子にデフォルトで対応
  - ☑原理的には任意の二次元格子に対応可能

カゴメ格子模型の磁化曲線



開発チーム

- 大久保毅（東大理）：アルゴリズム部分の実装
- 森田悟史（物性研）：関連ライブラリ・ツール作成
- 本山裕一（物性研）：メインプログラム等の設計・実装
- 吉見一慶（物性研）：ユーザーテスト・サンプルの作成、マネージメント
- 加藤岳生（物性研）：ユーザーテスト・サンプルの作成
- 川島直輝（物性研）：プロジェクトリーダー

【物性研高度化プロジェクト】

コンテンツ

- はじめに
  - テンソルとテンソルネットワーク
  - 量子状態の表現と古典計算の困難
  - テンソルネットワークの基礎
- 量子状態の情報圧縮
  - テンソルネットワーク分解
  - 量子状態のエンタングルメント
- 種々のテンソルネットワークと量子エンタングルメント
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 量子物性への応用
  - 2次元無限系の計算手法
  - Kitaev模型への応用例
  - 量子コンピュータへの期待と応用例
- まとめ

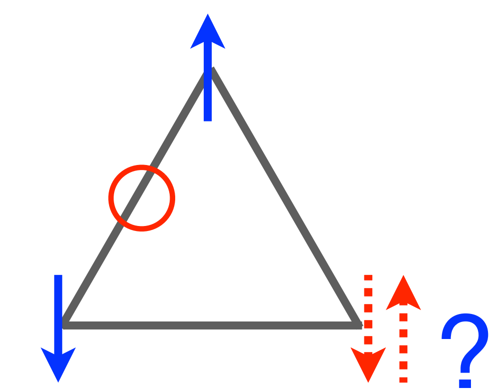
量子スピン模型と量子スピン液体

一般の量子スピン模型

$$\mathcal{H} = \sum_{\alpha,\beta=x,y,z} \sum_{i,j} J_{i,j}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta$$

フラストレーション

$$\mathcal{H} = S_1^z S_2^z + S_2^z S_3^z + S_3^z S_1^z$$

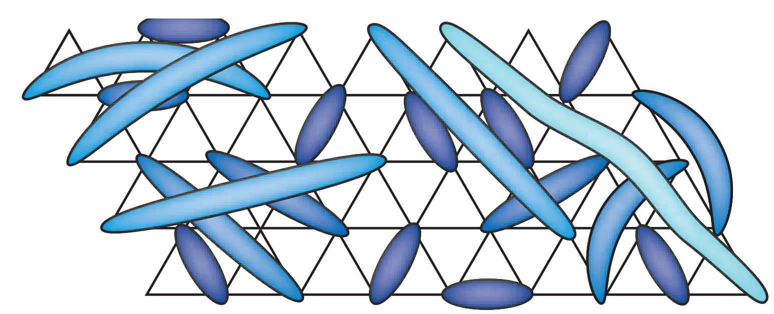


相互作用に競合（フラストレーション）があると:

場合によっては、基底状態が（長距離）秩序を持たない

量子スピン液体

Spin liquid (RVB)



(L. Balents, Nature (2010))

稀な例：可解模型

基底状態がスピン液体であることが分かっている最も有名な例

（ハニカム格子）キタエフ模型

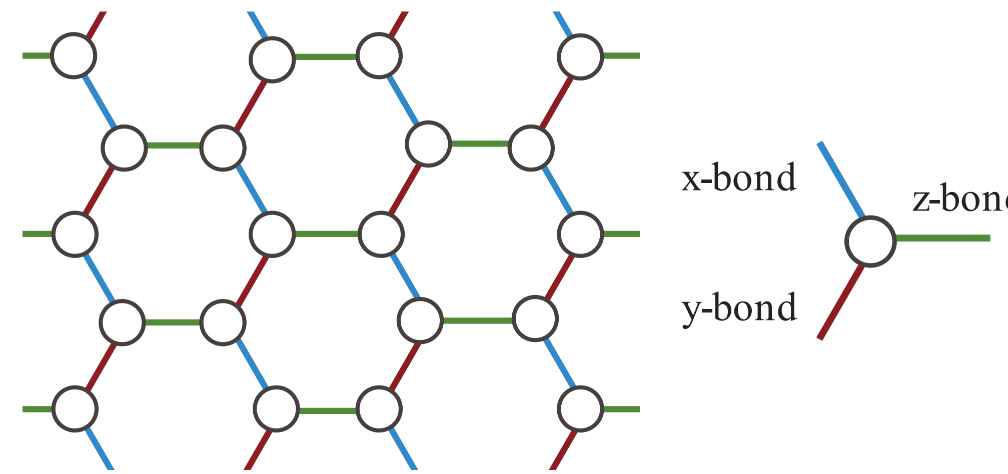
テンソルネットワーク法の表現能力

キタエフ模型 A. Kitaev, Annals of Physics 321, 2 (2006)

$$\mathcal{H} = -K \sum_{\gamma, \langle i,j \rangle_\gamma} S_i^\gamma S_j^\gamma$$

γ : ボンドの方向

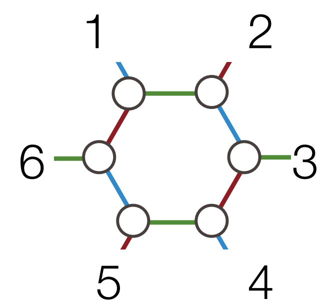
$$\left(S = \frac{1}{2}\right)$$



保存量：フラックス演算子

$$W_p = \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z$$

$$[\mathcal{H}, W_p] = 0, [W_p, W'_p] = 0$$



固有値は±1

- 基底状態はVortex free: $^\forall p, W_p = 1$

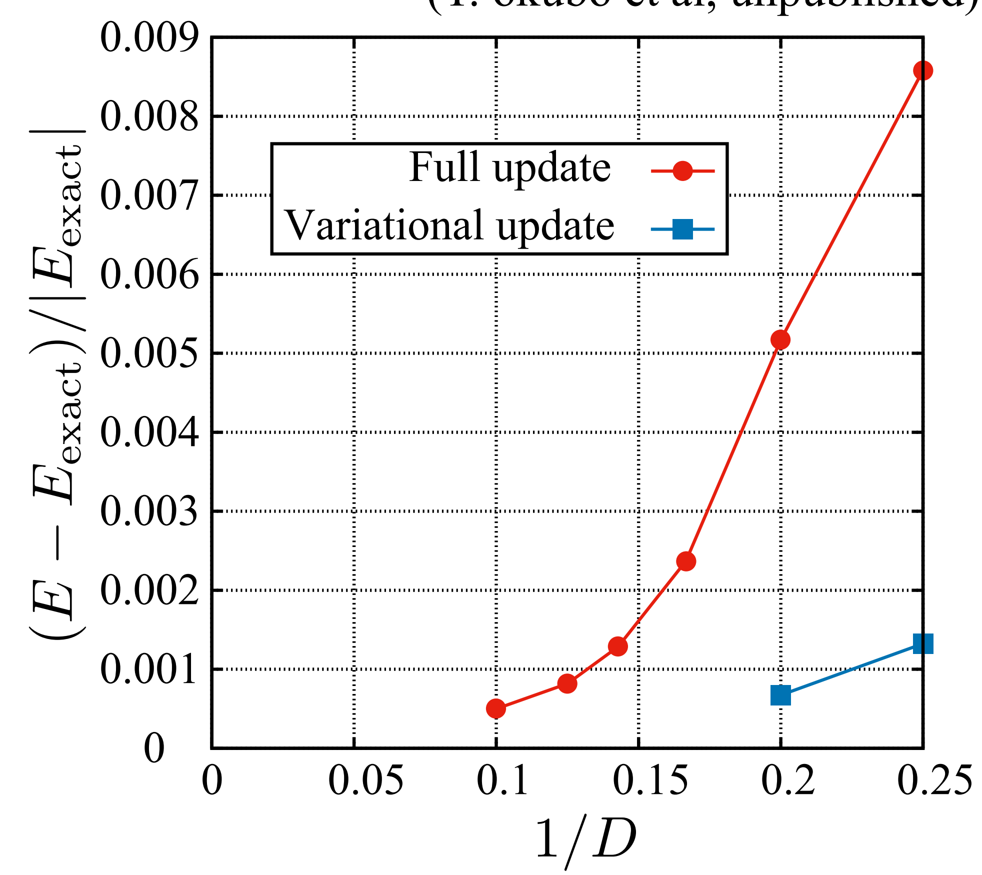
p: plaquette

量子スピン液体

無限系のテンソルネットワークシミュレーション

iTPSで得られたエネルギーの誤差

(T. okubo et al, unpublished)



エネルギー誤差0.1%程度は容易に得られる

キタエフ物質とテンソルネットワークでの計算例

T. Okubo, K. Shinjo, Y. Yamaji et al, Phys. Rev. B **96**, 054434 (2017).

強いスピン軌道相互作用 → 実際の物質でキタエフ相互作用が実現

G.Jackeli, et al., PRL 102, 017205 (2009)

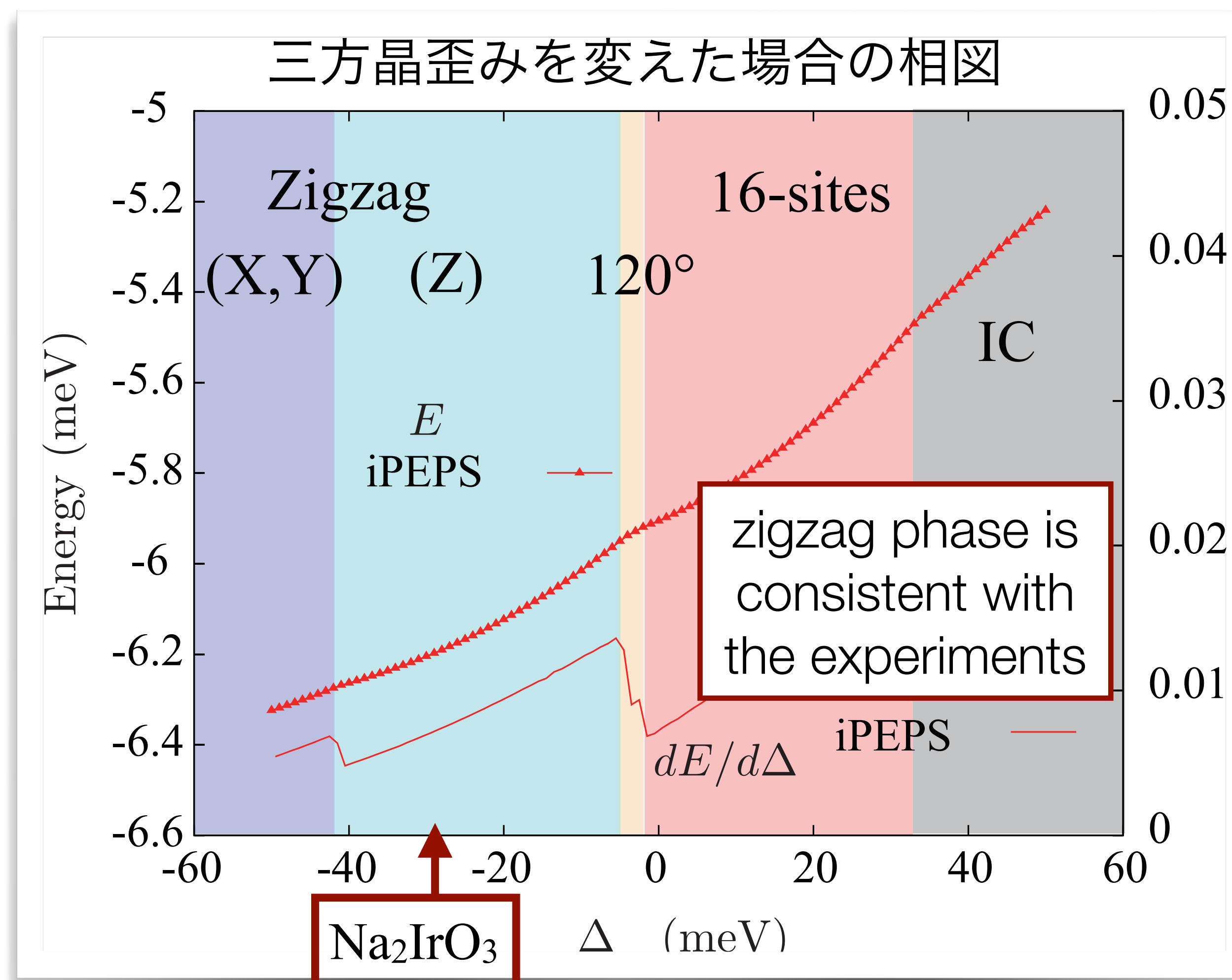
Na_2IrO_3の第一原理スピンハミルトニアン

(Y. Yamaji et al. Phys. Rev. Lett. **113**, 107201(2014))

