



サステイナブル量子AI研究拠点

<https://sqai.jp/>

テンソルネットワークの基礎と応用

東京大学理学系研究科 量子ソフトウェア寄付講座 大久保毅

コンテンツ

- 量子状態の表現と古典計算の困難
- 量子状態の情報圧縮
 - テンソルネットワーク分解と量子エンタングルメント
 - 種々のテンソルネットワークの紹介
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 産業応用の可能性？
- まとめ

コンテンツ

- 量子状態の表現と古典計算の困難
- 量子状態の情報圧縮
 - テンソルネットワーク分解と量子エンタングルメント
 - 種々のテンソルネットワークの紹介
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 産業応用の可能性？
- まとめ

古典コンピュータと量子コンピュータの情報単位

古典コンピュータ

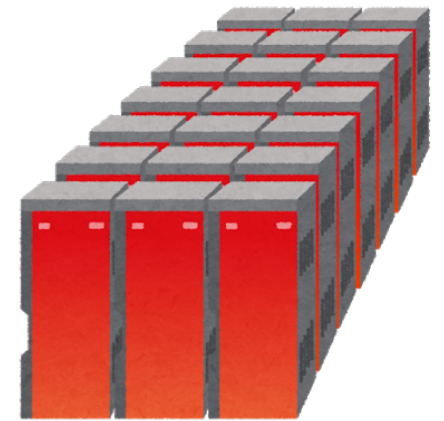
(例えば) 0と1の2状態 (bit) で情報 (状態) を表す

1 bit: 状態は"0" or "1"

2 bits: 状態は"00", "01", "10", "11"

⋮

N bits: 状態は全部で 2^N 個



量子コンピュータ

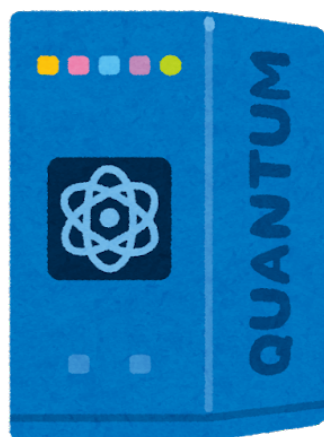
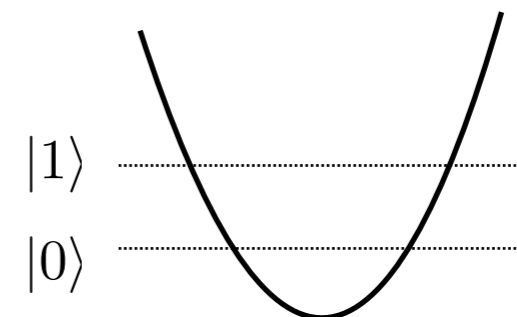
(例えば) 2^N "準位"を持つ量子系 (qubit) で情報を表す

1 qubit: 状態は"基底" $|0\rangle, |1\rangle$ の任意の重ね合わせ (線形結合)

重ね合わせの例

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

* α, β は一般に複素数



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

$|0\rangle, |1\rangle$

2次元ベクトル

重ね合わせ? * $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$



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

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

$|0\rangle \otimes |0\rangle, |0\rangle \otimes |1\rangle, |1\rangle \otimes |0\rangle, |1\rangle \otimes |1\rangle$

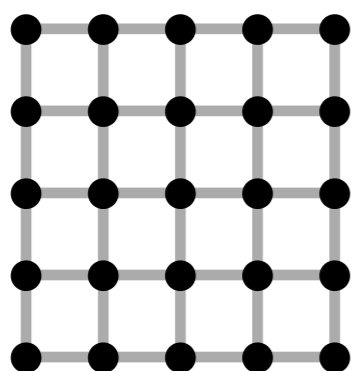
4次元ベクトル

(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 2^N

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

指数関数的に大きい!

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

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

量子状態と確率

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

➡ qubitが状態 $|0\rangle$ にいるか $|1\rangle$ にいるかを観測すると

$$\text{確率 } P(|0\rangle) = \frac{|\alpha|^2}{|\alpha|^2 + |\beta|^2} \text{ で状態 } |0\rangle$$

$$\text{確率 } P(|1\rangle) = \frac{|\beta|^2}{|\alpha|^2 + |\beta|^2} \text{ で状態 } |1\rangle$$
$$= 1 - P(|0\rangle)$$

が観測される

*以降、量子状態は規格化されているとする

$$\langle\Psi|\Psi\rangle \equiv (\alpha^* \beta^*) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \underline{|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1}$$

N -qubit状態 : $|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_N\}} \Psi_{i_1 i_2 \dots i_N} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle$

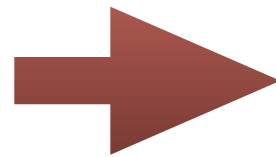
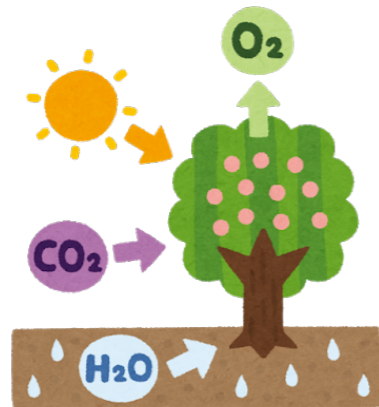
➡ 2^N 種類の古典bit状態がそれぞれ確率的に観測される

$|010111\dots\rangle$

量子多体問題

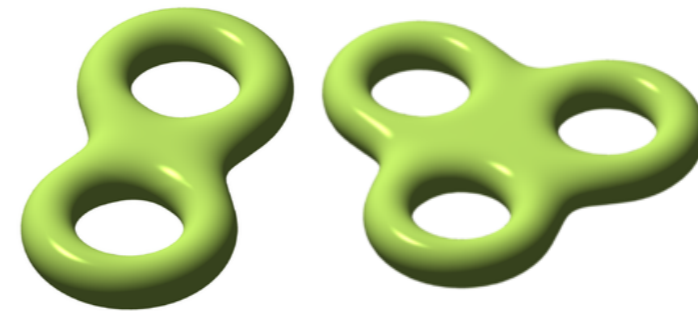
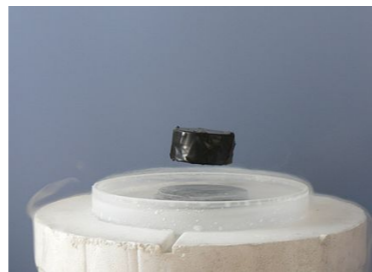
物質科学における多彩な現象

- 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

$$\mathcal{H} |\Psi\rangle = \underline{E} |\Psi\rangle$$

エネルギー

= 固有値問題

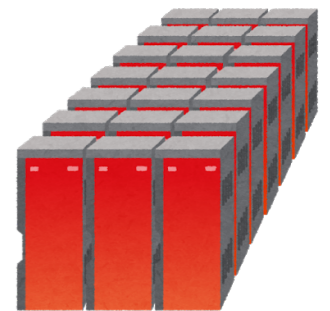
量子多体問題の困難

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

Cf. H. De Raedt, *et al.*, Comput. Phys. Commun. **237**, 47 (2019).

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！



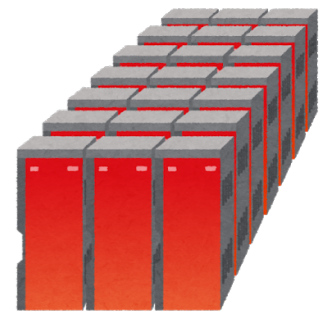
量子多体問題の困難

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

- 量子状態の表現と古典計算の困難
- 量子状態の情報圧縮
 - テンソルネットワーク分解と量子エンタングルメント
 - 種々のテンソルネットワークの紹介
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 産業応用の可能性？
- 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？

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

(1) ほとんどの係数がゼロ (またはとても小さい)

例：古典的状态 $|\Psi\rangle = |01011\dots 00\rangle$

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

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

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

相関構造と独立な成分だけを保持

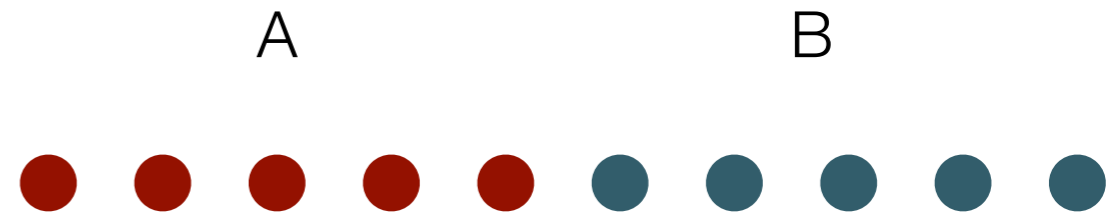
全状態空間

← 部分空間

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

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



係数を表す「行列」を近似して情報圧縮したい！

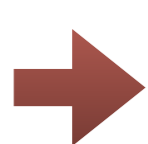
低ランク近似：

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

いらぬ情報をそぎ落として、重要な情報だけを残す

近似の精度

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



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

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 $N \times M$ 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 $\lambda_k \geq 0$ $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \dots$ 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、
残りをゼロで置き換える

$$\begin{array}{c} \text{---} \text{ (A) \text{---}} \\ A : M \times N \\ (M \leq N) \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \text{ (U) } \Lambda \text{---} \text{ (V}^\dagger \text{) \text{---}} \\ \Lambda : M \times M \\ U, V : (M, N) \times M \end{array} \underset{\text{近似}}{\simeq} \begin{array}{c} \text{---} \text{ (\tilde{U}) } \tilde{\Lambda} \text{---} \text{ (\tilde{V}^\dagger) \text{---}} \\ \tilde{\Lambda} : R \times R \\ \tilde{U}, \tilde{V} : (M, N) \times R \end{array}$$

