

# 昔話も少し (?)

思い起こせば  $n$  年前、ポーランドで開催された ICM '94 期間中のこと。(西野の感想) 昼食の後、ワルシャワ市内の公園で(美しい噴水を見つつ)利根川教授(神戸大)と雑談をしているうちに、「DMRG やりましょか?」という話が持ち上がったのが、全ての始まりです。そ

西野・奥西・引原 物性研究(1997)より

## TePS + CTMRG in 2000

これをそのまま 1 次元ずつ高次元化すると 3 次元イジング模型の 2 次元的に広がった層間転送行列に対して、変分状態を 2 次元古典系で与える形式が得られます。このとき、変分エネルギーは角転送行列繰り込み群で評価することができ、変分関数を最適化することによって、熱力学量が得られます。<sup>14)</sup> この方向で、より高精度な計算を行うには変分関数を高次元化されたテンソル積状態で与える形式が有望です。まだまだ改善すべき点は多いのですが、図 7 に示すように、イジング模型を対象にしたテスト計算では、着実に計算の精度が向上しつつあります。

西野・日永田・奥西 物理学会誌(2000)より

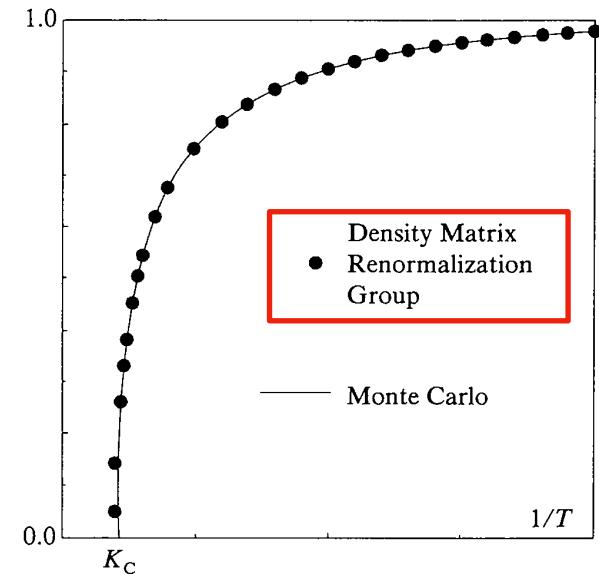
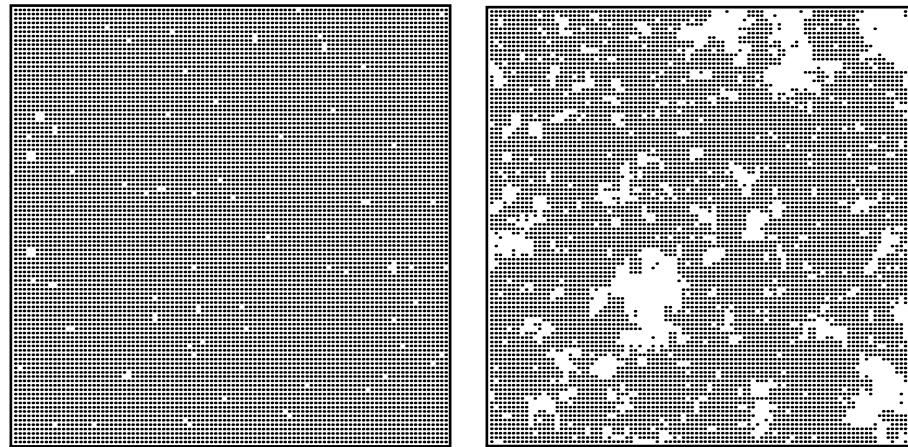


図 7 3 次元イジング模型の自発磁化。

# 昔話も もう少し (?)

## Pattern Generation from IRF-MPS

少し高い温度でフラクタル状の模様を描く熱平衡状態の有様を示している。百聞は一見にしかず、直感的な定性的理解を助ける図の作成は研究に有効であるばかりでなく、広報教育啓蒙活動、ついでに予算申請書作成のポンチ絵作りにも重宝する。このような、カノニカルアンサンブルから 1 枚だけ抜き出して来た спин配列を **スナップショット** と呼ぼう。図 1 を見ると、誰でも「ああ、モンテカルロ・シミュレーションのある瞬間か」と想像するだろう。実は、**ここに示したスナップショットは CTMRG (または DMRG) を用いて作図したものだ。** 本稿では、その方法の概略を説明する。