Kitaev + Heisenberg + Off-diagonal interactions
+
2nd and 3rd nearest neighbor interactions

→ この物質の基底状態をiTPSを使って明らかに

- キタエフ相互作用以外の相互作用の影響で、基底状態はスピン液体ではなく磁気秩序状態
- その場合、iTPSでの計算は、第一原理ハミルトニアンの基底状態を正しく実現できる



関連模型への応用

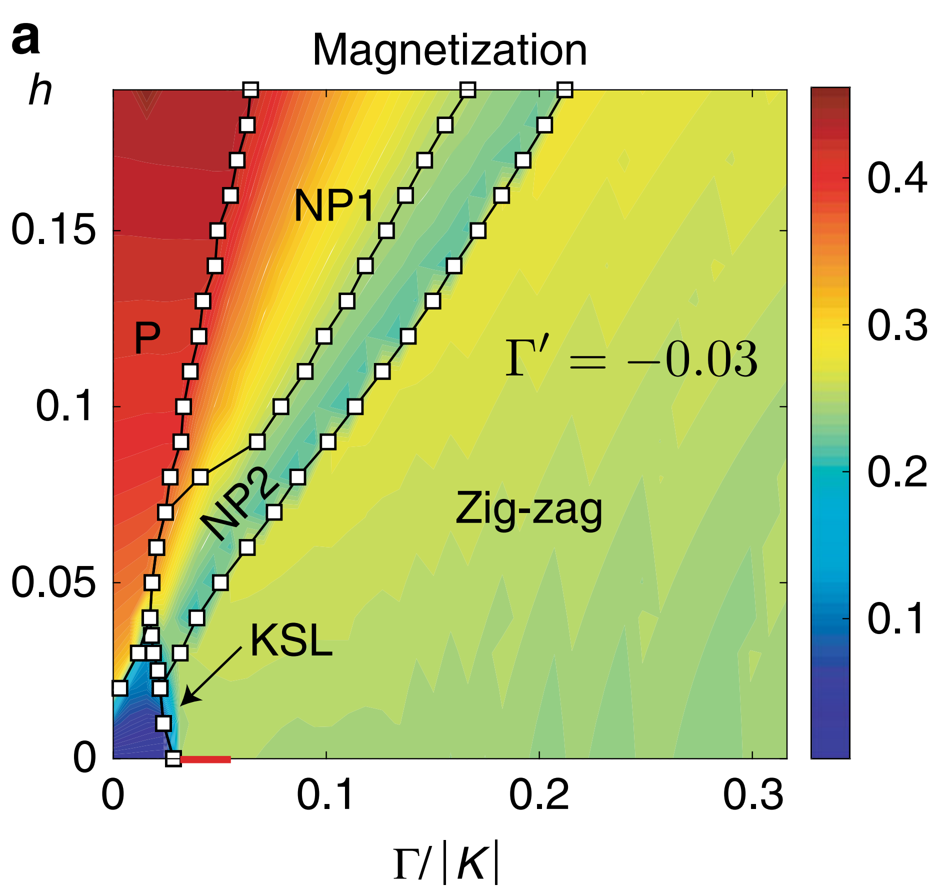
H.-Y. Lee, R. Kanako, et al, Nat. Commun. **11**, 1639 (2020).
H.-Y. Lee, R. Kanako, T.O. and N. Kawashima, PRB **101**, 035140 (2020)

$K\Gamma\Gamma'$ **model: α-RuCl₃**の有効模型

$$\mathcal{H}_{ij}^{z} = K S_i^z S_j^z + \Gamma(S_i^x S_j^y + S_i^y S_j^x) + \Gamma'(S_i^z(S_j^x + S_j^y) + (S_i^x + S_i^y)S_j^z)$$

キタエフスピン液体 “相” の決定と
新しい非磁性相（ネマチック相）の発見

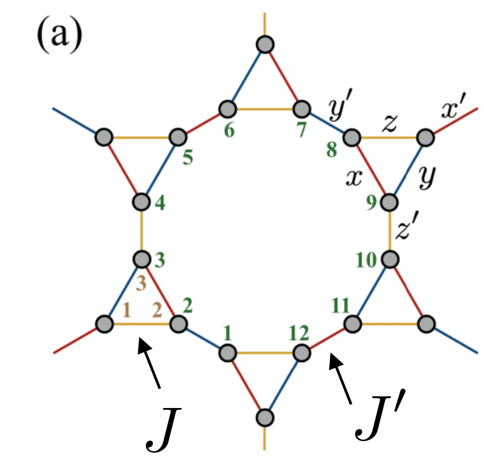
磁場中基底状態相図



スター格子キタエフ模型

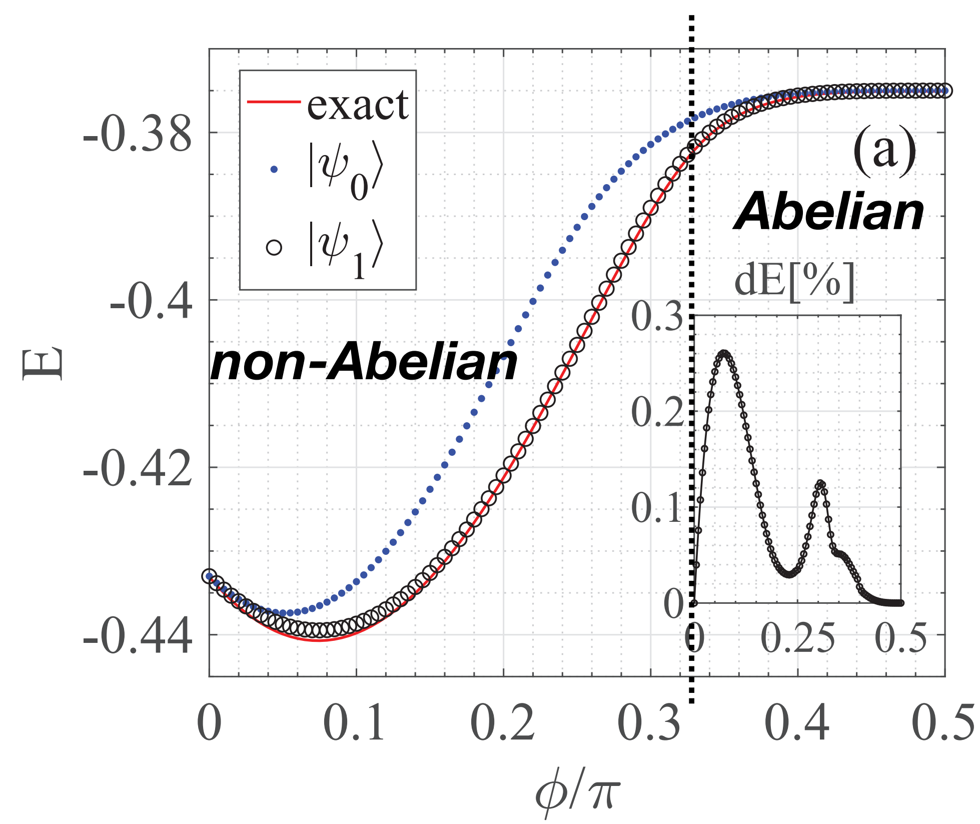
TPS表現で
カイラルスピン液体を
高精度に近似

スター格子



$J/J' = \tan\phi$

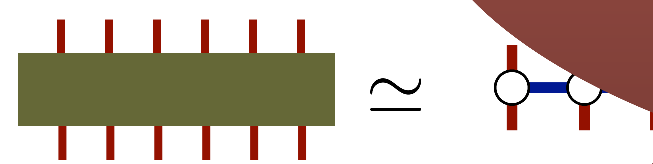
エネルギー

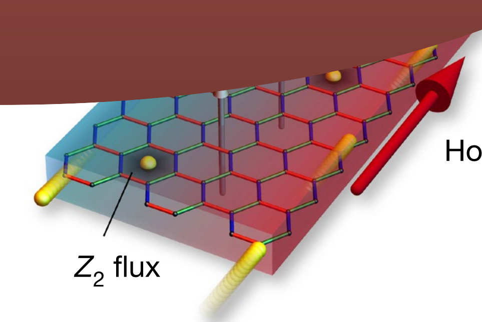


最近の発展：有限温度計算

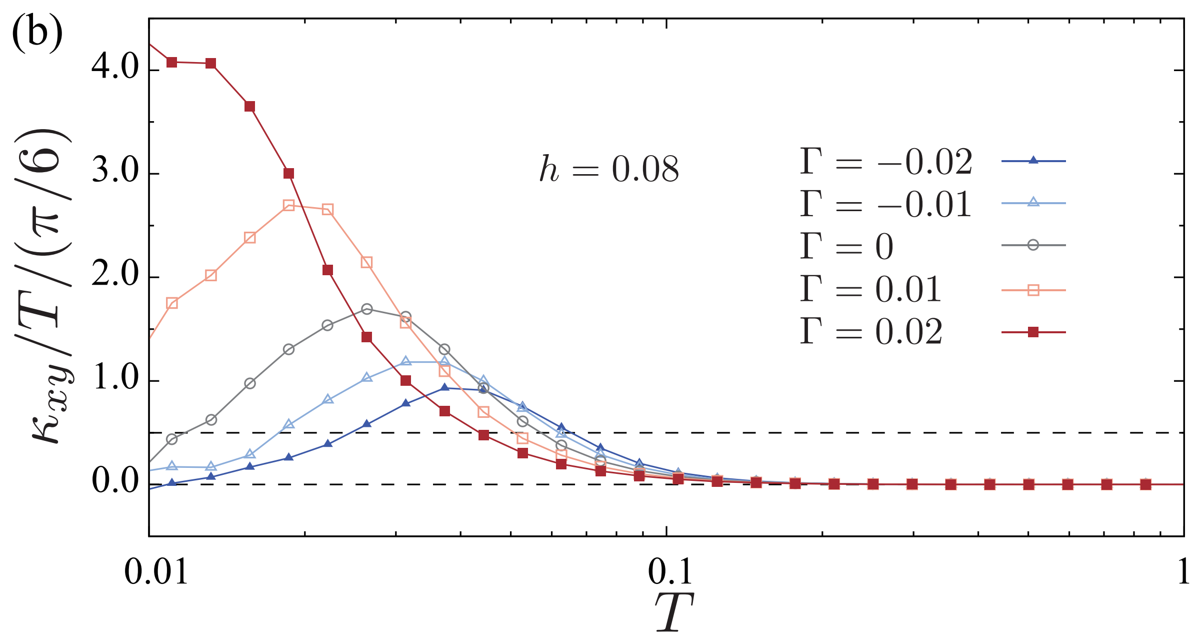
テンソルネットワーク計算は、現時点でも非常に強力

有限温度の密度行列をテンソルネ

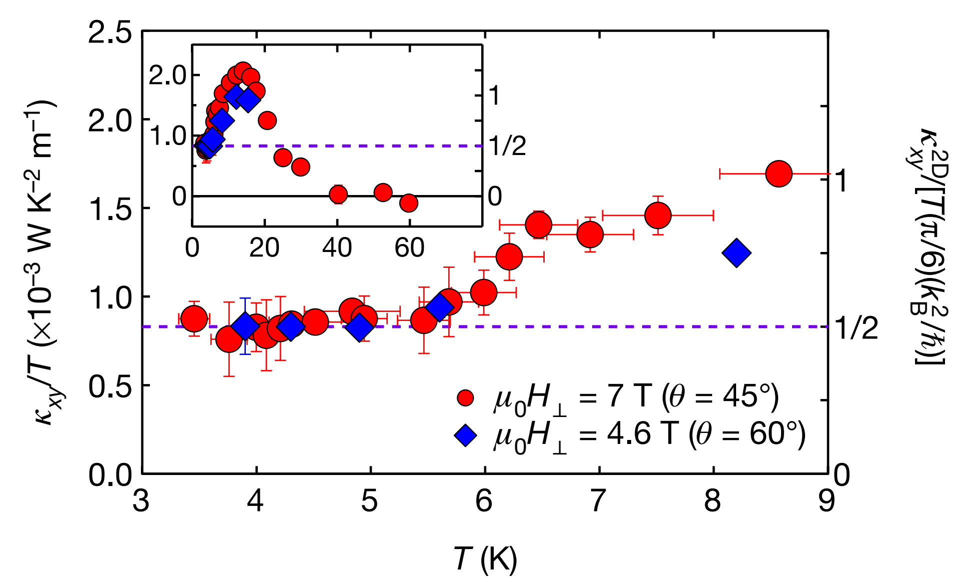
$$\rho(\beta) = e^{-\beta\mathcal{H}} =$$ 