行列の情報圧縮：特異値分解

特異値分解： 任意の $N \times M$ 行列は以下の形に一意に分解できる

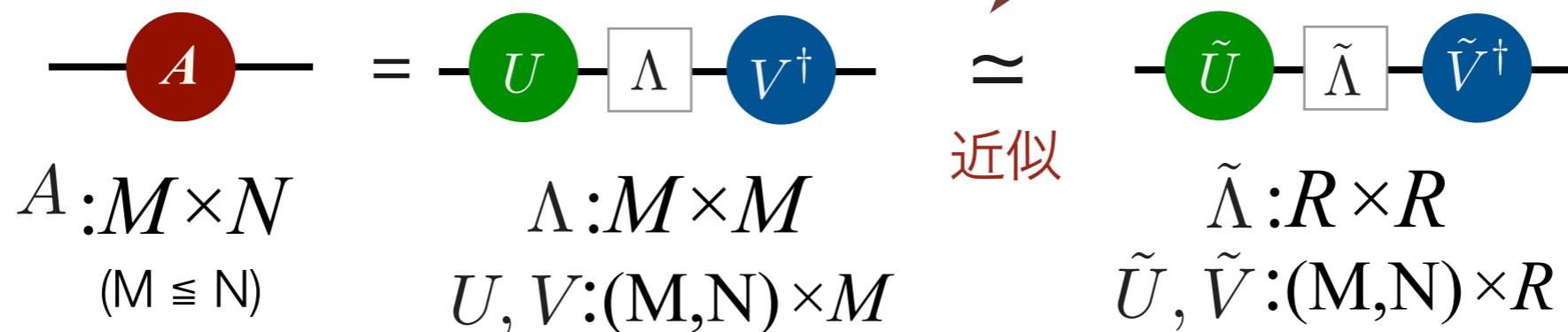
$$M_{i,j} = \sum_{k=1}^{\min(N,M)} U_{ik} \lambda_k V_{jk}^*$$

λ_k : 特異値 $\lambda_k \geq 0$ $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \dots$ 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 **これらのテンソルへの拡張？**



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)

$$\vec{v} \in \mathbb{C}^M$$

$$M \sim a^N$$

$$\mathbb{C}^M = \mathbb{C}^a \otimes \mathbb{C}^a \otimes \dots \otimes \mathbb{C}^a$$

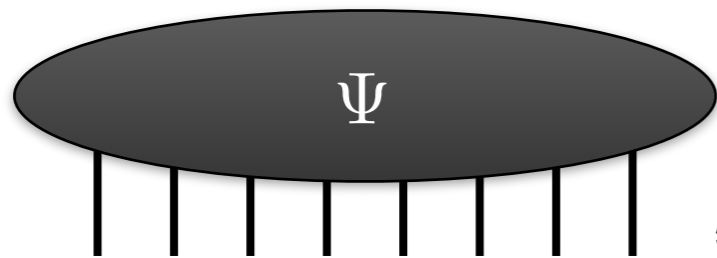
*局所的な空間の次元は異なっても良い

例：量子状態

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

係数はテンソル

量子多体状態

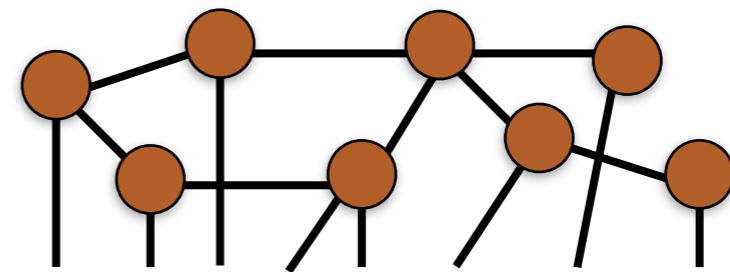


$\sim e^N$ の独立要素



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

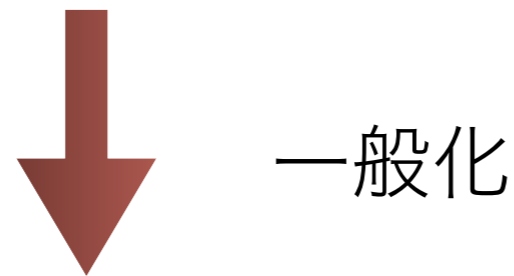


$\sim O(N)$ の独立要素

テンソル？

• ベクトル $\vec{v} : v_i$ \longrightarrow 1次元的な数字の並び

• 行列 $M : M_{i,j}$ \longrightarrow 2次元的な数字の並び



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

【基本的な演算 = **縮約**】

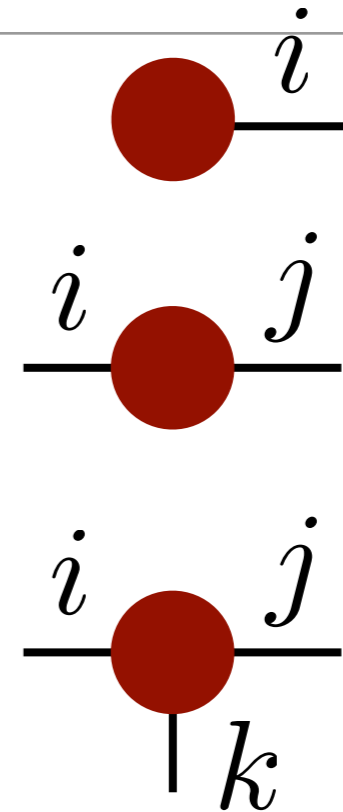
行列積 : $C_{i,j} = (AB)_{i,j} = \sum_k A_{i,k} B_{k,j}$

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

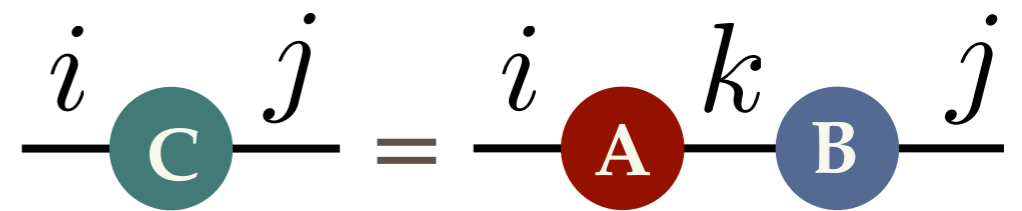
- ベクトル $\vec{v} : v_i$
- 行列 $M : M_{i,j}$
- テンソル $T : T_{i,j,k}$



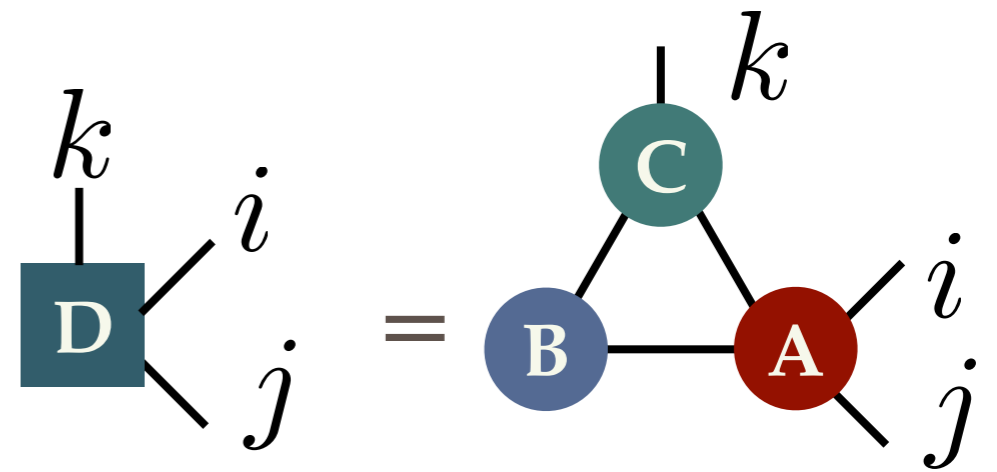
テンソルの積（縮約）の表現

*n階のテンソル=n本の足

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



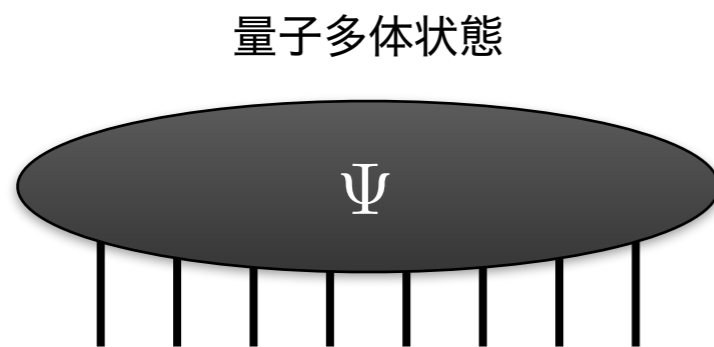
$$D_{i,j,k} = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} A_{i,j,\alpha,\beta} B_{\beta,\gamma} C_{\gamma,k,\alpha}$$



良いテンソルネットワーク？

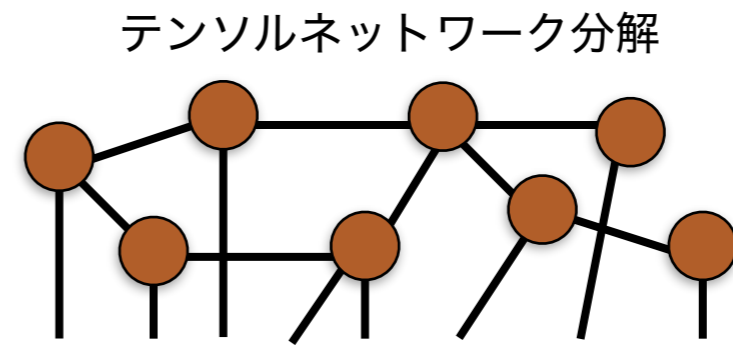
$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_N\}} \Psi_{i_1 i_2 \dots i_N} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle$$

係数はテンソル



$\sim e^N$ の独立要素

量子相関の
特徴を利用した近似



$\sim O(N)$ 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)

エンタングルメントエントロピーと面積則

エンタングルメントエントロピー (EE) : A B

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



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

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

【面積則 (Area Law)】 (d 次元的な相互作用する系を考える)

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

$$S = -\text{Tr} (\rho_A \log \rho_A) \propto L^d \quad (\text{c.f. random vector})$$

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)