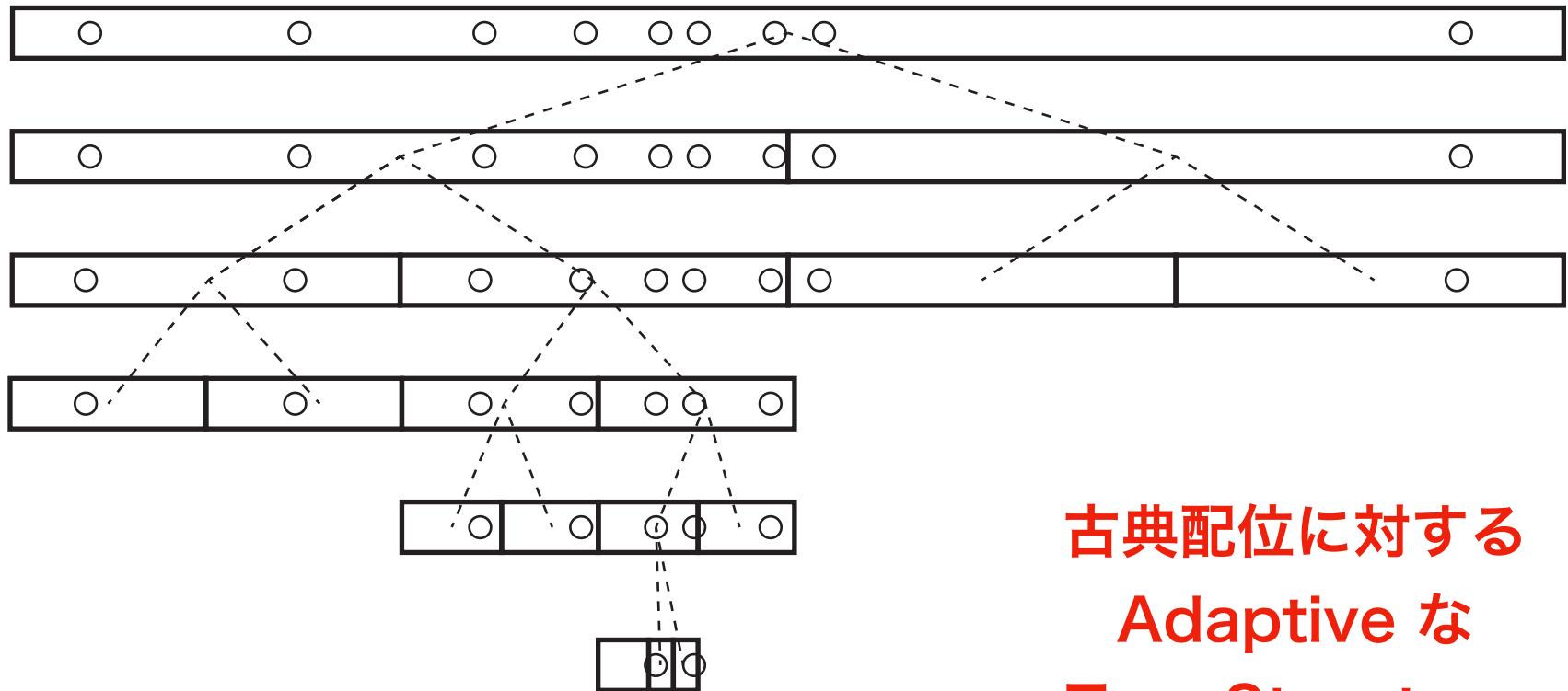
西野・上田（幸）・大谷・西尾・Gendar 数理解析研講究録 (2006) より

Fig. 1. 溫度が  $T = 1.5 < T_c$  (左) および  $2.27 > T_c$  (右) である際の、イジング模型の熱平衡状態におけるスピン配列。表示領域の大きさは  $100 \times 100$  で、システムサイズは無限大。

# Tree 構造は意外な所に顔を出す

人口密度の決定、球状星団や銀河のシミュレーション, etc.