キタエフ模型での熱ホール伝導度の計算



T. Okubo, J. Nasu, T. Misawa, Y. Motome, in preparation.
大久保毅, 固体物理 Vol. 57, No.11, 633 (2022).



Y. Kasahara *et al.*, Nature **559**, 227 (2018).

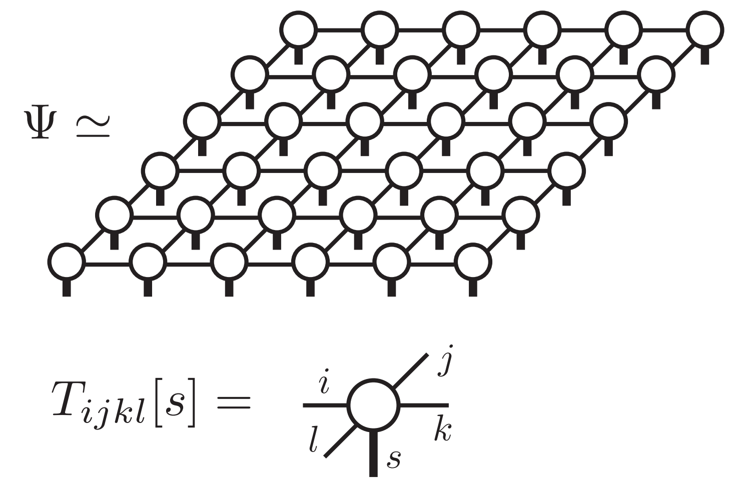
有限温度では、極低温でキタエフスピン液体に期待される半整数量子化値よりも大きな熱ホール伝導度

コンテンツ

- はじめに
    - テンソルとテンソルネットワーク
    - 量子状態の表現と古典計算の困難
    - テンソルネットワークの基礎
- 量子状態の情報圧縮
    - テンソルネットワーク分解
    - 量子状態のエンタングルメント
- 種々のテンソルネットワークと量子エンタングルメント
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 量子物性への応用
    - 2次元無限系の計算手法
    - Kitaev模型への応用例
    - 量子コンピュータへの期待と応用例
- まとめ

量子コンピュータへの期待

テンソルネットワークを用いた古典計算は強力



エンタングルメントの大きな

量子状態

cf. スピン液体

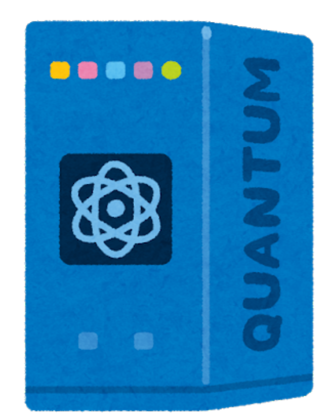
大きなテンソルが必要

（大きなボンド次元 ***D***）

「難しい問題」を解くには、莫大な古典計算機の計算リソースが必要

数百量子ビットの量子コンピュータが実現

数百粒子系の量子多体問題を古典コンピュータよりも高速・高精度に解ける可能性？



量子計算と古典計算のクロスオーバー

N. Yoshioka, T.O, Y. Suzuki, Y. Koisumi, and W. Mizukami, arXiv:2210.14109

誤り耐性量子コンピュータの場合

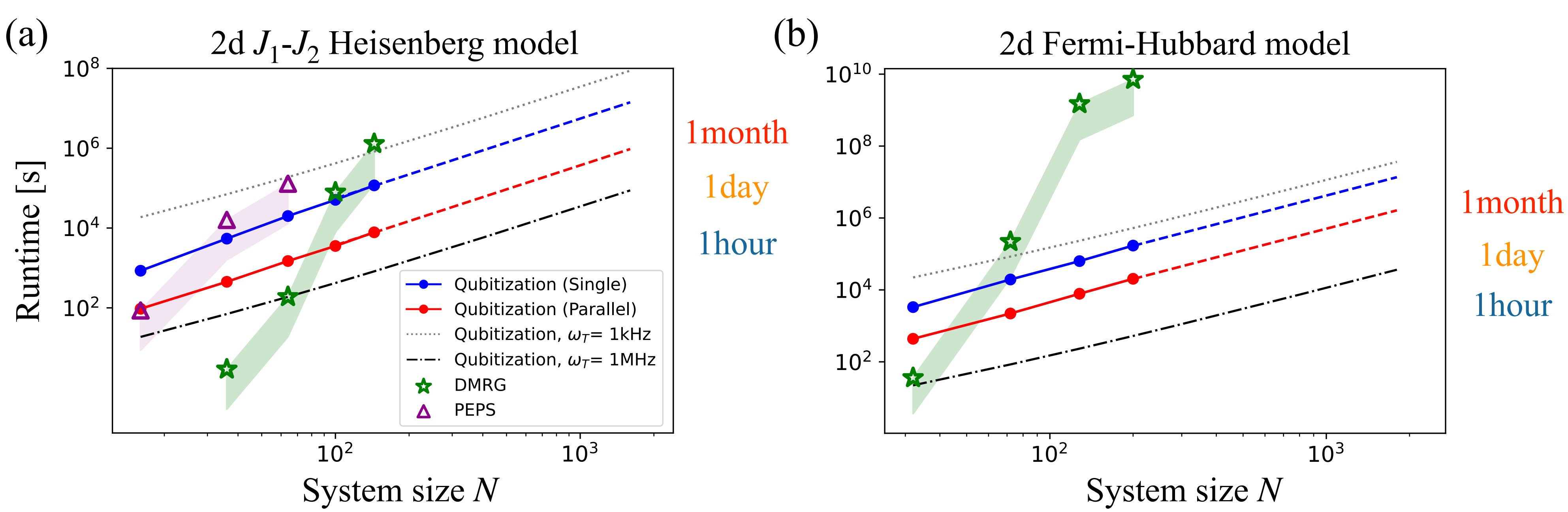
➡ 量子位相推定で、物性物理の問題を効率的に解ける場合がある

基底状態をエネルギー誤差 $\Delta E \leq 0.01$ で求めるための計算時間

・10×10 ハイゼンベルグ模型：1時間程度

・10×10 ハバード模型：数時間程度

*Eは全エネルギー
（密度ではない）



（並進対称性がある）物性物理の問題は誤り耐性量子コンピュータの良い応用例！

➡ ただし、その実現には、まだ20 - 30年程度かかる…

近未来の量子コンピュータでできること

誤り訂正のない量子コンピュータ

NISQ: Noisy Intermediate-Scale Quantum computer

- 量子ゲートの演算や測定に種々のノイズが含まれる
- そのため、量子性を保って演算できる数に制限が存在

NISQをどう量子多体問題に使うか？

一例は量子回路を試行関数とする変分法

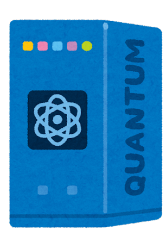
VQE: Variational Quantum Eigen solver

(A. Peruzzo, et al, Nature Communications, vol.5, 4213 (2014).)

NISQ

波動関数＝量子回路

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \quad |\Psi_{\rm in}\rangle \; \vdots \; \boxed{U(\boldsymbol{\theta})} \; \vdots$$



エネルギー

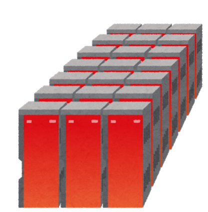
その微分

新しい $\boldsymbol{\theta}$

古典コンピュータ

変分エネルギーを低くするような

新しいパラメタθを提案



$$\theta_{\rm new} = \theta + \eta \frac{\partial E}{\partial \theta}$$

VQEを難しい量子多体問題に使えるのか？

1. 量子回路は効率の良い波動関数の表現になっているのか？
    - 量子ゲート数の制限により、厳密な波動関数の表現は不可能
    - どのようにして、波動関数の効率的な量子回路を得たら良いだろうか？
2. VQE型のアルゴリズムで古典コンピュータの計算に勝てるのか？
    - 古典コンピュータ：
        - 数百スピン系を扱うこと自体は難しくはない（cf. VMC, DMRG, PEPS/TPS)
        - 並進対称性のある量子状態では、無限系も直接取り扱える (cf. iPEPS/iTPS, iMPS)
    - **NISQ ?**

テンソルネットワーク状態が

- ターゲットとなる量子状態の良い近似になっている
- それを量子回路で表現できる

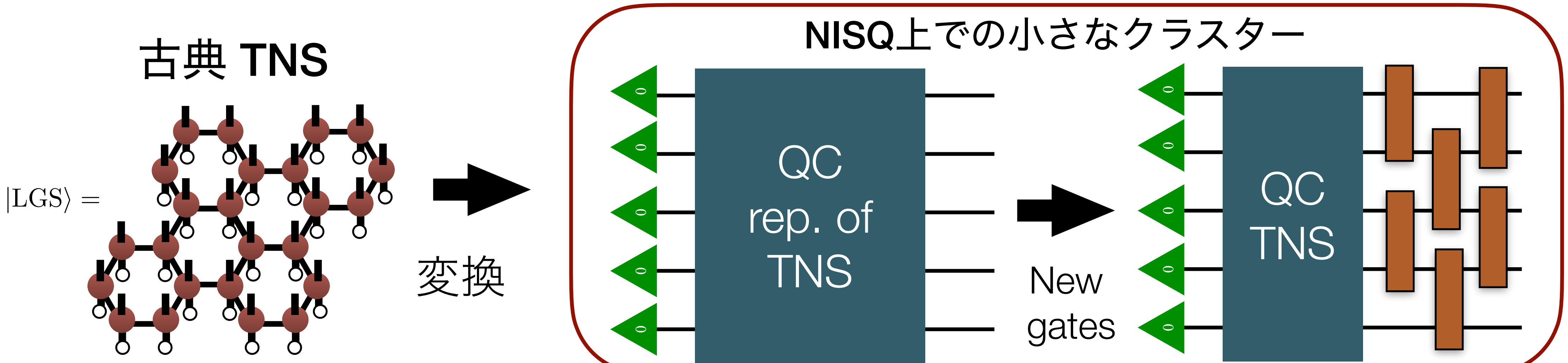
場合、NISQと組み合わせて、古典コンピュータに勝てる可能性！

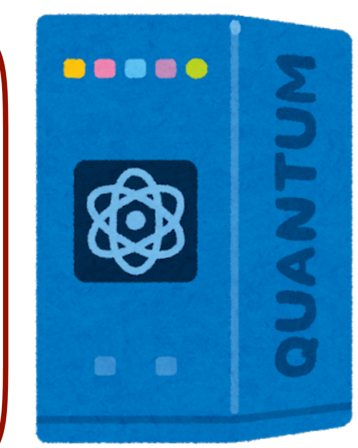
量子・古典エンタングルアルゴリズムの提案

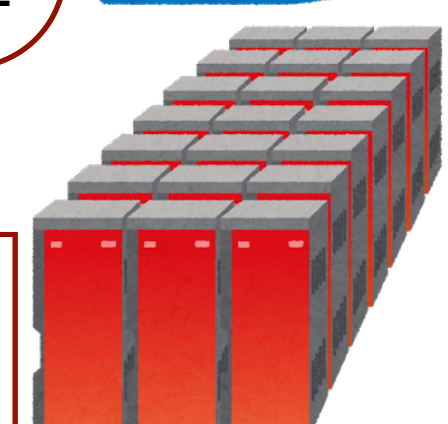
量子・古典エンタングルアルゴリズム

NISQでの計算に密接に古典（スーパー）コンピュータを利用

1. 重要な長距離の量子相関は古典的なテンソルネットワークで表現
2. その精度を向上するために、短距離の相関に相当する量子回路を追加し、NISQ は、（小さな系で）追加量子回路だけを最適化
3. 最適化された回路を大きな系（無限系）に拡大し、その物性を古典コンピュータで評価