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

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！

コンテンツ

- 量子状態の表現と古典計算の困難
- 量子状態の情報圧縮
 - テンソルネットワーク分解と量子エンタングルメント
 - 種々のテンソルネットワークの紹介
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 産業応用の可能性？
- 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

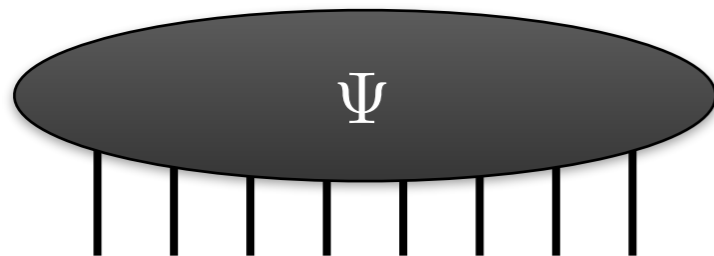
テンソルネットワーク分解：

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

全状態空間

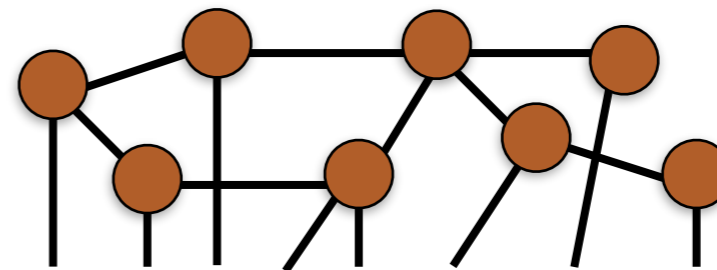
← 部分空間

一般の量子状態



量子エンタングルメントの構造を利用

テンソルネットワーク分解



行列積状態 (MPS)

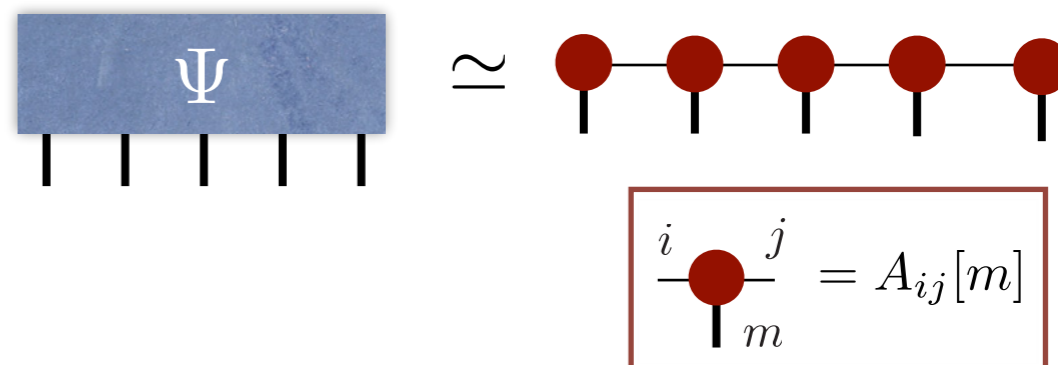
Good reviews:

(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

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



$A[i]$: 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

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

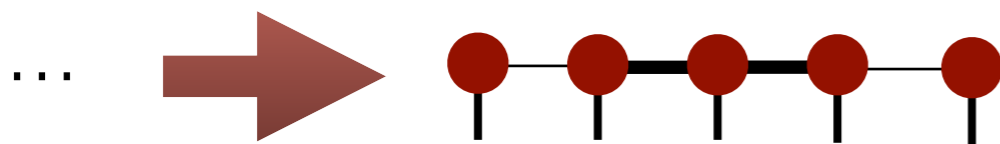
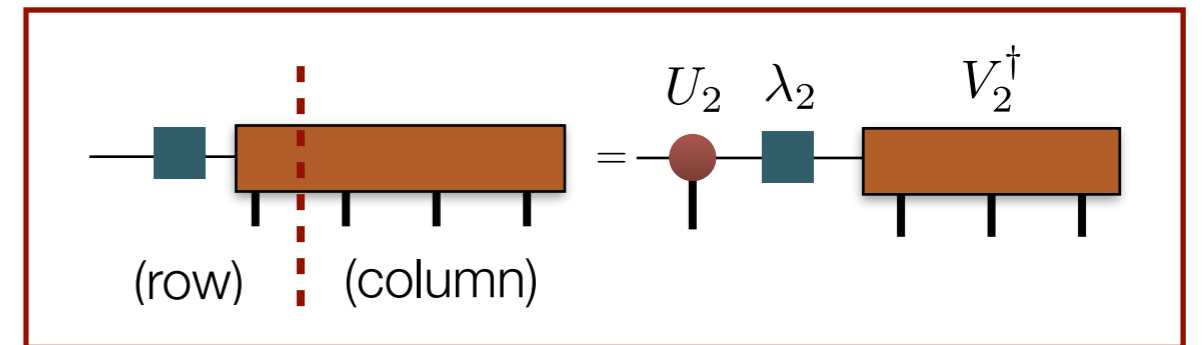
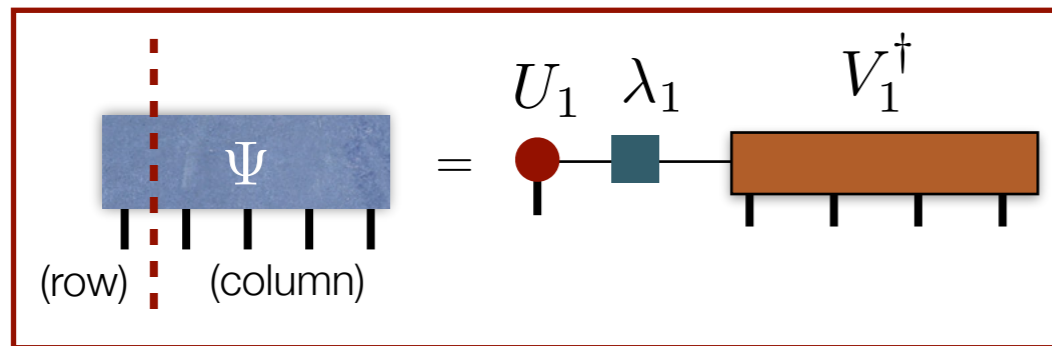
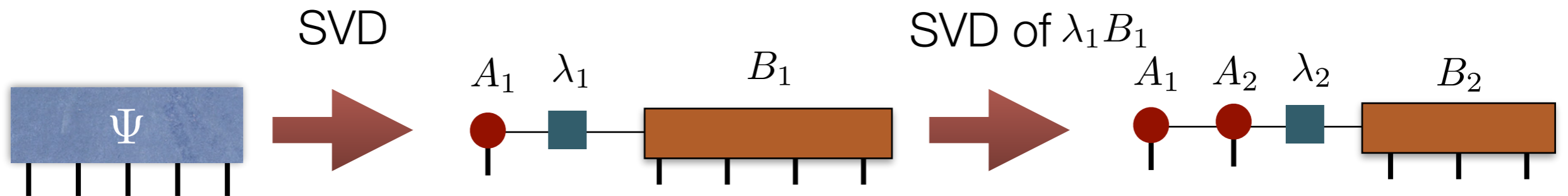
$$\Psi_{i_1 i_2 \dots i_N} = \phi_1[i_1] \phi_2[i_2] \cdots \phi_N[i_N]$$