密と疎を定量化できますか？ 空間分解能は？



古典配位に対する  
Adaptive な  
Tree Structure

箱の長さの逆数が、およそその密度

この Tree で粒子を管理すると何かと便利らしい

# 波動関数を Tree Tensor Network で 表してみなさい

西野友年（神戸大）

## Abstract

分子や原子核の基底波動関数など有限多体系を Tensor Network (TN) で扱う場合、Matrix Product State (MPS) を変分関数とする DMRG が定番の解析手段となる。計算の結果として得られた N-site 系の MPS には、系を M-site の部分系と、残りの N-M-site 部分系に分割した際の Entanglement Entropy (EE) が付随している。さて、**MPS は Tree Tensor Network (TTN) の特殊な場合**であって、**MPS から任意の TTN へと、局所的な枝の組み替え(基本変形)を通じて変形できる。**こうして得られる膨大な数の TTN のうち、**自然なもの (?) はどんな形をしているだろうか?** EE を指標として「自然な TTN」を構築するアルゴリズムについて、まず解説する。この考え方を有限系の DMRG に持ち込むと、**自然な TTN を変分関数とする計算手法**へと至る。MPS は Tensor Train の別名でデータ サイエンスにも用いられて久しいが、こちらにも自然な TTN を持ち込むことが可能である。これらの応用で Tree 形状の最適化をどのように行うかは、まだまだ蓄積に乏しく、検討課題となっている。

テンソルネットワーク形式を用いた数値解析の主な目的は、大規模な系の固有状態  $|\psi\rangle$  の探索や、状態の時間発展を追跡することなどである。計算を進めるにあたっては、まずネットワークの形状を事前に決定する必要がある。一方でそれぞれの系に見合った、効率的なネットワークの形状は、求める状態  $|\psi\rangle$  を手掛けかりにして構築する必要がある。この鶏と卵のような状況は、どのように解決すれば良いだろうか？この疑問は、テンソルネットワーク形式の応用にあたっての、核心をなす学術的な問い合わせでもある。模範的な回答は

- 数値計算の最中に順次、ネットワーク形状の組み換えを行えば良い。

であろう。テンソルが 1 次元的に接続された行列積状態を用いる密度行列繰り込み群では、この方針に沿って サイトの順番を自動的に調整 が試みられ、既に一般的なものとなっている。ただ、2 次元的・3 次元的に広がる物理系を次元に伸ばして扱うには限度がある。本研究ではネットワーク形状を木構造まで拡張し、局所テンソル最適化の途上で、ネットワークの接続を組み換える精密な計算アルゴリズムを開発していく。木構造には、直交性を満たす局所テンソルを組み合わせた正準な形で表現できる長所があり、様々な数値計算が安定して行える。複数の木構造を比較対象として、系が持つエンタングルメントの構造を最も自然に表す接続を自動的に採択して行く点に本研究の創造性があり、木構造上でエンタングルメント・エントロピーあるいは相互情報量を指標とする点が本研究に独自の取り組みである。

後で語る  
ウンチク

# Tree Structure による波動関数の表現

8 脚テンソルを特異値分解により 2 つの Tensor の縮約に変形する



さて、 $T_{abcdefgh}$  の脚を  $cd$  と  $abefgh$  に分けて考える場合には、脚の順番を保って  $T_{ab(cd)efgh}$  と書くことにしよう。そして特異値分解を使って

$$T_{ab(cd)efgh} = \sum_{\mu} U_{(cd)\mu} D_{\mu} V_{(abefgh)\mu}^* = \sum_{\mu} U_{(cd)\mu} \tilde{T}_{ab\mu efgh} \quad (7.5)$$

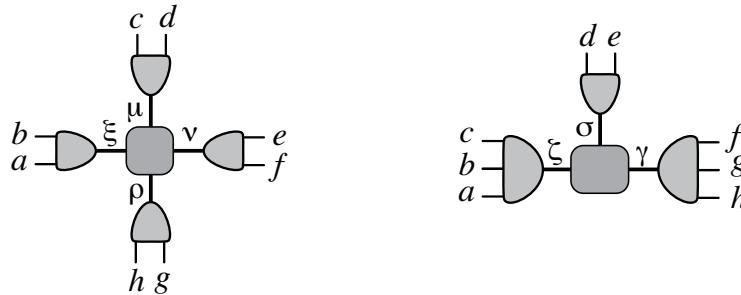
と式変形する。「テンソルネットワーク業界の悪しき (?) 捉」の 1 つに

- 脚の文字が異なるテンソルは別のものとみなす

という慣習があり、式 (7.2) と式 (7.5) では同じように  $U, D, V^*$  が並んでいても、例えば式 (7.2) の  $U_{(ab)\xi}$  と式 (7.5) の  $U_{(cd)\mu}$  は異なるものだ。式