＊ポイント

最適化では精度が要求されるが
物性評価では誤差が許容される

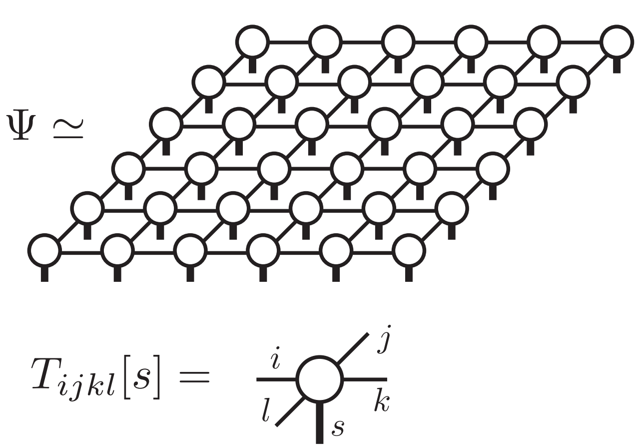
スーパーコンピュータを用いて
大きな系の物性を評価

量子古典エンタングルアルゴリズムの詳細

1. 長距離の量子相関はテンソルネットワークで表現

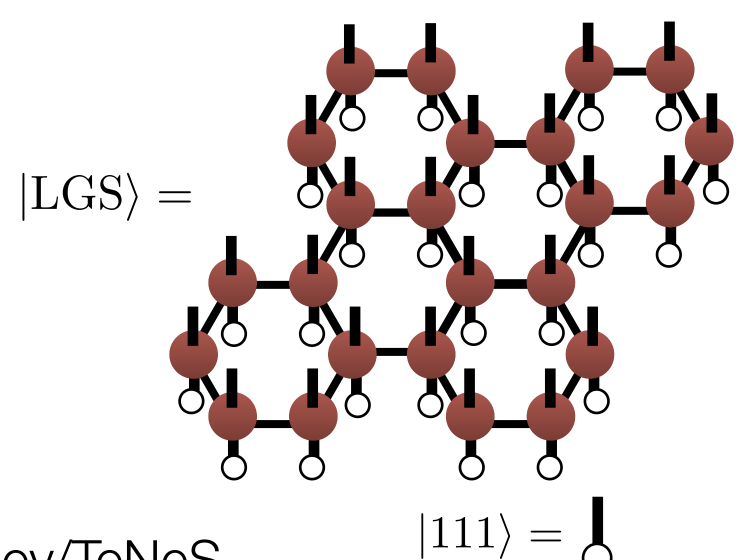
最初のステップとして、長距離の量子相関を適切に捉えた
テンソルネットワーク状態を準備する

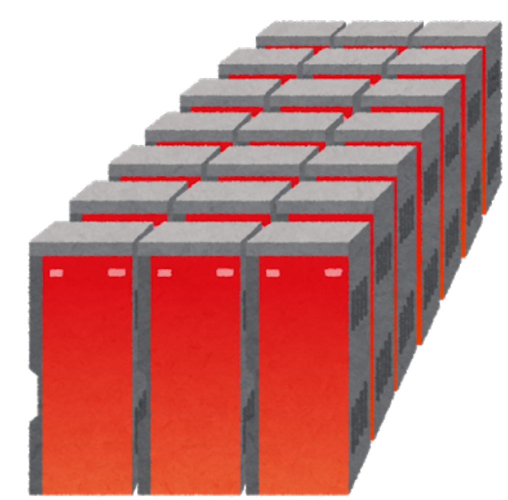
- 量子多体問題の場合、面積則が期待できるため、MERA, PEPSなどで、適切な量子状態が準備可能だと期待される。
- 一般には、そのようなテンソルネットワーク状態は数値計算で準備可能
- 事前知識を用いれば、手でそのようなテンソルネットワークが準備できる場合もある（この例を後で紹介）



TeNeS

https://github.com/issp-center-dev/TeNeS





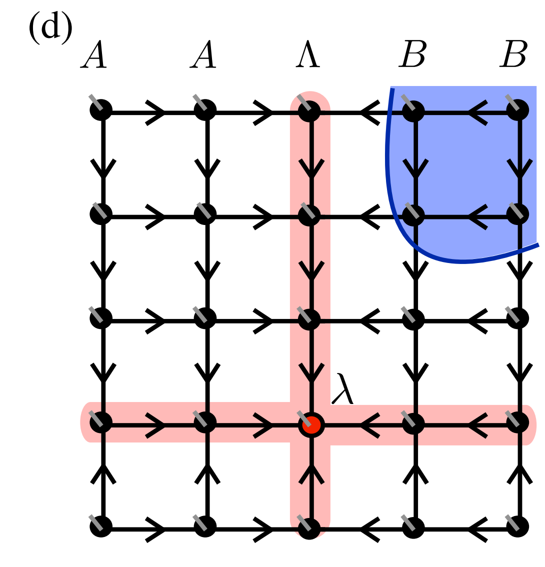
スパコンでの最適化

量子古典エンタングルアルゴリズムの詳細

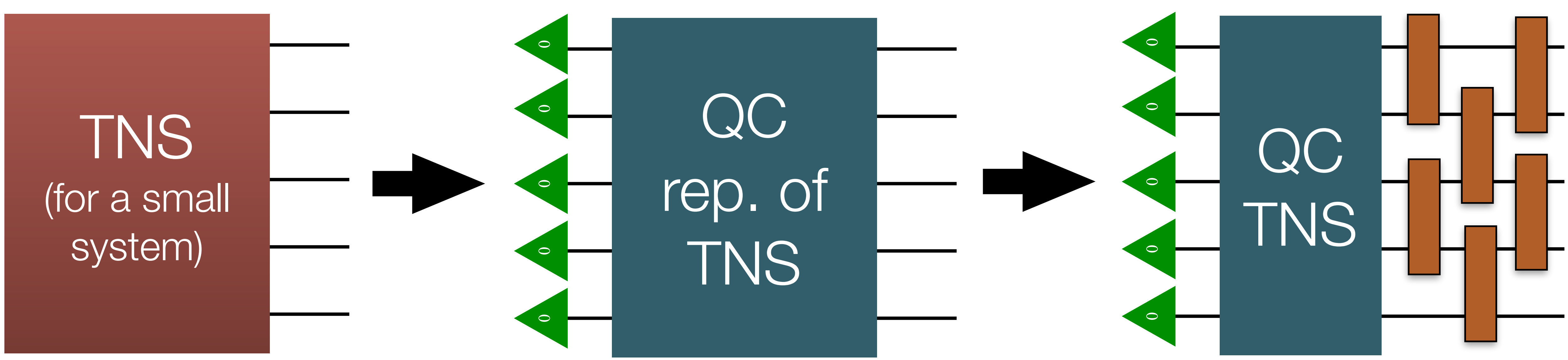
2. 精度を向上するために、短距離の相関に相当する量子回路を追加

このステップでは、準備したテンソルネットワーク（cf. 無限系）よりも小さなクラスターを考える。

- テンソルネットワークを isometric TNS に変形
- それを量子回路で表す
  - この二段階では近似が必要な場合もある
- さらにパラメタ付きの量子回路を追加



Isometric TN
M.P. Zaletel et al,
PRL **124**, 037201 (2020)

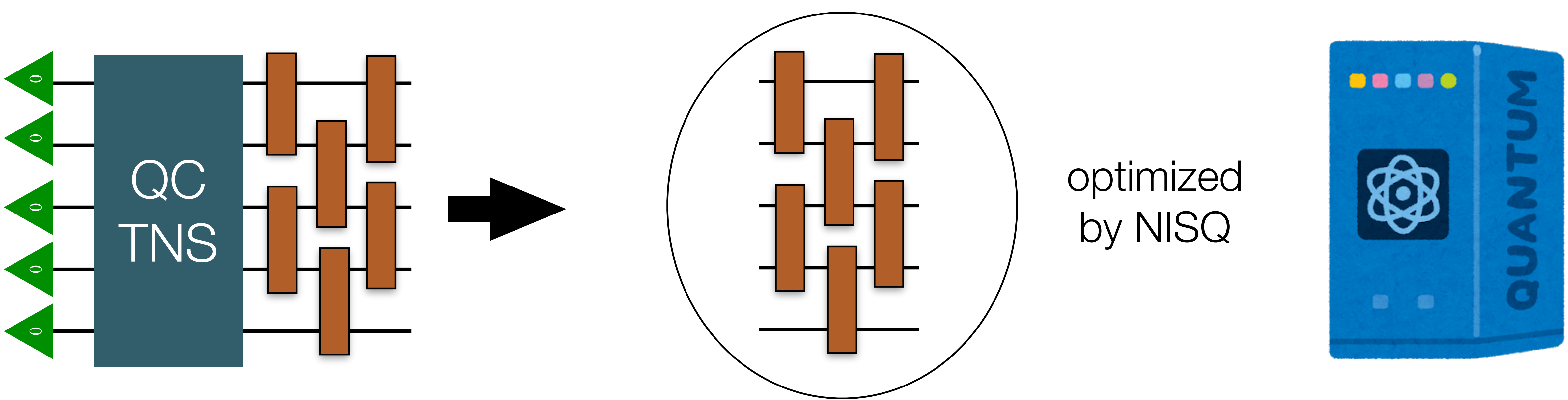


量子古典エンタングルアルゴリズムの詳細

3. NISQを用いて、小さなクラスターの追加回路パラメタを最適化

このステップでは、エネルギー（や任意のコスト関数）を最小化するように、追加回路のパラメタを最適化する

- 元のテンソルネットワーク状態の部分は固定する
  - 小さい系を考えているので、TNS部分を最適化すると長距離相関の構造が壊れる可能性
- 一方で、追加回路は短距離相関を表すと考えているので、小さい系でも適切に最適化できると期待