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

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

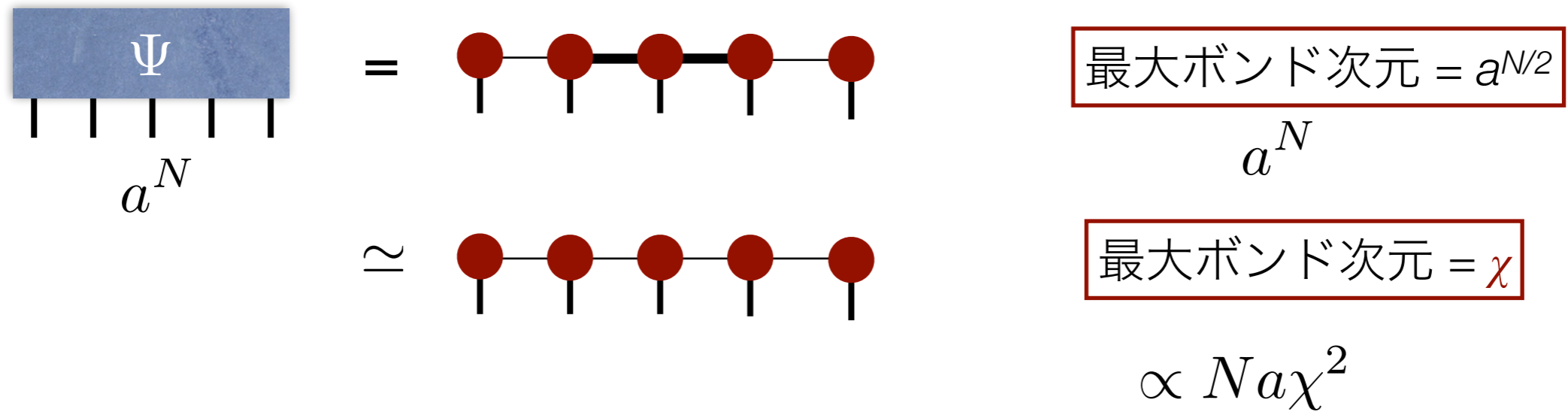


この構成では行列の次元は場所に依存

$$\text{最大のボンド次元} = a^{N/2}$$

a :各足の次元

行列積状態における低ランク近似



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！

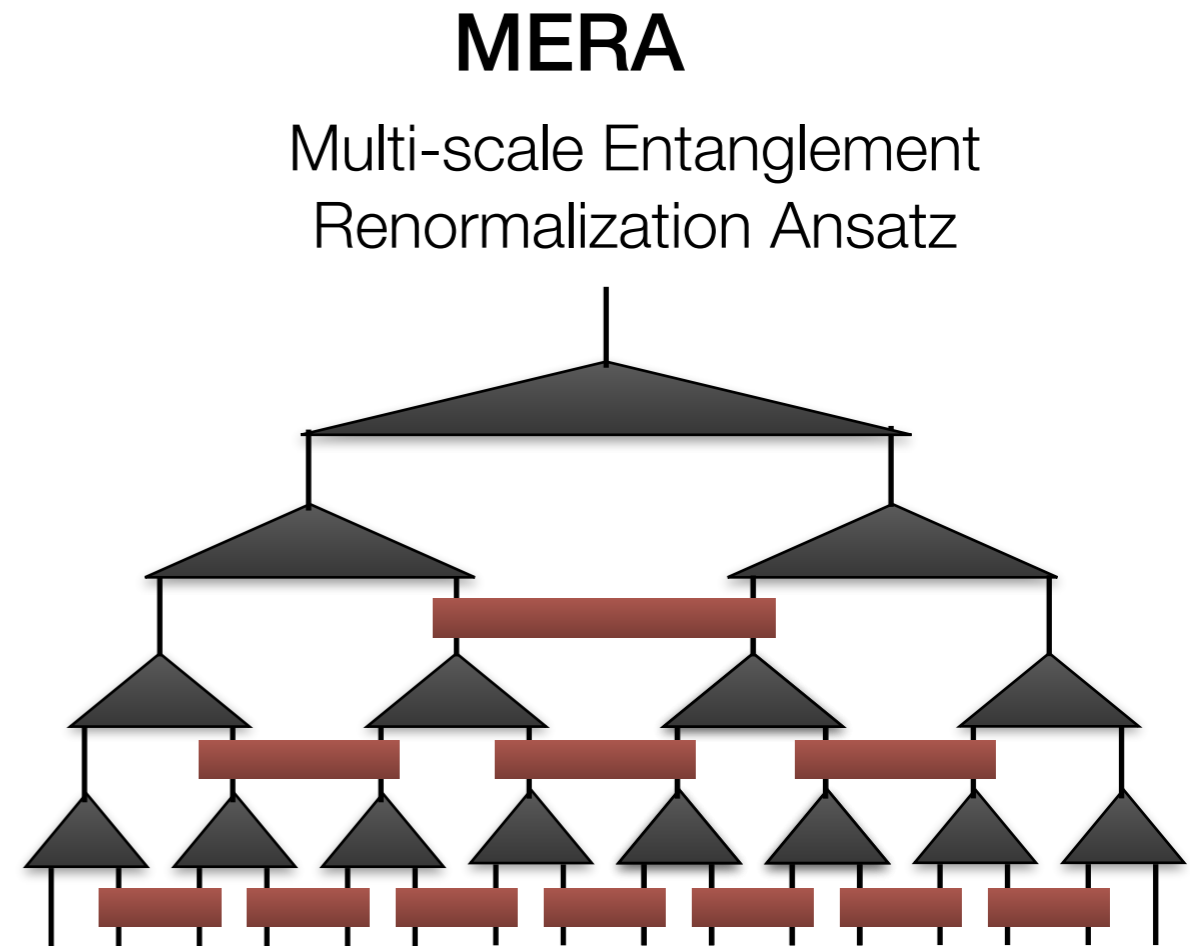
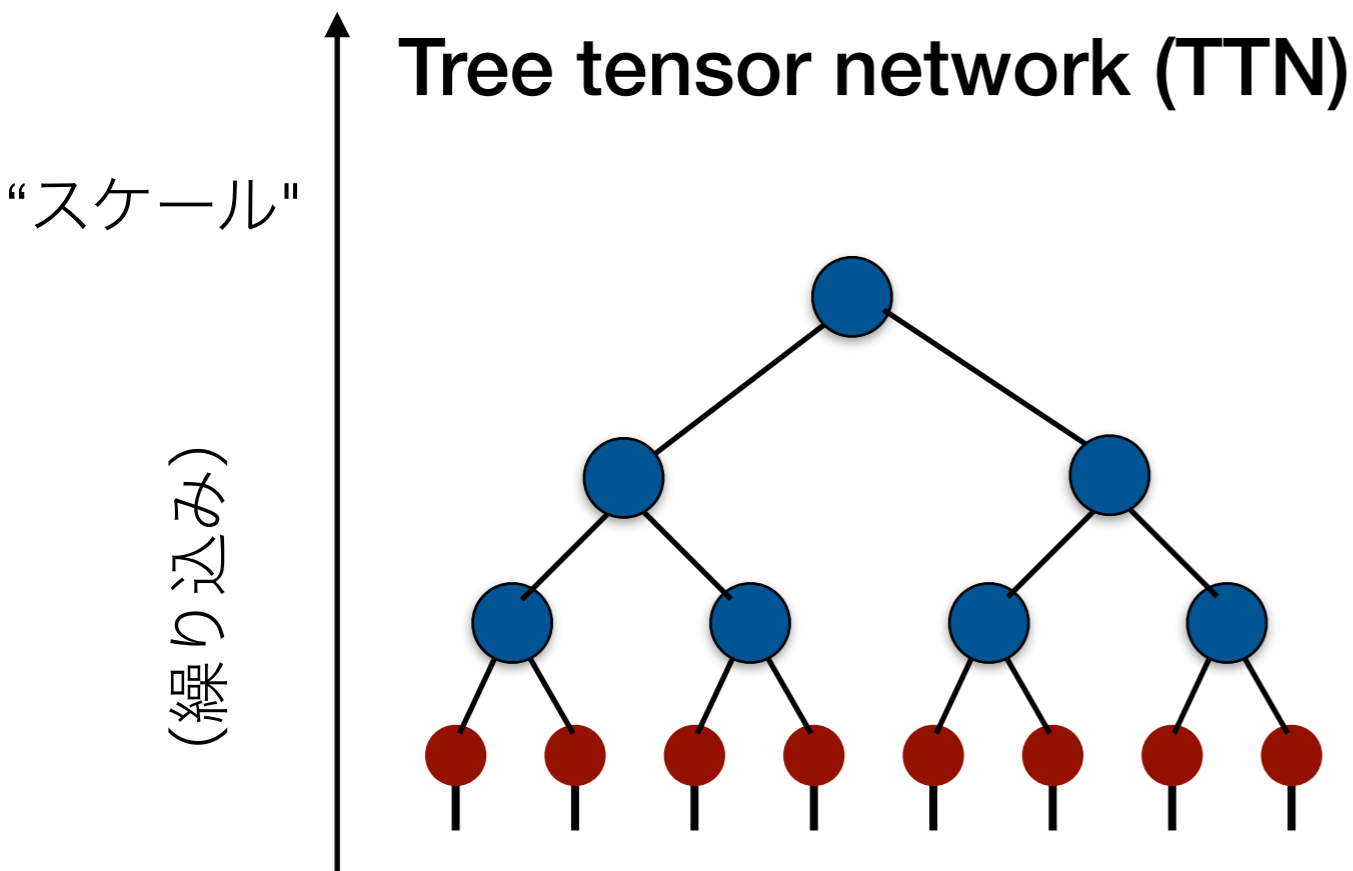
- もし、“エンタングルメントエントロピー”が N に依存しない ($S \sim O(1)$) ならば、ボンド次元 χ が N に依存しないようにできる。
- 逆に、EEが N と共に増大する場合、(同じ近似精度を保つには)、 χ も N と共に増大させる必要がある。

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テンソルネットワークの例



2次元以上へのMPSの拡張：テンソル積状態（TPS）

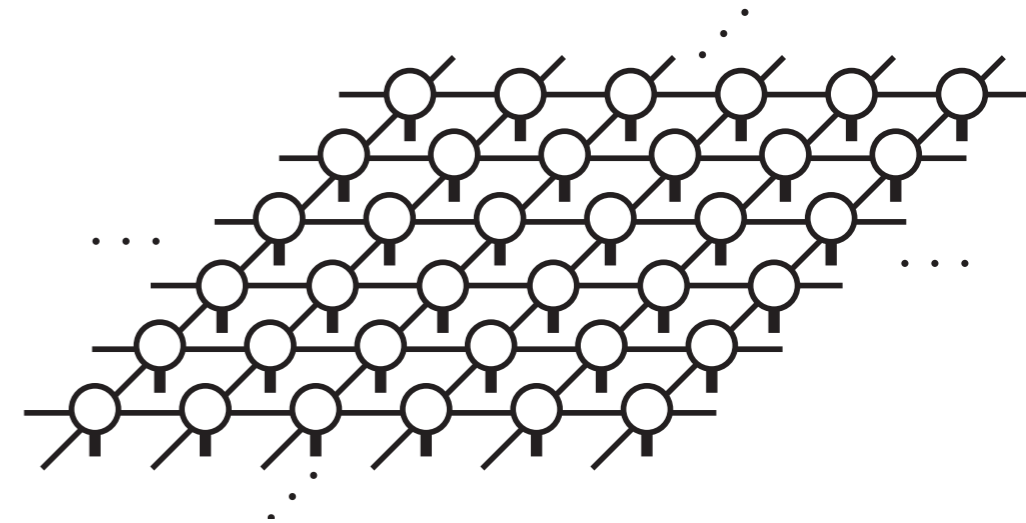
TPS (Tensor Product State) (AKLT, T. Nishino, K. Okunishi, ...)