どこから分割を始めるかの自由度がある点に注意

# Tree Structure による波動関数の表現



8 脚テンソルの TTN  
表現に限っても  
多数の表現方法がある

$T_{abcdefgh}$  の脚にはいろいろな分け方があり、 $_{abc}$  と  $_{de}$  と  $_{fgh}$  に分けると

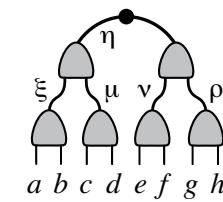
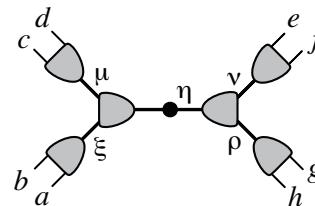
$$T_{abcdefgh} = \sum_{\zeta\sigma\gamma} U_{(abc)}\zeta U_{(de)}\sigma U_{(fgh)}\gamma \tilde{T}_{\zeta\sigma\gamma} \quad (7.9)$$

と、上図右に示した形へと高次特異値分解することもできる。

$$T_{abcdefgh} = \sum_{\xi\mu\nu\rho\eta} U_{(ab)}\xi U_{(cd)}\mu \left[ U_{(\xi\mu)\eta} D_\eta U_{(\nu\rho)\eta} \right] U_{(ef)}\nu U_{(gh)}\rho \quad (7.12)$$

式が長くて何がどうなっているのか、わかり辛いのでダイアグラムに描いてみる。

どれを量子系基底状態の  
変分問題に使うか？



上図の 2 つのダイアグラムは「つながり方」が同じなので、等価なものである。黒い点が  $D_\eta$  を表していて、他の 3 脚テンソルは全て  $U$  に対応している。図形的には、木が枝分かれしているように見えるので、このようにループのないダイアグラムで描かれるテンソルネットワークは木構造ネットワークまたは樹状ネットワーク (Tree Tensor Network, TTN) と呼ばれる。

# Tree Structure への執着とサボりの日々

2017年・基盤(C)申請書から

例えば、**木構造テンソルネットワーク**を念頭に置くと、一本の幹から一方向に枝が伸びるだけの行列積状態から、一様に枝分かれして行く二進木構造まで、様々な可能性が浮かんで来る。互いに異なる木構造は、「3本の枝から、どの2本が先に分岐するか」が異なるだけの、基本的な変形を繰り返して結ぶことができる。この、構造上の変形に対応する木構造テンソルネットワークの変換は、特異値分解によって明示的に与えられる。例えば、密度行列繰り込み群(DMRG)で得られるNサイトの行列積状態があれば、

★ 2つのサイトのペアで、その他の部分と最も弱くエンタングルしているもの

を  $N(N-1)/2$  個の可能性から一つ選び出せば良い。その部分を二股に分かれた木構造にする、テンソルネットワークの変形が自然と浮かぶ。そして、変形前と変形後の両者に対して、テンソルの自由度を制限した上で**エネルギー期待値を比較し、近似の精度が良い方を選ぶ。**この操作を繰り返すことにより、木構造の範囲内で最適なネットワーク構造へと到達する筈である。これは、DMRGの範疇で、最も強くエンタングルするペアを探す従来のアプローチ [Legeza, Phys. Rev. C92, 051303 (2015)] とは一線を画すものである。木構造テンソルネットワークに対する基底エネルギーの変分評価方法は、少なくとも形式的には、以上の通り簡便に構成・実装できる。

この時点ではまだエネルギーに着目していた  
… Roy らの論文に接して悔い改める

波動関数が与えられた時、どのサイトとどのサイトが  
強く結びついているか、わかるだろうか？

## ちょっと面白い論文が転がってます

Roy et al, arXiv: 1906.05146

### Entanglement as geometry and flow

Sudipto Singha Roy,<sup>1</sup> Silvia N. Santalla,<sup>2</sup> Javier Rodríguez-Laguna,<sup>3</sup> and Germán Sierra<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Física Teórica, UAM-CSIC, Universidad Autónoma de Madrid, Cantoblanco, Madrid, Spain*