量子古典エンタングルアルゴリズムの詳細

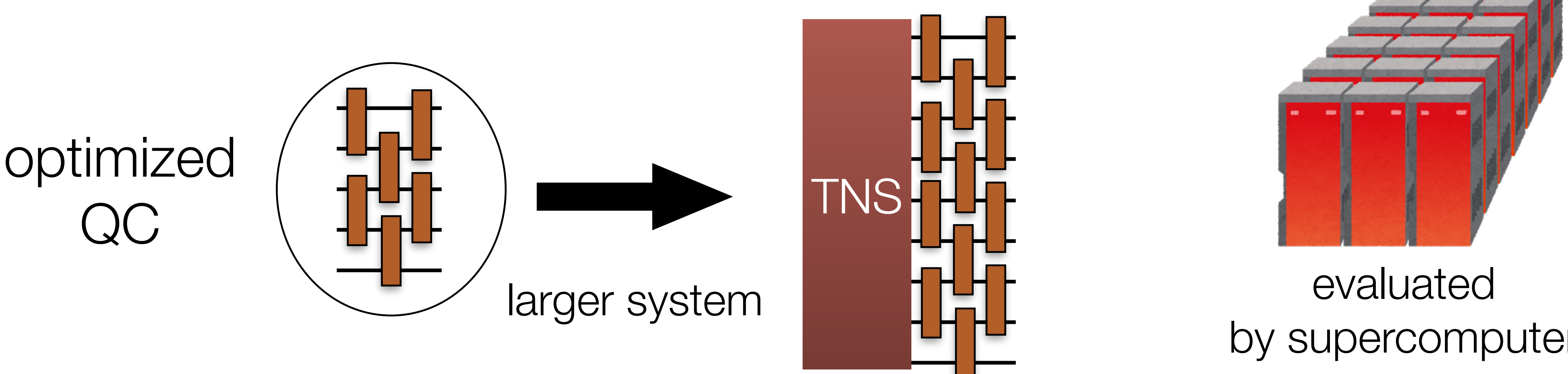
4. 最適化された状態を大きな系に拡張して、古典コンピュータで解析

最後に、並進対称性を利用して、系を拡張し、新しいテンソルネットワーク状態を構成する

- 大きな系は、最適化された回路のコピーで構成される
- iTPSのように、無限系を考えることもできる

新しいTNSのボンド次元は初期のTNSよりも大きい

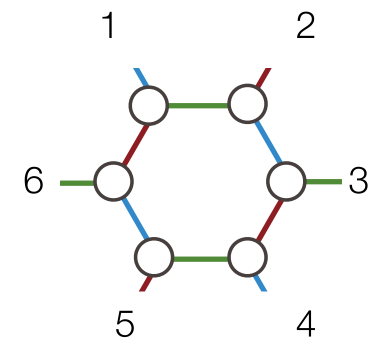
- このTNSを直接古典コンピュータで最適化することはできない
- 一方で、物理量などは、近似的な縮約、モンテカルロサンプリングなどで評価可能



キタエフスピン液体での検証

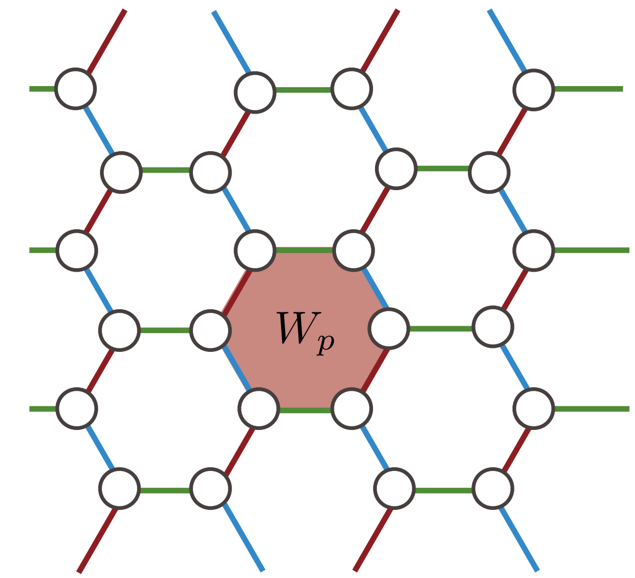
例：キタエフスピン液体とテンソルネットワーク

フラックス演算子： $W_p = \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z$



- 固有値は±1
- ハミルトニアンと可換＝保存量
- 異なる場所のフラックスも可換

$$[\mathcal{H}, W_p] = 0, [W_p, W_{p'}] = 0$$



キタエフスピン液体は、全ての六角形でフラックスが1

"Vortex free"

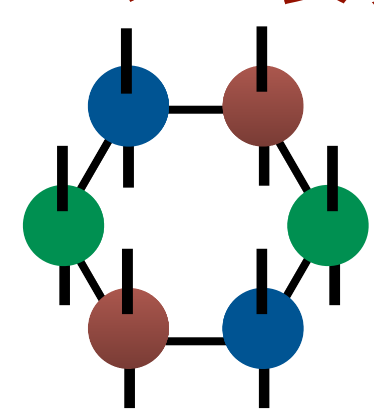
$W_i = 1$への射影演算子？：

$$\boxed{P_{i,+} = \frac{I + W_i}{2}}$$

この演算子は *D=2* のテンソルネットワークで表現できる

$$P_{i,+} = \mathrm{Tr}\ (O_1^x O_2^y O_3^z O_4^x O_5^y O_6^z)$$

$$O_i^\alpha = \frac{1}{2^{1/6}} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & \sigma_i^\alpha \end{pmatrix}$$

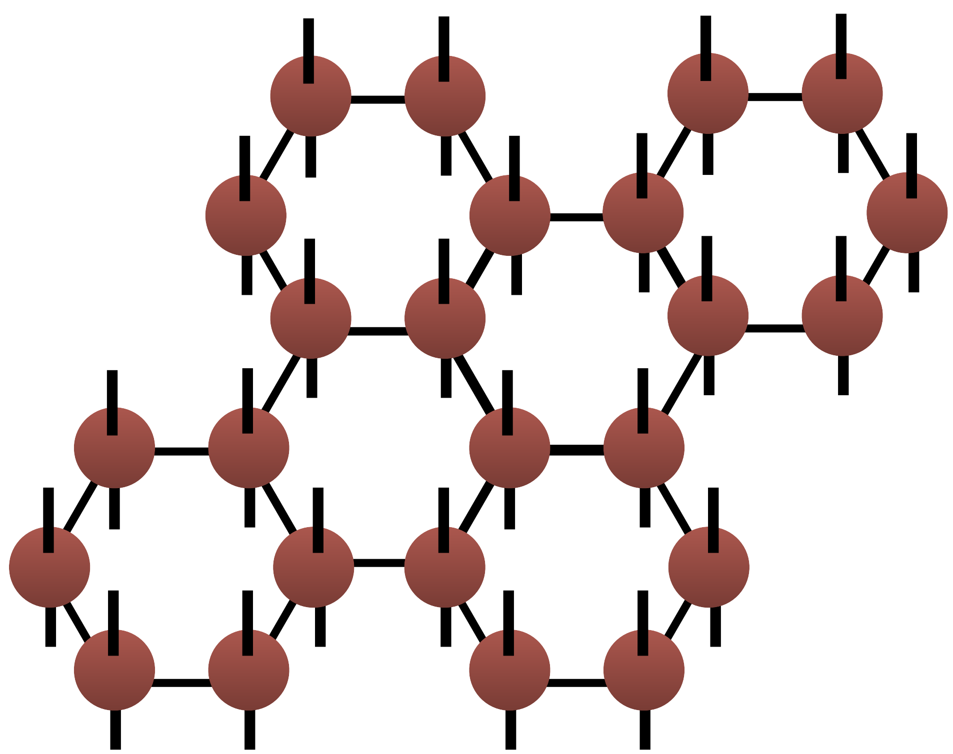


Vortex free への射影演算子

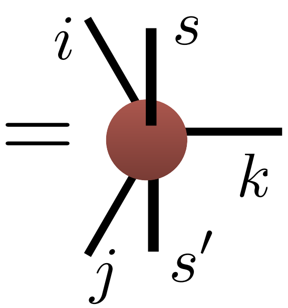
H.-Y. Lee, R. Kanako, T.O. and N. Kawashima, PRL **123**, 087203 (2019)

Vortex free 状態への射影演算子：$P = \prod_p \frac{I + W_p}{2}$

"loop gas" 演算子で記述できる

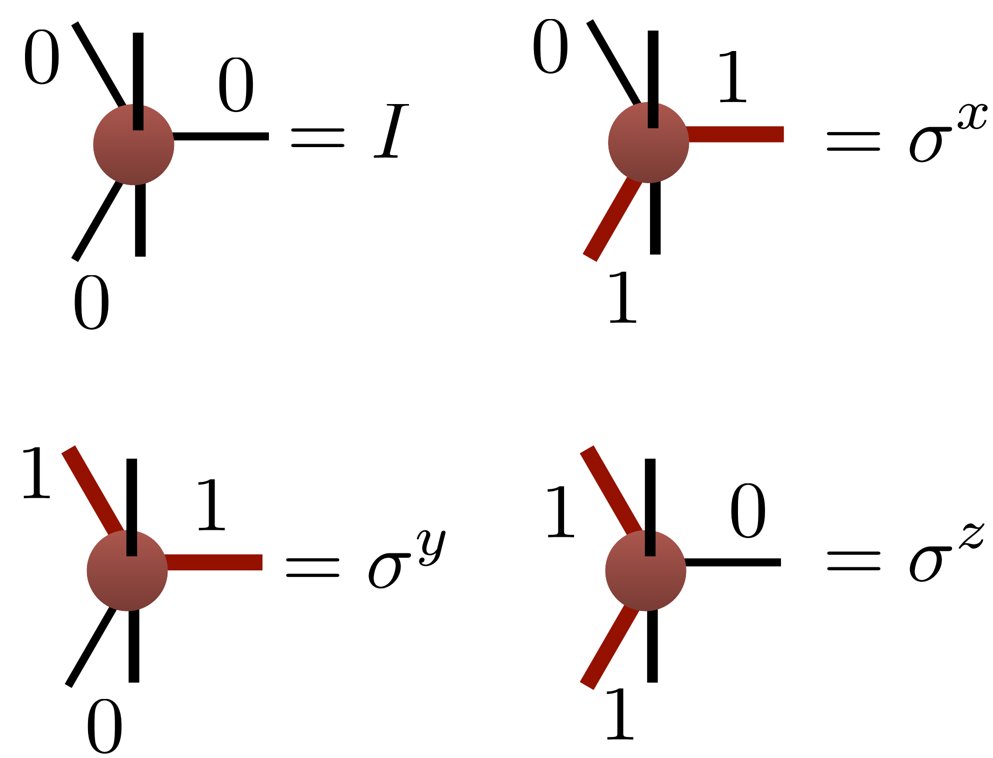
$P \propto$ 

(D=2, TPO)

$Q^{ss'}_{ijk} =$ 

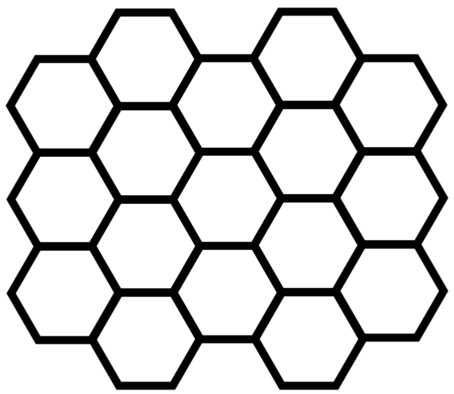
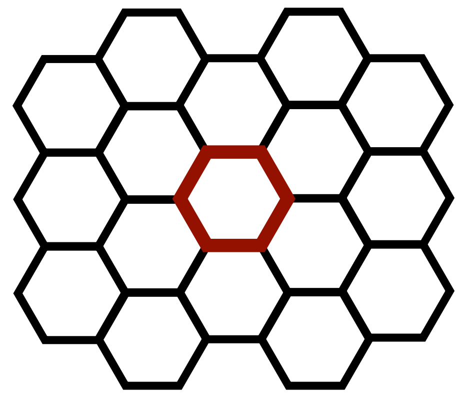
$i, j, k = 0, 1$