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 階のテンソルが敷き詰められたネットワーク



局所自由度： s

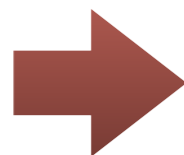
$$T_{ijkl}[s] = \begin{array}{c} i \quad j \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bigcirc \\ \diagup \quad \diagdown \\ l \quad k \\ s \end{array}$$

Virtual自由度： i, j, k, l

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するパラメタ (**$D \rightarrow \infty$ で厳密に**)

TPS は面積則を満たすことができる

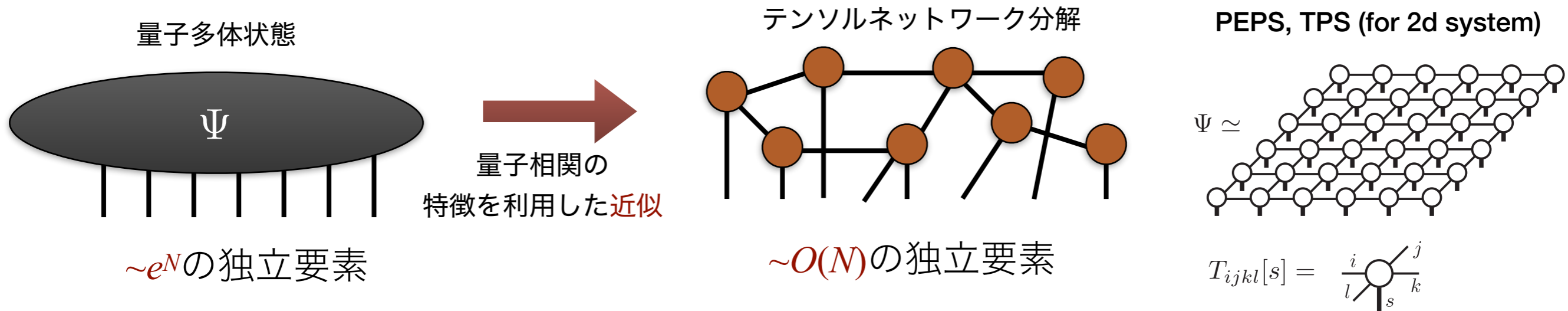


TPSを用いることで高次元の量子多体状態を効率的に近似できる

コンテンツ

- 量子状態の表現と古典計算の困難
- 量子状態の情報圧縮
 - テンソルネットワーク分解と量子エンタングルメント
 - 種々のテンソルネットワークの紹介
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 産業応用の可能性？
- まとめ

量子系でのテンソルネットワークの利用



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

$$\rho(\beta) = \text{[Diagram of a dense matrix]} \simeq \text{[Diagram of a tensor network representation of } \rho(\beta)\text{]}$$

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)

$$\vec{v} \in \mathbb{C}^M$$

$$M \sim a^N$$

$$\mathbb{C}^M = \mathbb{C}^a \otimes \mathbb{C}^a \otimes \dots \otimes \mathbb{C}^a$$

*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 → 2¹⁶ 次元のベクトル

→ 16-本足のテンソル (a = 2)

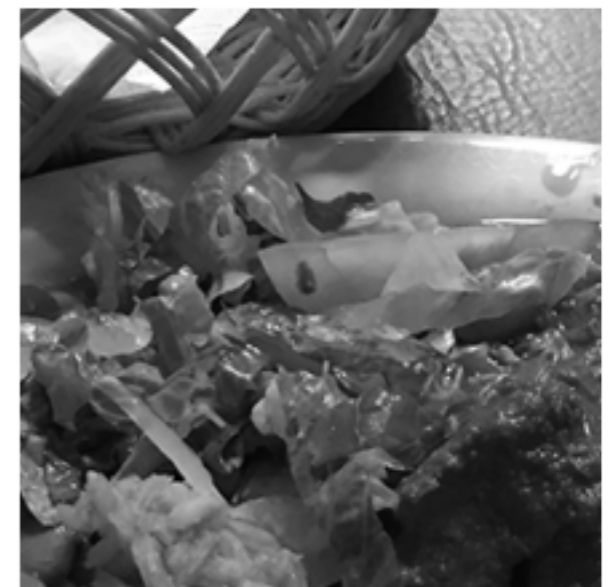
確率分布 :

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)

$$256=2^8$$



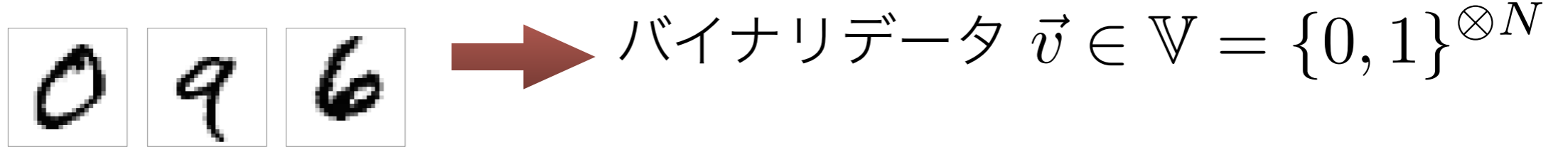
$$256=2^8$$

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



画像の確率分布： $P(\vec{v})$

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

ボルンマシン表現：

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

量子ビットの古典状態と同じ構造！

$$\vec{v} \rightarrow |0101 \dots 00\rangle = |\vec{v}\rangle$$

確率分布を量子状態と対応づけて考える

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

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

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

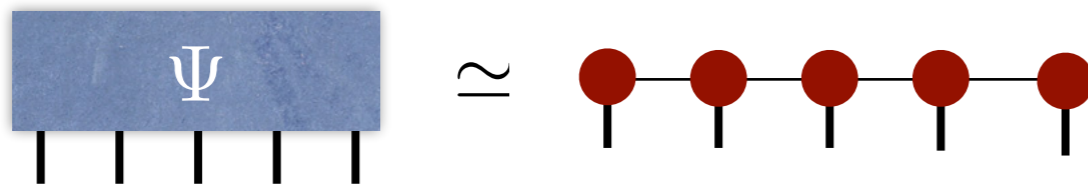
教師なしの生成モデル

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

ボルンマシン

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

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

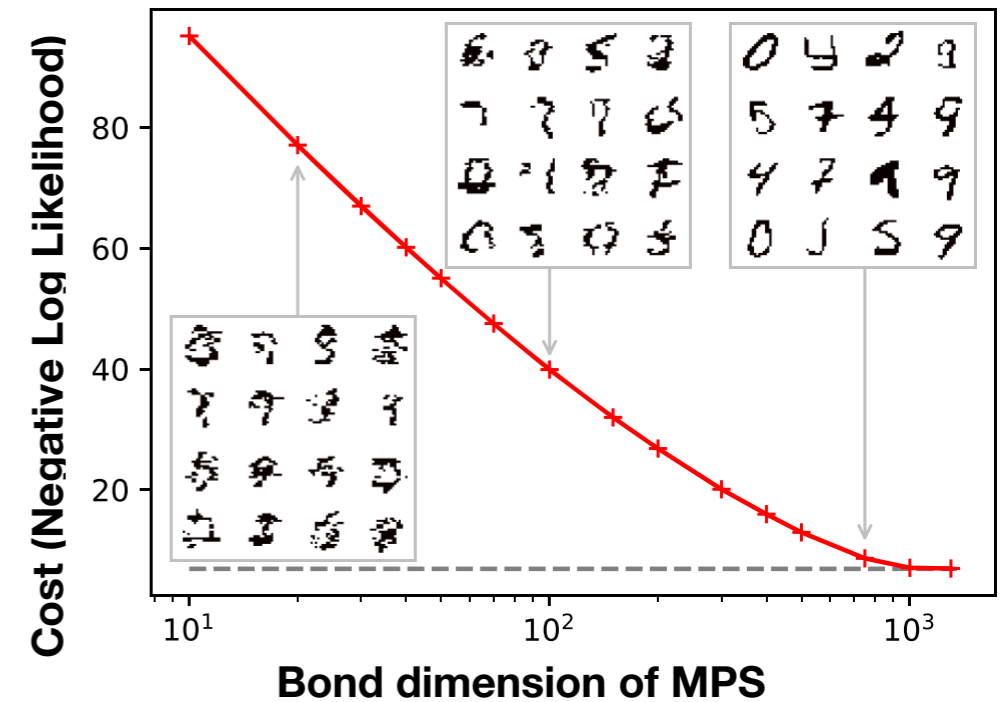


*この場合、事前には、どのようなネットワーク構造が有効かは分からない

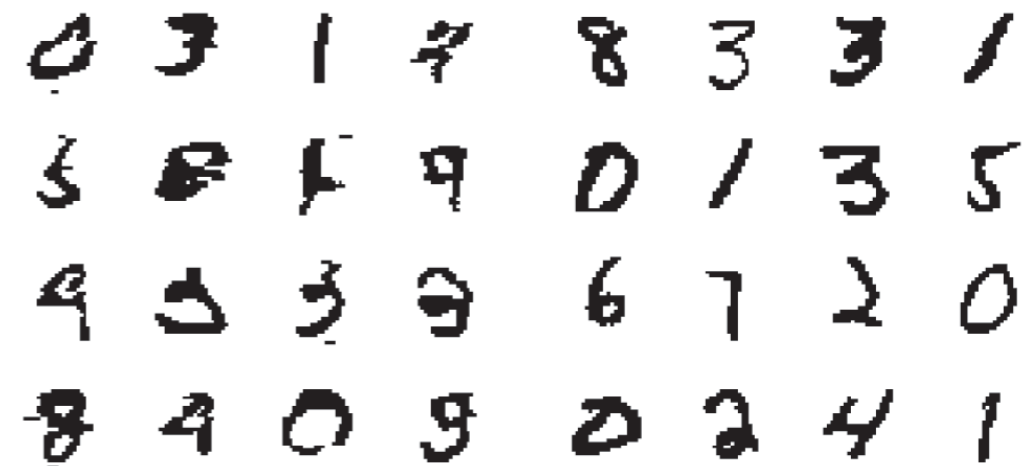
例えば、最適なMPSを**負の対数尤度を最小化**することで求められる

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

\mathbb{T} : 訓練データの集合



Images generation



(a) Generated

(b) Original

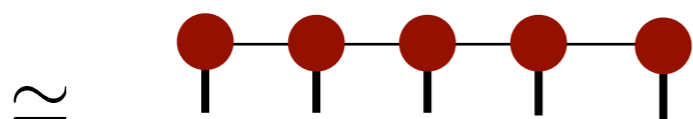
教師なしの生成モデル

ボルンマシン：

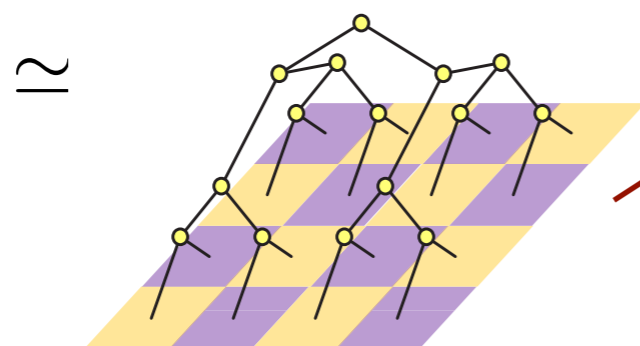
$$P(\vec{v}) = \frac{|\Psi(\vec{v})|^2}{Z}$$

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、性能が変化する

MPS



TTN



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

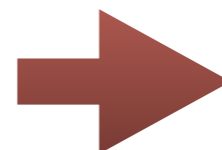
TABLE I. Test NLL of different models for the binary MNIST data set.