<sup>2</sup>*Dept. de Física and Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC), Universidad Carlos III de Madrid, Spain*

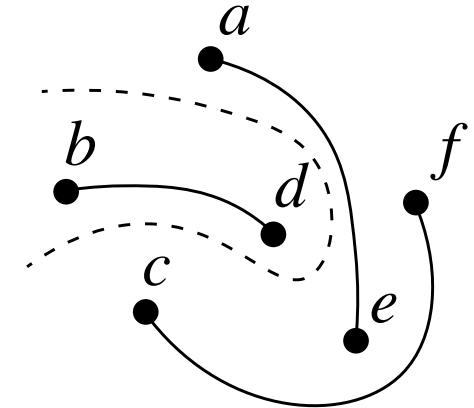
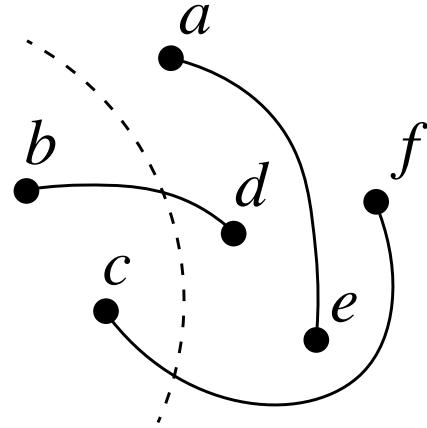
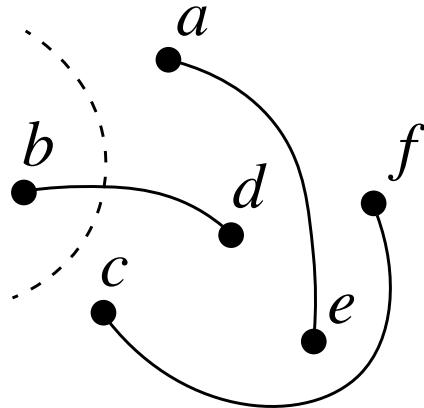
<sup>3</sup>*Dept. de Física Fundamental, UNED, Madrid, Spain*

(Dated: June 13, 2019)

We explore the connection between the area law for entanglement and geometry by representing the entanglement entropies corresponding to all  $2^N$  bipartitions of an  $N$ -party pure quantum system by means of a (generalized) adjacency matrix. In the cases where the representation is exact, the elements of that matrix coincide with the mutual information between pairs of sites. In others, it provides a very good approximation, and in all the cases it yields a natural *entanglement contour* which is similar to previous proposals. Moreover, for one-dimensional conformal invariant systems, the generalized adjacency matrix is given by the two-point correlator of an *entanglement current* operator.

# 6-site の $S=1/2$ Heisenberg spin system の(基底)状態

3組の dimer (singlet pair, Bell pair) である場合を考える



系を二分割した際の Entanglement Entropy は?

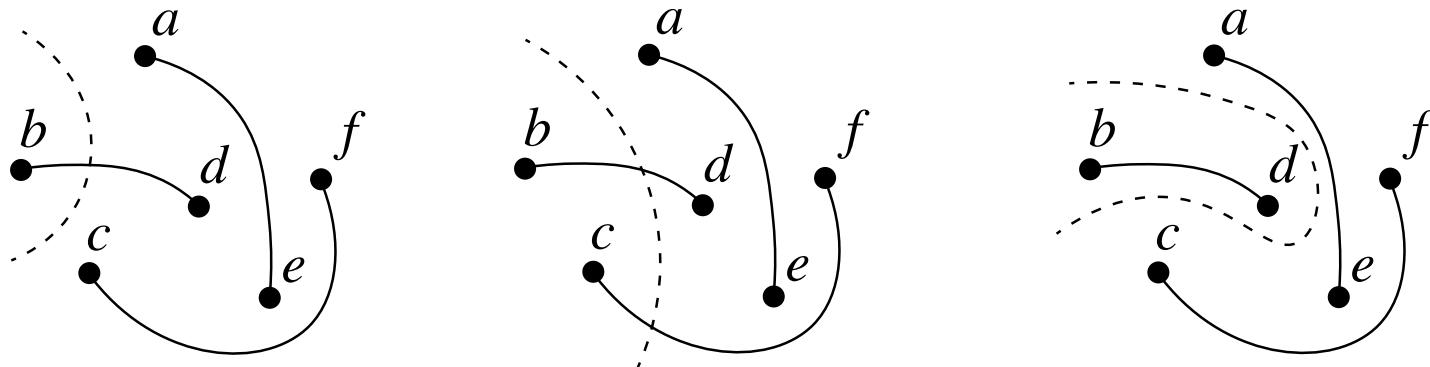
→ 分割の境界 (点線) が dimer を横切る回数  $\times \ln 2$