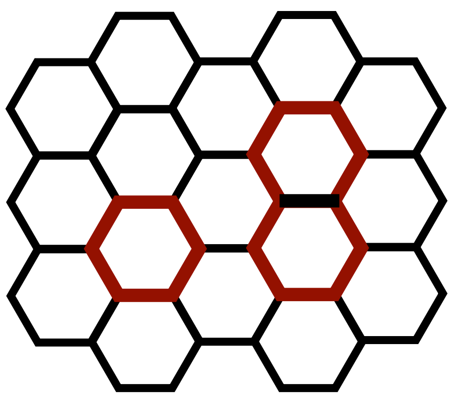
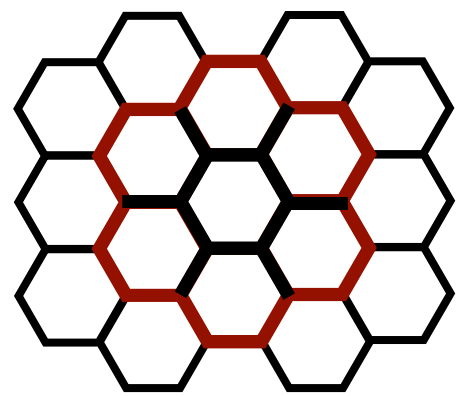
Non zero elements:

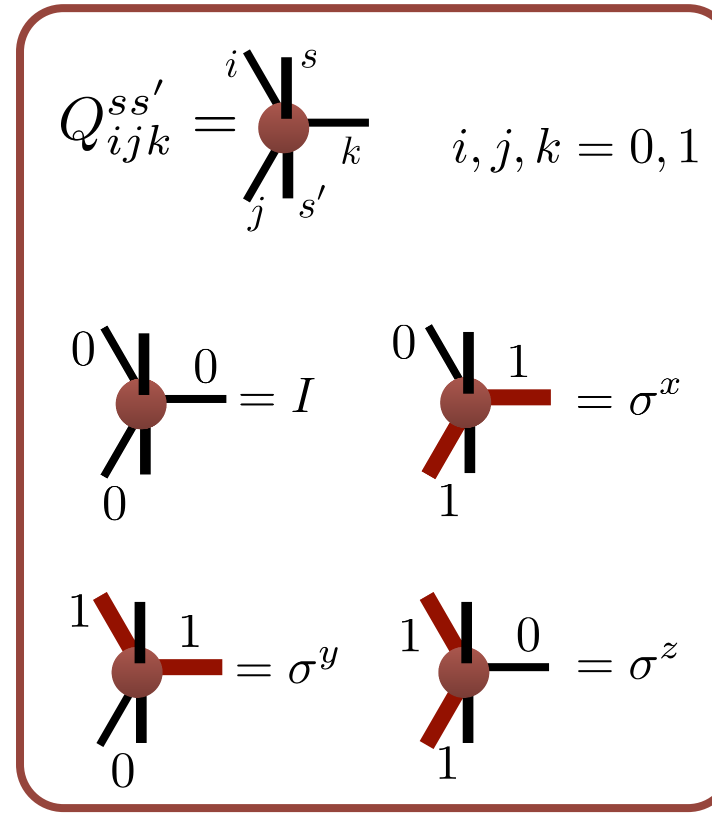


演算子のループ構造

H.-Y. Lee, R. Kanako, T.O. and N. Kawashima, PRL **123**, 087203 (2019)

$\mathrm{tTr} \prod Q =$  $+$ 

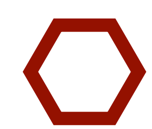
$+$  $+$  $+ \dots$

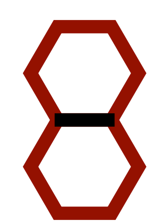


$\boxed{\text{全ての閉じたループの和！}}$

$$= \prod_p (I + W_p) \;\; = N_G P$$

$N_G = 2^{N_p}$:# of graphs

注:  $= W_p$

 $= W_p W'_p$

$\dots$

Loop gas state (LGS) : ほぼキタエフスピン液体

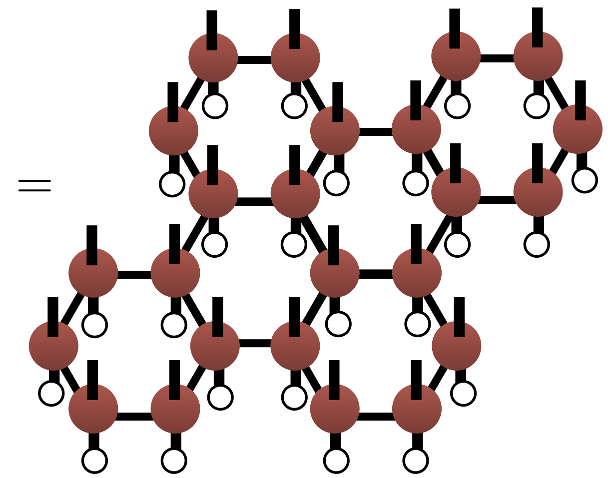
H.-Y. Lee, R. Kanako, T.O. and N. Kawashima, PRL **123**, 087203 (2019)

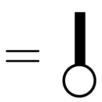
等方的なキタエフ模型に対応する単純なvortex free状態

$$|\mathrm{LGS}\rangle = \hat{Q}_{LG} \underline{\prod_i \otimes |111\rangle_i}$$

(1,1,1) 方向に揃った強磁性状態

$|\mathrm{LGS}\rangle =$



D=2, iTPS $|111\rangle =$ 

$$\langle 111|\sigma^\gamma|111\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

対称性：

Q と |111>の対称性よりLGSは

- 格子の並進
- C_6 格子の回転（+ スピン回転）
- 反転＋時間反転

に関して対称

磁性：

Vortex free 条件により、LGS は必ず非磁性

臨界性：

波動関数の内積＝2d イジングの臨界普遍性を持つ分配関数と一致

LGSはキタエフスピン液体と定性的に同じ状態！

＊重要な長距離の量子相関はLGSだけで記述できている

局所励起による系統的な改善

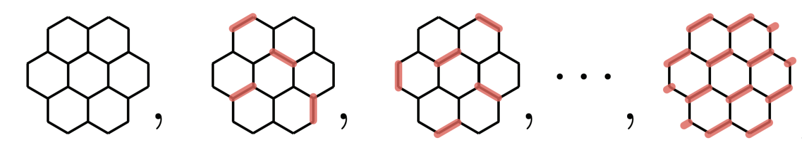
n次のstring gas state (SGS)

(H.-Y. Lee, R. Kanako, T.O. and N. Kawashima, PRL **123**, 087203 (2019))

$$|\psi_n\rangle = \left[\prod_i^n \hat{R}_{DG}(\phi_i)\right]|\mathrm{LGS}\rangle$$

$\{\phi_i\}$: 変分パラメタ

$\hat{R}_{DG}$ は"局所" ダイマー励起を導入



— : local dimer $S_i^\gamma S_j^\gamma$

ϕ_i determines density of the dimers

- $|\psi_n\rangle$ は $D = 2^n$ iTPS.

	$\|\psi_0\rangle = \|\mathrm{LGS}\rangle$	$\|\psi_1\rangle$	$\|\psi_2\rangle$	Exact
D	2	4	8	
# of	0	1	2	
E/J	-0.16349	-0.19643	-0.19681	-0.19682
ΔE/E_{ex}	0.17	0.002	0.0007	-

たった二つの変分パラメタで、非常に精密なエネルギーを得ることができる。

- 重要な長距離のエンタングルメントは（単純な）テンソルネットワークで表現できる。
- 短距離の相関を考えることでエネルギーは大幅に改善される。

量子・古典エンタングルアプローチが成功する可能性あり

課題

- ・LGSの量子回路表現は簡単か？
- ・NISQによる小さい系での最適化が大きな系に拡張できるか？

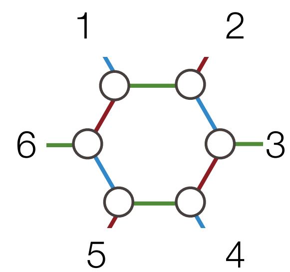
LG演算子のisometric TN 表現

LGS は演算子 Q_{LG} により生成

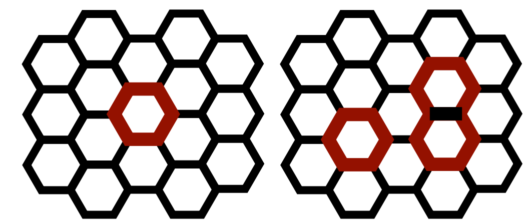
Q_{LG} ＝vortex free セクターへの射影演算子

$$|\mathrm{LGS}\rangle = \hat{Q}_{LG} \prod_i \otimes |111\rangle_i$$

全ての六角形で $W_p = \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z = 1$



$\hat{Q}_{LG} =$



$\cdots$

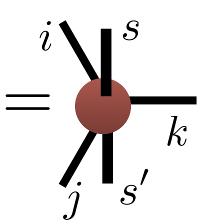
$W_i = 1$への射影演算子：

$$P_{i,+} = \frac{I + W_i}{2}$$

$$Q_{LG} \propto \prod_i P_{i,+}$$

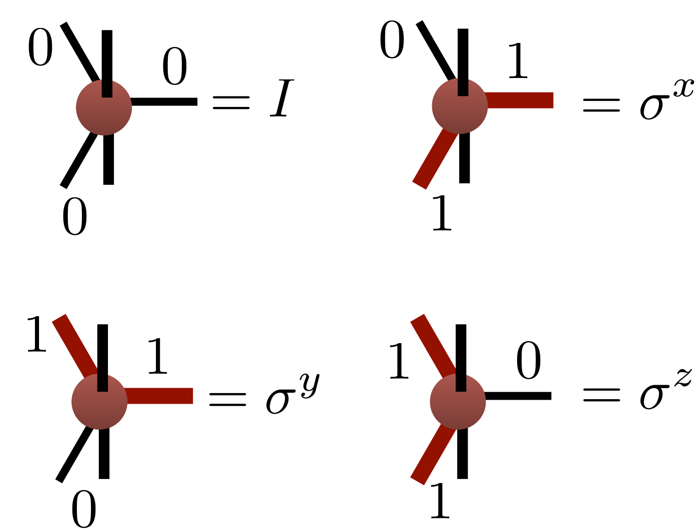
局所テンソル

$Q_{ijk}^{ss'} =$



$i, j, k = 0, 1$

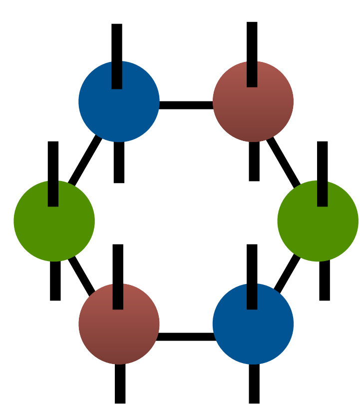
Non zero elements:



この射影演算子は D=2 のテンソルネットワークで書ける

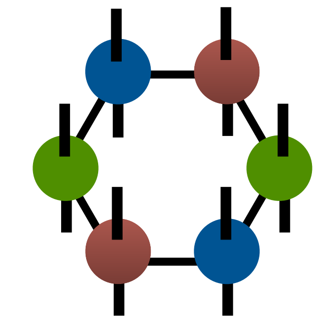
$$P_{i,+} = \mathrm{Tr}\ (O_1^x O_2^y O_3^z O_4^x O_5^y O_6^z)$$

$$O_i^\alpha = \frac{1}{2^{1/6}} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & \sigma_i^\alpha \end{pmatrix}$$