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

^aApproximated 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

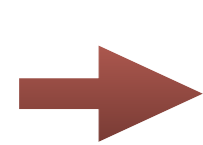
Nikita Gourianov et. al., Nat. Comput. Sci. 2, 20 (2022).

非圧縮のNavier-Stokes 方程式

$$\nabla \cdot V = 0$$

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

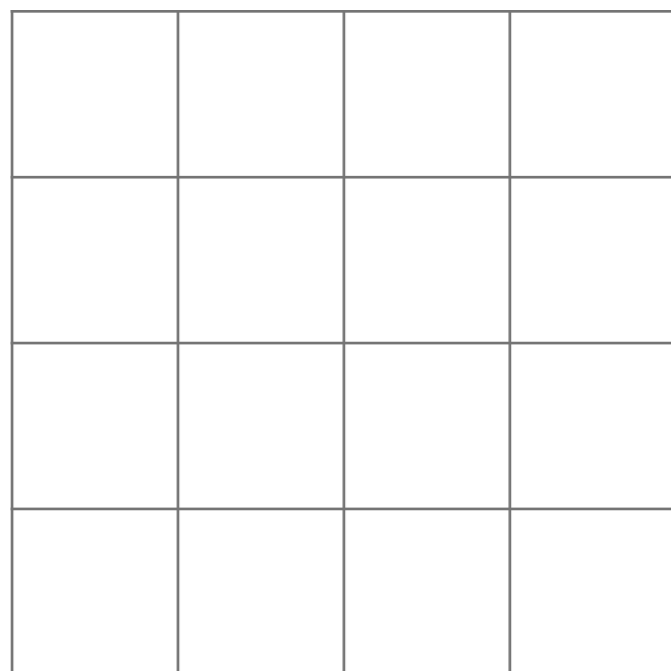
直接法によるシミュレーション：離散化された格子グリッド上で微分方程式を解く



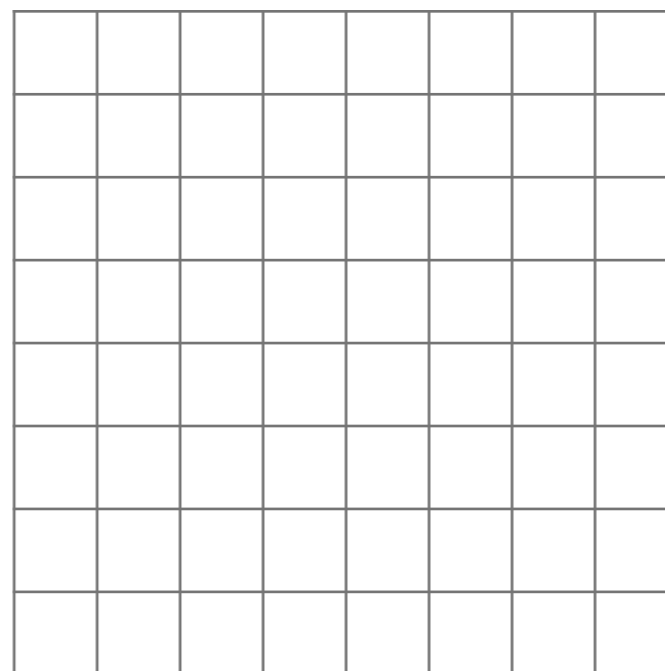
乱流のような複雑な問題を扱う場合、**無数の長さスケールが混合するため、とても小さいメッシュが必要**

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

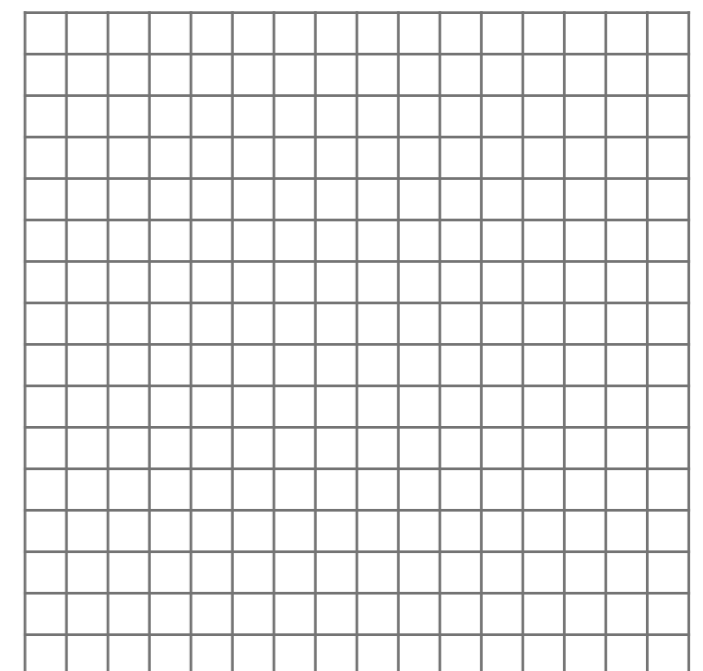
4 × 4 grid



8 × 8 grid



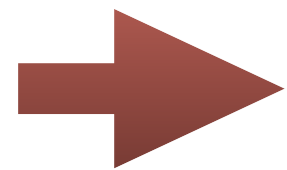
16 × 16 grid



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？

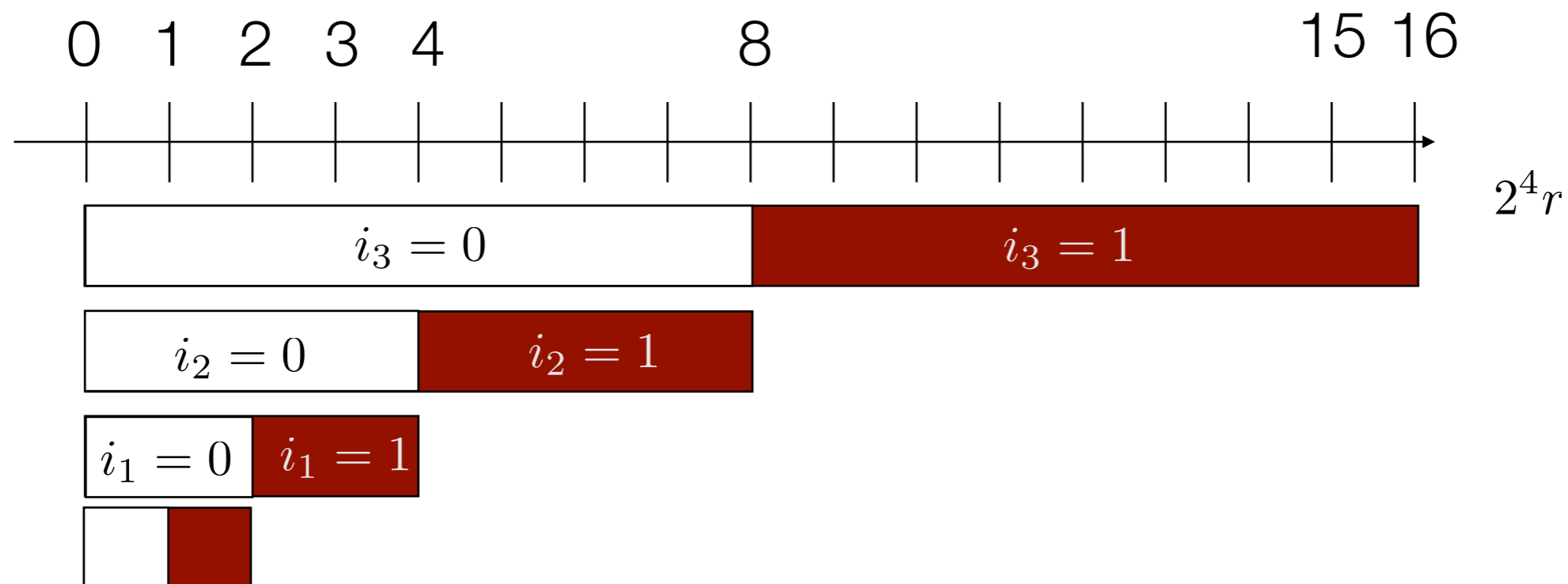


画像にTN分解を適用する場合と同様に、原理的にはTNが使える。
ただし、その効率は、対象の物理（エンタングルメントの性質）に依存

実数の N ビット二進数表記：

$$r_q \in [0, 1) \rightarrow 2^N r_q = i_0 + 2^1 i_1 + 2^2 i_2 + \dots + 2^{N-1} i_{N-1}$$