色々な分割で EE を求めれば、pair を知り得る

分割の場合の数は  $2^{6-1} - 1 = 31$

Roy らは一般的な量子状態について、可能な分割すべてに対し EE を求め、それを再構成する pair function  $J_{ij}$  を推定した

例: dimerize していれば、dimer 間で 1 その他 0



推定の方法: 回帰分析を用いる。二分割それぞれについて

- (a) 波動関数を特異値分解して EE を求める
- (b) 分割の境界を横切る pair について  $J_{ij}$  を合計する

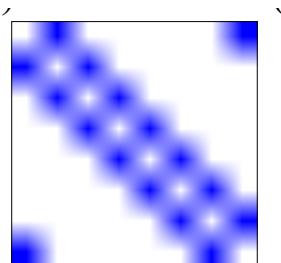
[ (a) - (b) ]<sup>2</sup>を全ての分割について足し合わせる (error)

error が最小になるよう pair function を調整する

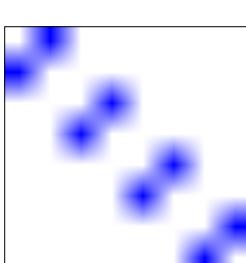
- $N$  個の site を 2 つに分割する方法は  $2^N$  通りある
- この「断面」ごとに、Entanglement Entropy が定まる
- このデータを元に、Entanglement 構造を推定できるか？

## 要するに断層写真撮影 (Computed Tomography)

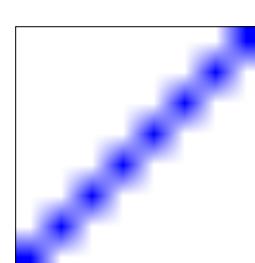
- Entangled Pair を敷き詰めた状態であれば、画像が得られる
- GHZ 状態のようなものは検出できない
- 遠く離れたペアが entangle していても、もちろん検出できる



AKLT



dimer



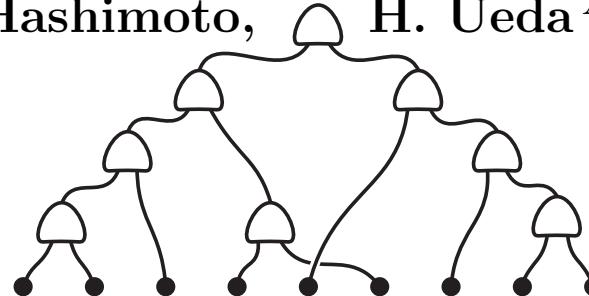
rainbow

(裏話あるかも)

## Tree Tensor Network を用いた量子系の最適表現 I

神戸大理, 理研 R-CCS<sup>A</sup>, さきがけ<sup>B</sup>, 新潟大理<sup>C</sup>西野友年, 橋本豊, 上田宏<sup>A,B</sup>, 奥西巧一<sup>C</sup>

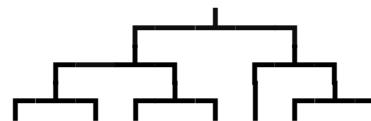
## Adaptive Tree Tensor Network Expression for Quantum States I

*Kobe Univ., <sup>A</sup>RIKEN R-CCS, <sup>B</sup>PRESTO, <sup>C</sup>Niigata Univ.*T. Nishino, Y. Hashimoto, H. Ueda<sup>A,B</sup>, and K. Okunishi<sup>C</sup>

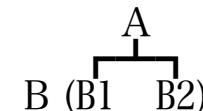
与えられた量子系に対して **Adaptive** なネットワークを自動生成することは、テンソルネットワーク形式における重要な課題の一つである。古くは Legeza らによる、Matrix Product State (MPS) の制約の中での、サイトの順番の最適化 (arXiv:cond-mat/0305336) がその一例である。本講演では Tree Tensor Network (TTN) の範囲内で木構造を最適化する手順を考えて行く。この考察に基づく密度行列繰り込み群 (DMRG) の拡張についても論じたい。