LGSの量子回路表現

$$P_{i,+} = \mathrm{Tr}\ (O_1^x O_2^y O_3^z O_4^x O_5^y O_6^z)$$

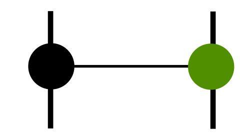


$$O_i^\alpha = \frac{1}{2^{1/6}} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & \sigma_i^\alpha \end{pmatrix}$$: このテンソルは"行列" としてみるとユニタリ

spin と virtual legに作用する行列

かつ、コントロールパウリゲートと同一

射影演算子を量子ゲートで表現可能

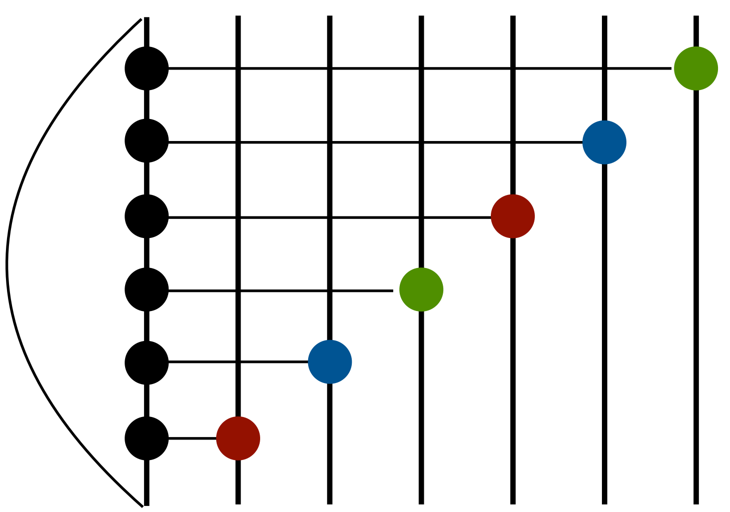


Control state

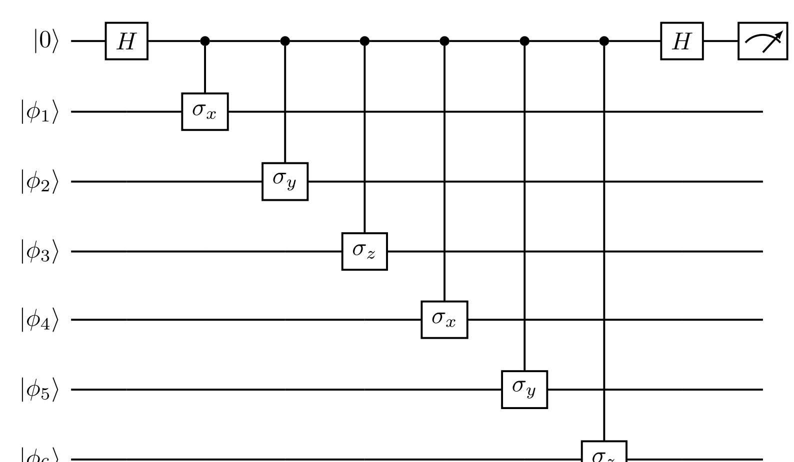
|0> → 何もしない

|1> → σを演算

注：この演算子はループ構造を持つため
単純な量子回路では表現できない



しかし、例えば、以下のような測定を導入することで量子コンピュータ上でLGSを構築できる



もし |0>が測定されれば系は

$$(I + W_p)|\phi\rangle$$

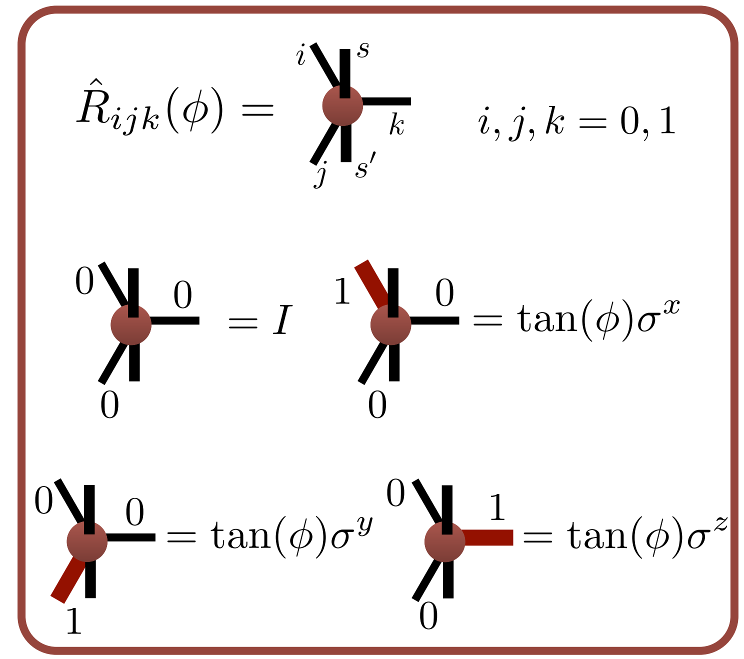
(|1>だと系は $(I - W_p)|\phi\rangle$)

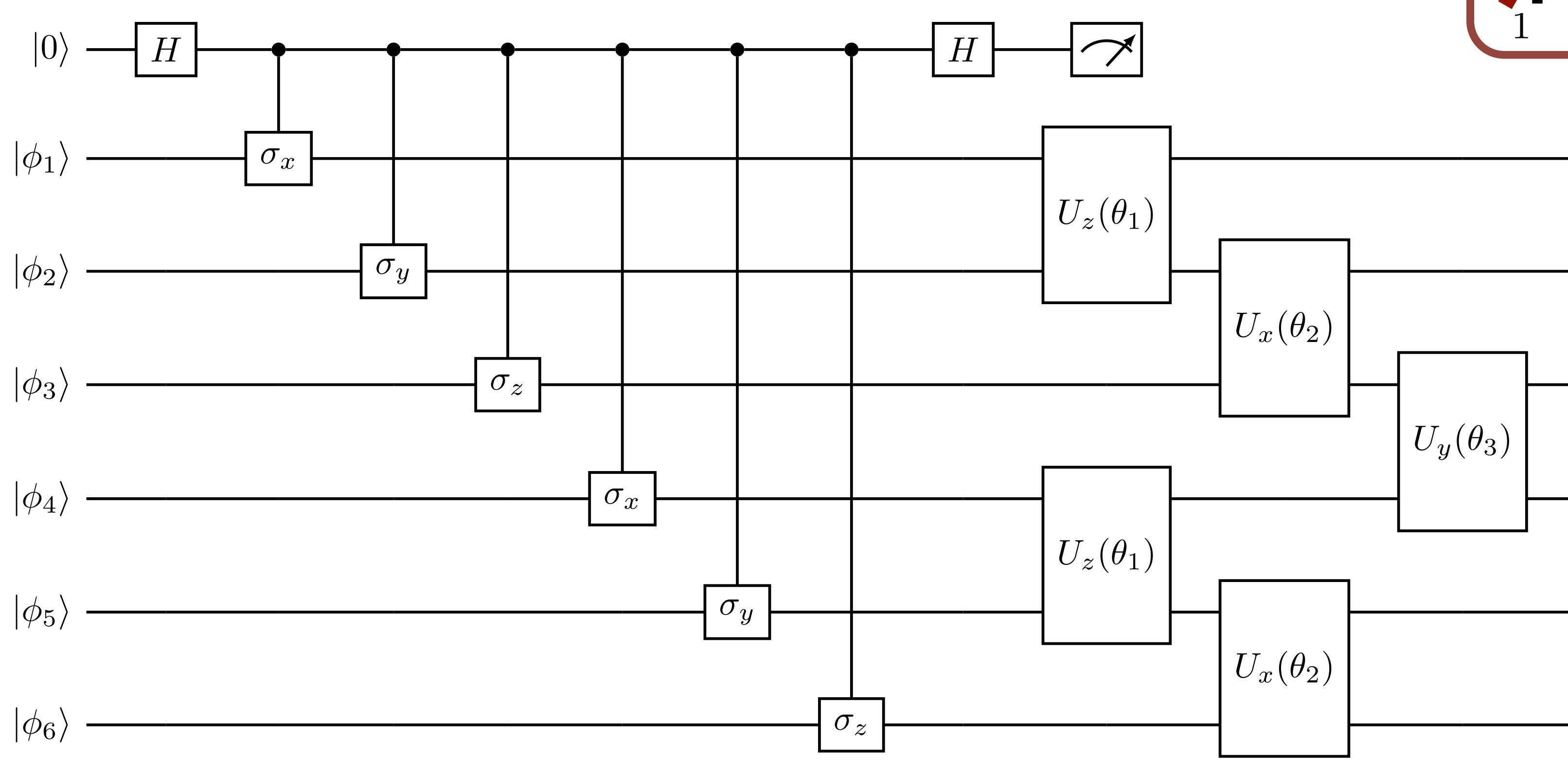
ゲートの追加による局所励起の表現

変分エネルギー向上のため、ユニタリ演算子をかける

$$U_\gamma(\theta) \equiv \exp\left[-i\frac{\theta}{2}\sigma_i^\gamma\sigma_j^\gamma\right]$$
$$= \cos\frac{\theta}{2} - i\sin\frac{\theta}{2}\sigma_i^\gamma\sigma_j^\gamma$$

- この演算子はフラックス演算子と可換 → フラックスは変えない
- 一方で、ハミルトニアンとは非可換 → エネルギーは変わる
- 角度が純虚数の場合にはDG 演算子と酷似した構造 →





$$U_\gamma(\theta) \equiv \exp\left[-i\frac{\theta}{2}\sigma_i^\gamma\sigma_j^\gamma\right]$$
$$= \cos\frac{\theta}{2} - i\sin\frac{\theta}{2}\sigma_i^\gamma\sigma_j^\gamma$$

無限系での最適化

簡単のため、単層かつ対称的

$$\theta_x = \theta_y = \theta_z = \theta$$

- 残念ながら、ユニタリゲートは全ての角度でエネルギーを改善しない
  - 二層を考えても、改善はない
- 仮に、DG演算子で純虚数に対応するパラメタを取ると、その場合もエネルギーは（ほぼ）改善しない