各ビットが“長さスケール”に対応している



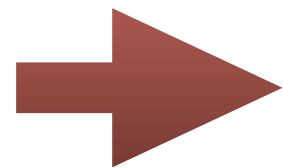
微分方程式への応用

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？

テンソル（ネットワーク）形式で表した場合の各足は異なる長さスケールに対応

テンソルネットワーク近似の効率は対象系の物理に依存する



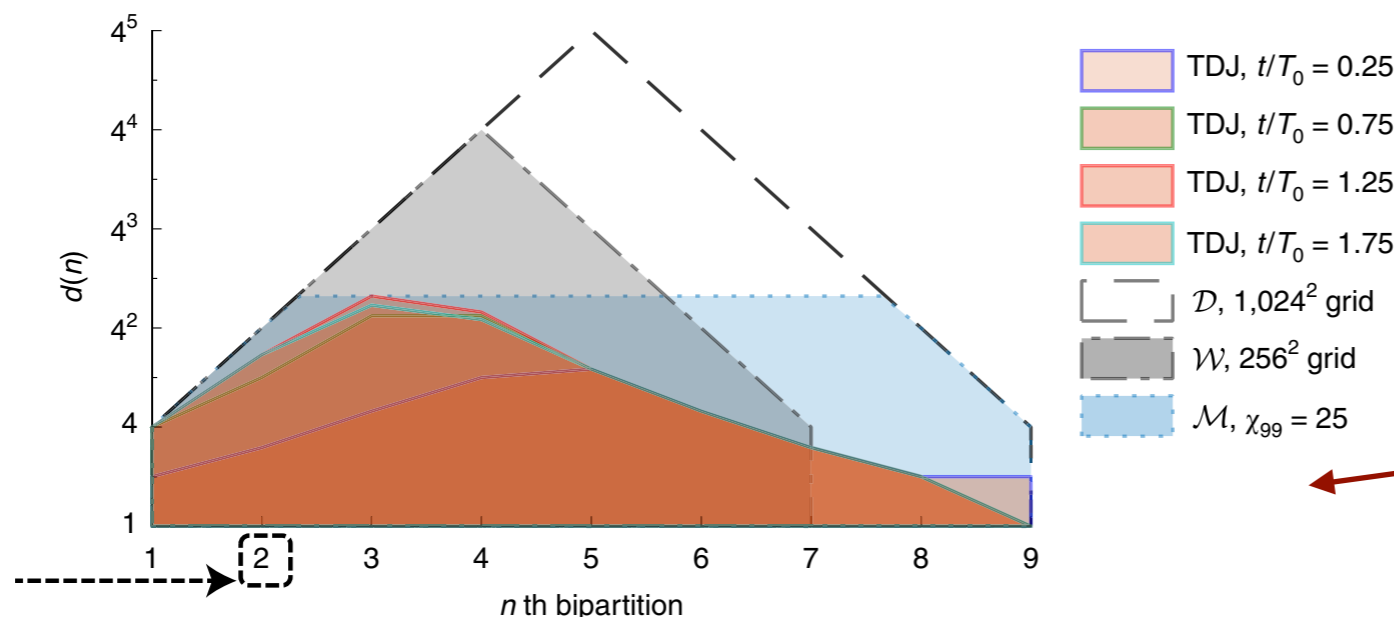
この系の“量子エンタングルメント”？

長い空間スケールと短い空間スケールの中の“特異値分解”

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

$$2^N r_q = \underbrace{i_0 + 2^1 i_1 + 2^2 i_2}_{\text{smaller scale}} + \underbrace{\dots + 2^{N-1} i_{N-1}}_{\text{larger scale}}$$

b



99%の近似精度を出すために必要なボンド次元
→サイズに依存しない
1d 面積則！

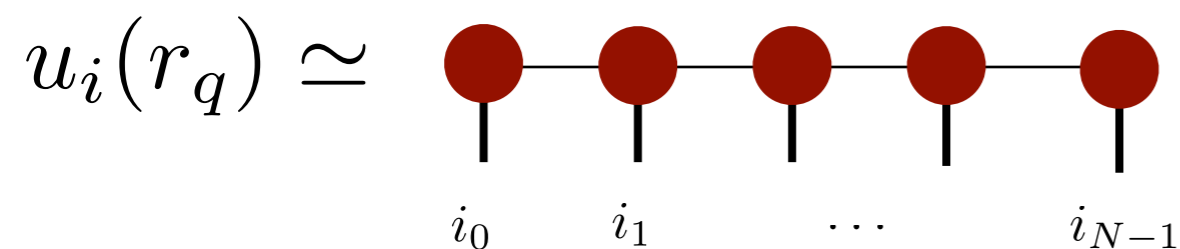
微分方程式への応用

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いそう

1024² grid

1次元での2^N 格子点

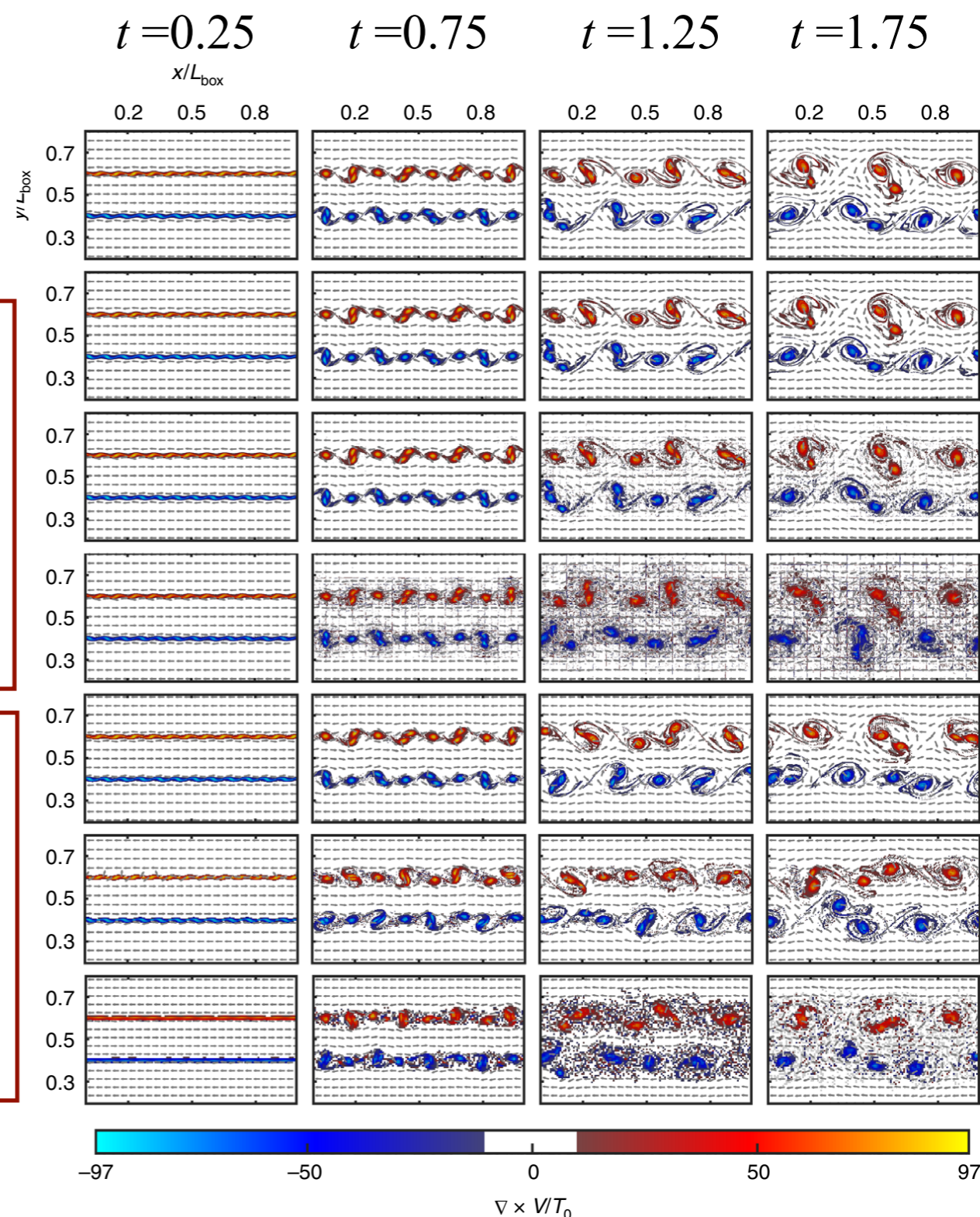


$$2^N r_q = i_0 + 2^1 i_1 + 2^2 i_2 + \dots + 2^{N-1} i_{N-1}$$

(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、2²や2³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！

a

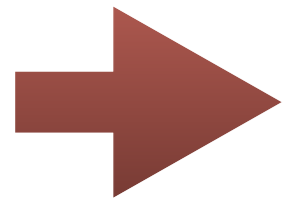


コンテンツ

- 量子状態の表現と古典計算の困難
- 量子状態の情報圧縮
 - テンソルネットワーク分解と量子エンタングルメント
 - 種々のテンソルネットワークの紹介
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 産業応用の可能性？
- まとめ

テンソルネットワークを経て量子計算へ

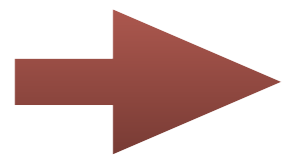
テンソルネットワークは量子回路に変換できる（しやすい）



古典コンピュータを用いたテンソルネットワーク計算を（比較的）簡単に量子計算に繋がられる可能性

- 量子多体系のシミュレーション
- ボルンマシン表現による生成モデル
- 微分方程式

テンソルネットワークをどう量子回路に埋め込むか？



SQAIの課題3「量子埋め込み」のテーマの一つ



サステイナブル量子AI研究拠点

<https://sqai.jp/>

(補足) 量子回路とテンソルネットワーク

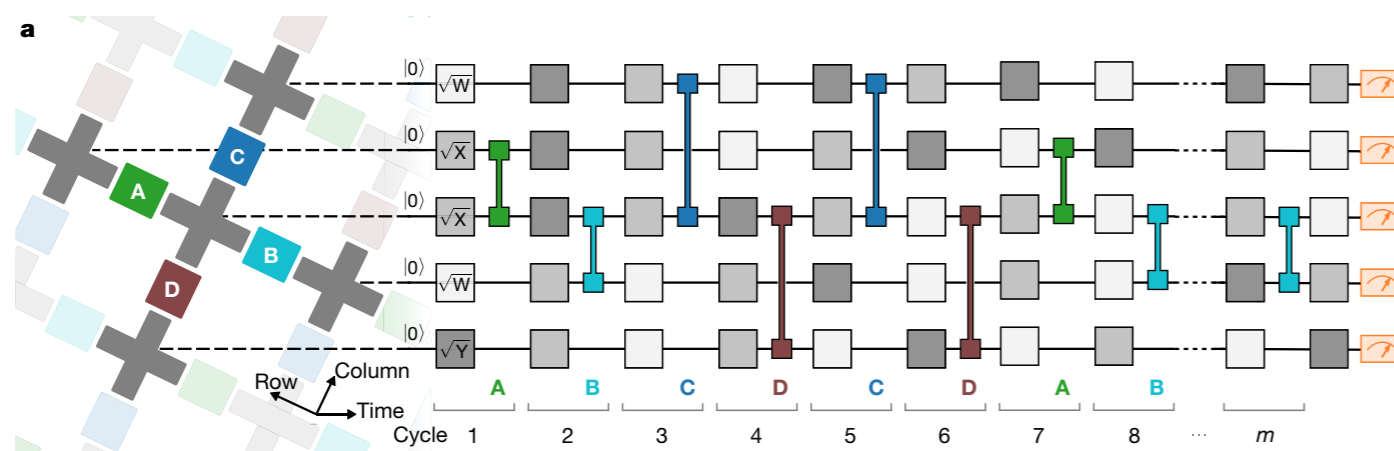
量子回路：

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")