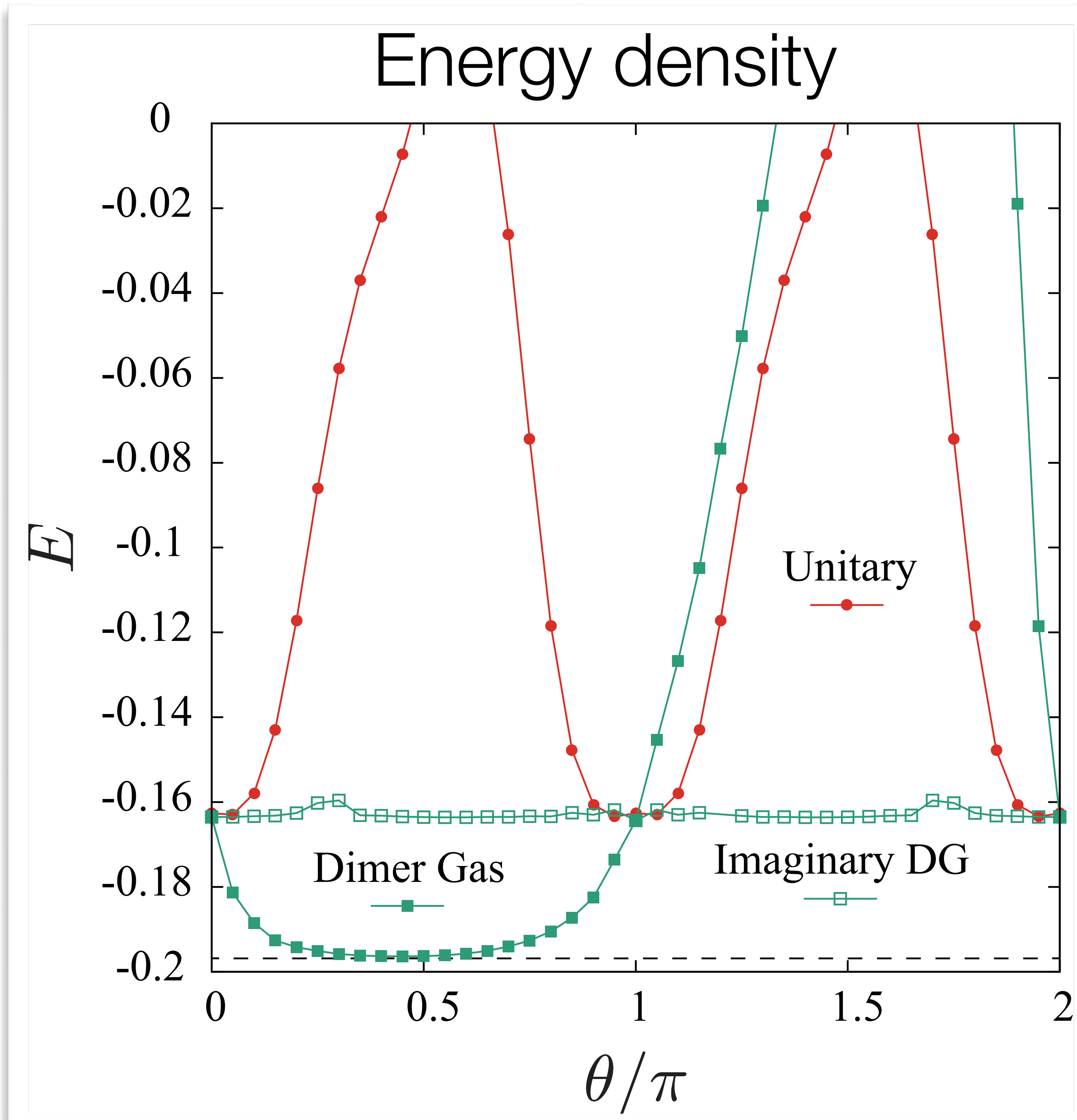
ユニタリ性は局所励起を大幅に制限

エネルギーの改善には

・多層にしてパラメタ増

・対称性を崩す

が必要？



* 注：今のユニタリゲートは時間発展演算子のSzuki-Trotter decomposition になっている

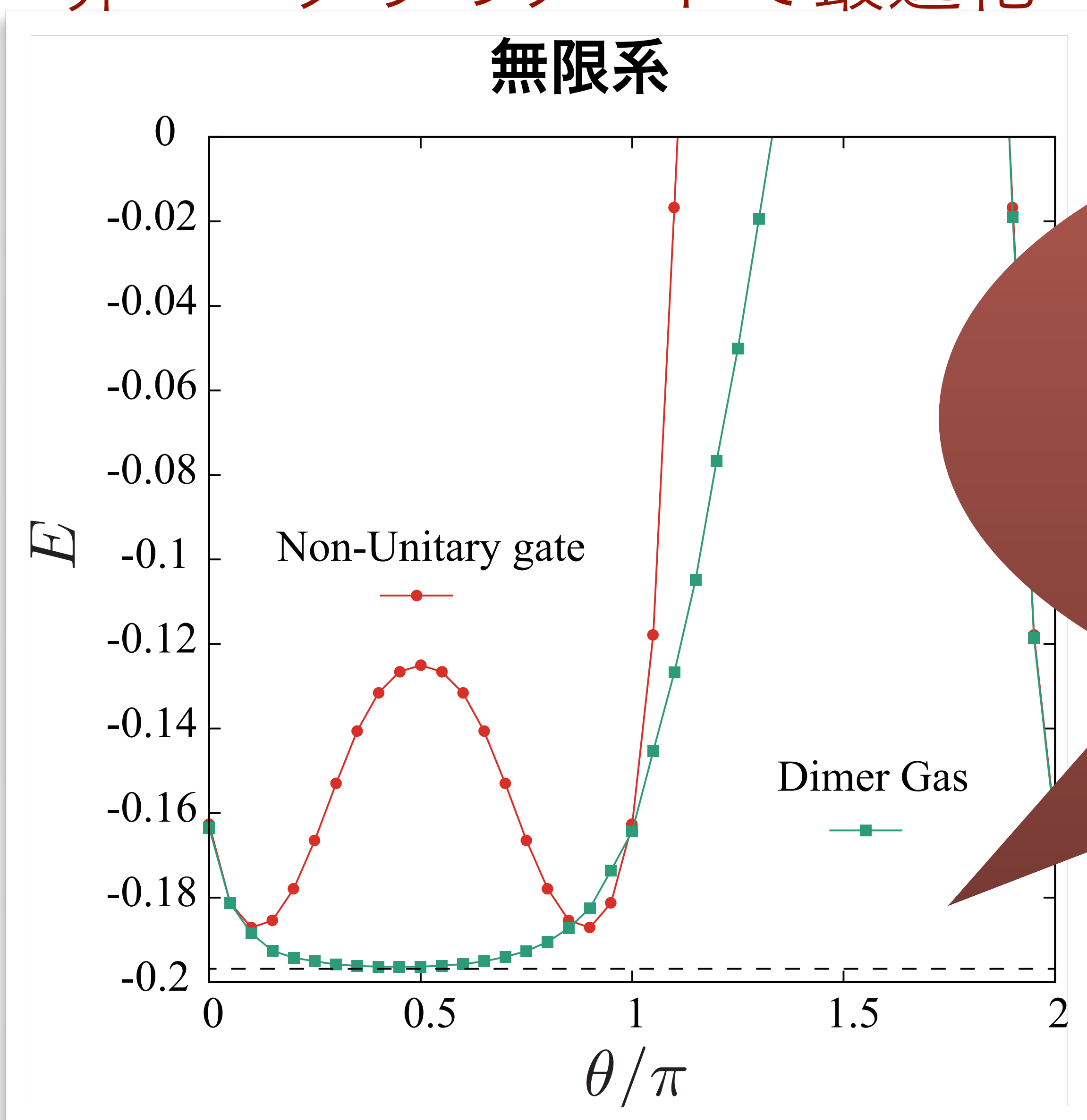
ユニタリ性を外した場合の最適化

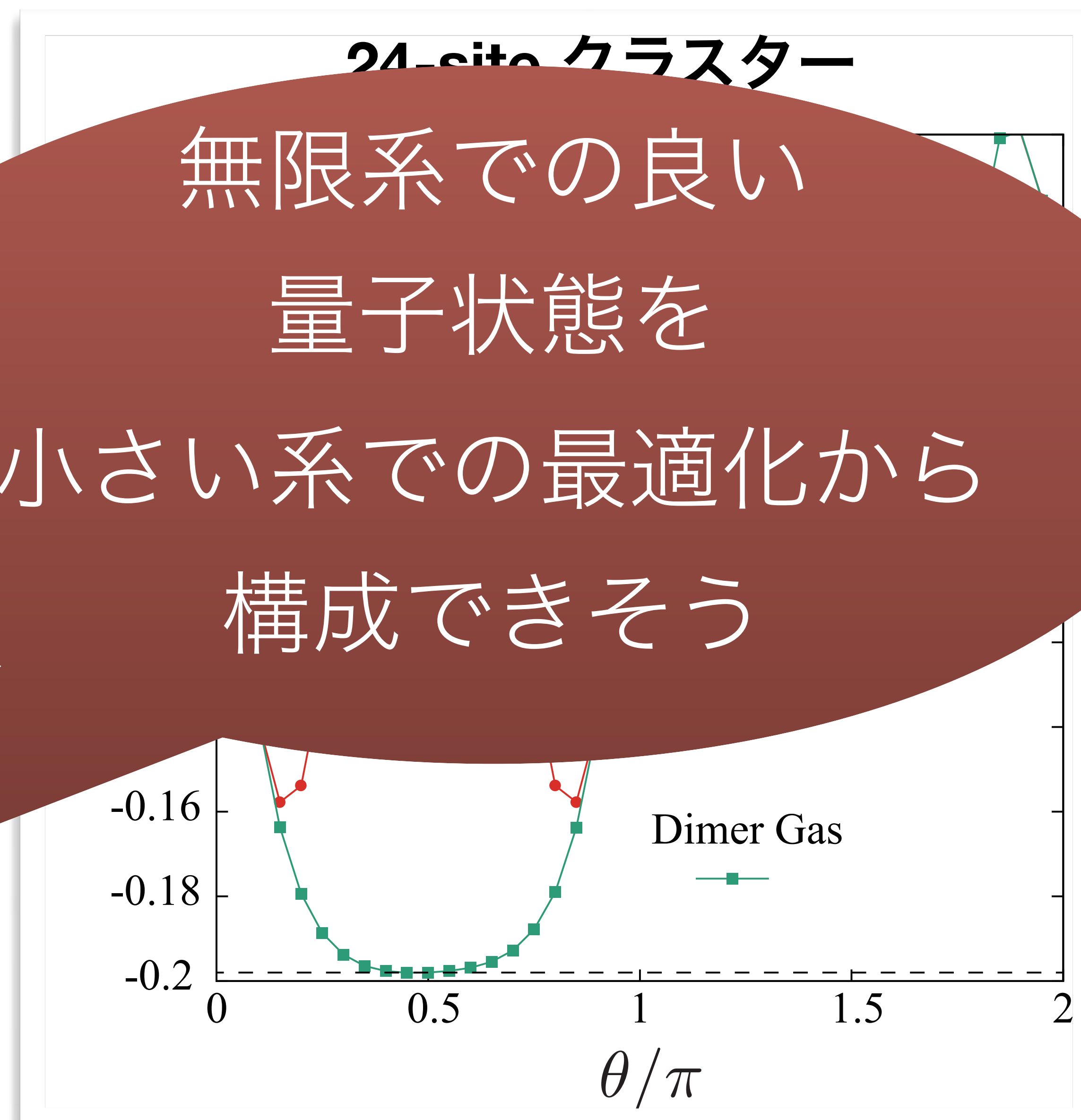
最適化の局所性の確認のため

非ユニタリのゲートで最適化

i を取り除く

$$U'_\gamma(\theta) \equiv= \cos\frac{\theta}{2} - \sin\frac{\theta}{2}\sigma_i^\gamma\sigma_j^\gamma$$





無限系での良い
量子状態を
小さい系での最適化から
構成できそう

- 非ユニタリのゲートではエネルギーが改善
- 最適なパラメタは無限系と24サイト系でほぼ同じ

コンテンツ

- はじめに
    - テンソルとテンソルネットワーク
    - 量子状態の表現と古典計算の困難
    - テンソルネットワークの基礎
- 量子状態の情報圧縮
    - テンソルネットワーク分解
    - 量子状態のエンタングルメント
- 種々のテンソルネットワークと量子エンタングルメント
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 量子物性への応用
    - 2次元無限系の計算手法
    - Kitaev模型への応用例
    - 量子コンピュータへの期待と応用例
- まとめ

まとめ

- テンソルネットワークを用いると大きな量子状態を古典計算機で表現できる場合がある
  - エンタングルメントエントロピーのスケーリング（面積則）が大事
- 良いテンソルネットワーク表現を得るためには、量子状態のエンタングルメントの性質を捉える必要がある
  - ネットワーク構造を決めると、表現できる量子エンタングルメントが決まる
- テンソルネットワーク分解は量子状態以外にも様々な場面で使える
  - 原理的には、任意のテンソル型データに適用可能
  - 量子状態とは異なり、テンソルネットワークに適したエンタングルメント構造を持っているかは非自明
- 量子物性への応用ではテンソルネットワークはとても強力
  - それでもまだ難しい問題があり、量子コンピュータの活用が期待される
  - テンソルネットワークと量子コンピュータを高度に融合するアルゴリズムの可能性

テンソルネットワークについて思うこと

数理科学 2022年2月号「テンソルネットワークの将来」

本特集の記事では，テンソルネットワークの様々な分野での活用例が紹介されていることだろう．そのような活用例で用いられているテンソルネットワークには,「効率的な近似・解析を行う道具」として側面と,「ものごと考え，理解するための道具」としての側面があるのではと思う．本稿では，こ

今後の展開につながるキーワード

- テンソルネットワーク表現の利点
- テンソルネットワーク表現とデータ科学
- テンソルネットワークを通した理解
- テンソルネットワークの最適化と表現能力
- 量子コンピュータによるテンソルネットワーク計算