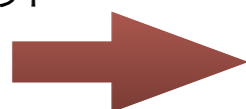
googleの"量子超越" 回路 F. Arute, *et al.*, Nature 574, 505 (2019)



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

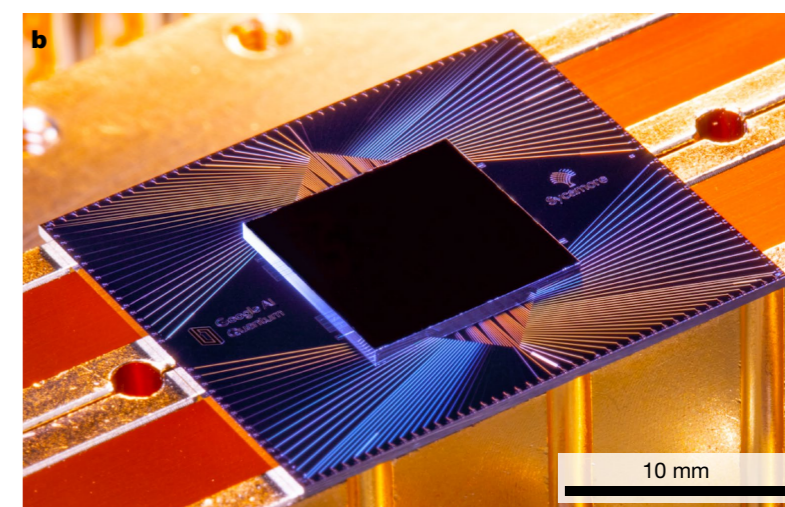
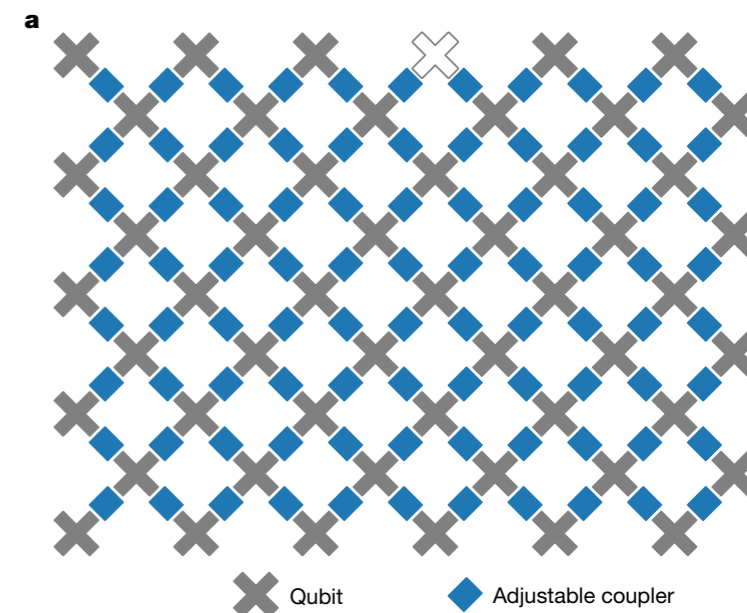
素朴な量子状態の計算
10,000 年



TN縮約の計算
304 秒！

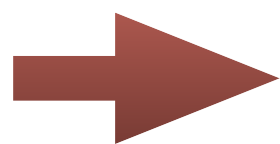
Y. A. Liu, *et al.*, Gordon bell Prize in SC21 (2021),
(cf. 量子コンピュータ = 200秒)

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を用いた既存技術の高度化

テンソルネットワークによる情報圧縮を既存技術に適用



- 使用メモリ量の低減
- 解を得るまでの時間の短縮

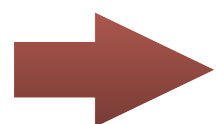
例：深層学習の情報圧縮

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

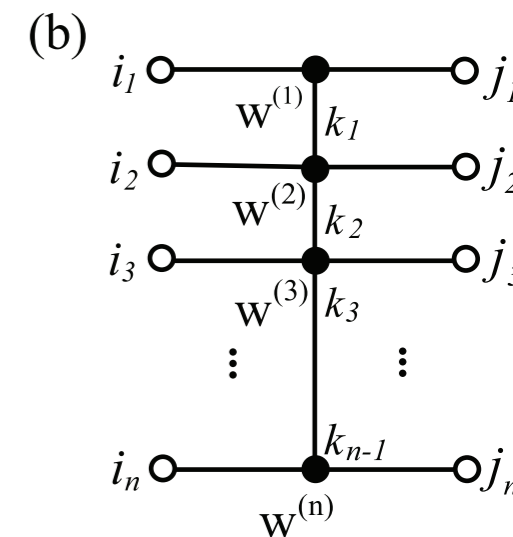
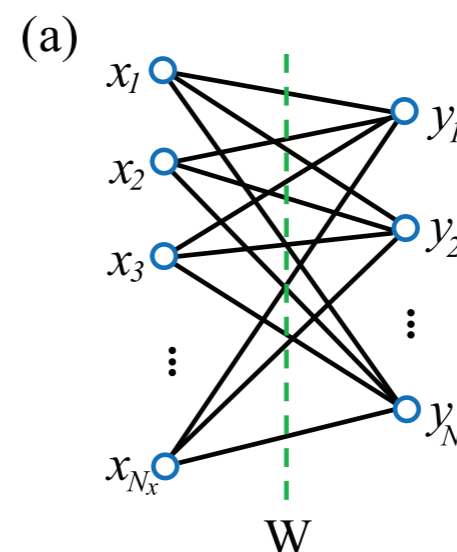
ニューラルネットワークの一部に注目

x_i : input neuron y_i : output neuron

W_{ij} : x と y を結ぶ重み行列



W を MPS 形式で近似？

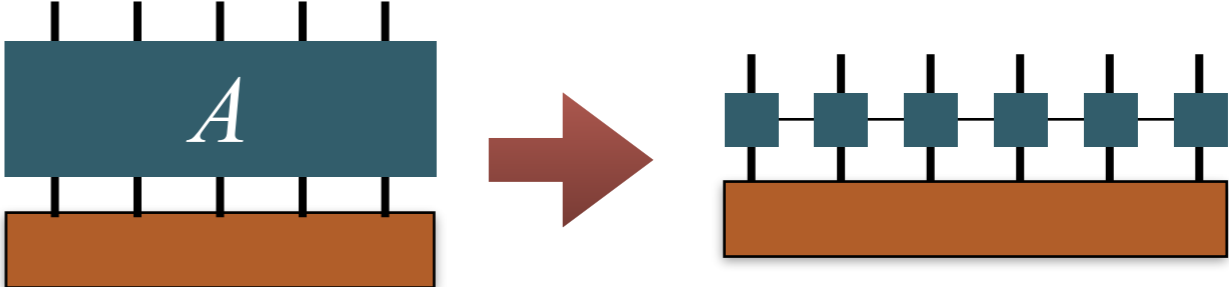


Data set	Network	Original Rep a (%)	MPO-Net	
			a (%)	ρ
MNIST	LeNet-5	99.17 ± 0.04	99.17 ± 0.08	0.05
CIFAR-10	VGG-16	93.13 ± 0.39	93.76 ± 0.16	~ 0.0005
	VGG-19	93.36 ± 0.26	93.80 ± 0.09	~ 0.0005

a : 精度 (%)

ρ : データ圧縮率

機械学習での行列圧縮のメリット

- 行列の情報を蓄えるためのデータ量を大幅に圧縮できる
 - テンソルの行列積分解と同様
 - 行列の演算コストの低下
 - 大きな行列を直接かける代わりに、小さいテンソルを順番にかけることでコストが低下
 - 訓練・予測時間の低減
- 
- 無駄な自由度の削減による最適化（訓練）の効率アップ
 - テンソルネットワーク近似で性能が変わらないことは、元の表現には「無駄」が多いことを示唆
 - 過学習、汎化性能への影響も期待？

コンテンツ

- 量子状態の表現と古典計算の困難
- 量子状態の情報圧縮
 - テンソルネットワーク分解と量子エンタングルメント
 - 種々のテンソルネットワークの紹介
- テンソルネットワークの多彩な応用例
- 産業応用の可能性？
- まとめ

まとめ

- テンソルネットワーク分解を用いると大きな量子状態を古典計算機でも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ルリング（面積則）が大事
 - 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
- 産業応用の可能性？
 - テンソルネットワークを用いて種々のタスクを（古典）計算することで、比較的容易に将来の量子コンピュータ利用へとつなげられるかも
 - 深層学習などにテンソルネットワークによる情報圧縮を適用することで計算効率を向上できる可能性

参考文献

- 日本語の文献

- 「テンソルネットワークの基礎と応用: 統計物理・量子情報・機械学習」
(SGCライブラリ 169), 西野友年 サイエンス社 (2021)
- 数理科学 2022年2月号特集 「テンソルネットワークの進展」
- 「テンソルネットワーク形式の進展と応用」 西野友年, 大久保毅 日本物理学会誌 2017年10号
- 「テンソルネットワークによる情報圧縮とフラストレート磁性体への応用」 大久保毅、物性研究 2018年

- 英語の文献

- R. Orús, “A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states”, Annals. of Physics **349**, 117 (2014). (レビュー)
- Tao Xiang, “Density matrix and tensor matrix renormalization”, Cambridge University Press, 2023. (教科書)
- [tensornetwork.org](https://www.tensornetwork.org) の “Review Articles and Learning Resources” に載っている文献・ビデオ