- (1) Tomasi ら (arXiv:1608.07183)、Hyatt ら (arXiv:1704.01974) のように相互情報量を用い、強く結びついているサイトから順に繰込群変換 (isometry) を作用させると、木構造が自動的に定まる。
- (2) 互いに結び付く2つの isometry や、それらから伸びる leg に対する局所的な入れ替え操作 (Local Move) を繰り返せば、如何なる木構造も互いに移り変わることができる。leg が担う Entanglement Entropy (EE) が下がる方向へと Local Move を繰り返せば、与えられた状態に Adaptive な木構造へと近づいて行けるだろう。
- (3) TTN は MPS と同様に、任意の leg を頂点として直交となる力ノニカル化ができる。従って、与えられたハミルトニアンの基底状態を TTN によって近似することが、DMRG と同様に可能である。
- (4) DMRG による基底 MPS の導出を出発点として、(1) (2) により Adaptive な TTN を造り、(3) により TTN を改良して行く — このような反復計算について「妄想」しても良いじゃろう。

図：木構造



図：3 分岐

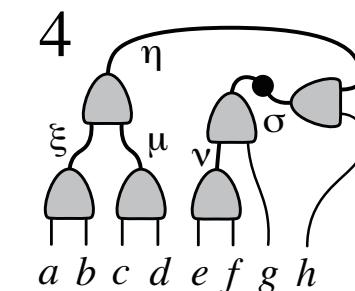
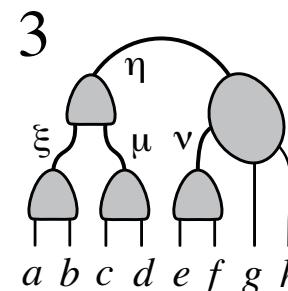
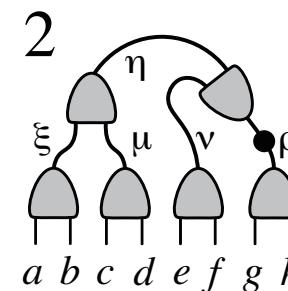
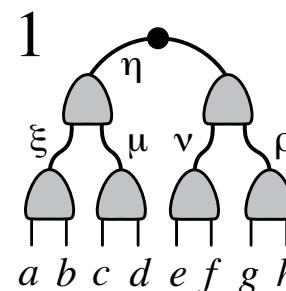


木構造テンソルネットワークの構造最適化という目的を達成するために、本研究では解決すべき課題を幾つかの段階に分けて、以下の通り取り組んで行く。まず、与えられた系が部分系AとBに2分割されている状況で、Bを更にB1とB2に分割する方法を考える。上図右側に示した通り、これは木構造が分岐する部分に対応している。木構造が「自然なもの」であれば、3分岐するどの線上にも、大きなエンタングルメントは存在しないはずである。相互情報量  $I(B1, B2)$  が小さく抑えられているとも表現できる。部分系Bのあらゆる分割から、この条件を満たす最適な候補を探し出すことが、目的達成への第一段階である。あらゆる木構造は、局所的な枝の組み換えにより互いに移り変わることができる。テンソルネットワーク形式を用いた局所テンソル最適化の途上で、特定の枝（あるいは幹）に大きなエンタングルメント・エントロピー S が現れた場合、その周囲の分岐を組み換えることにより、S の値を抑えることが可能である。組み換えを繰り返すことにより、より自然な木構造の探索を行う計算手順を効率的に実装して行くことが、目的達成への第二段階である。プログラム

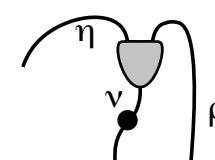
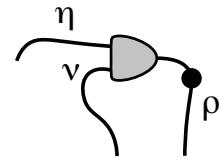
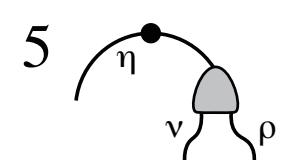
コンセプトとしては、だいぶん具体化されて来た  
計算するのは大変

# 手続き的にはどんな作業になるのか?

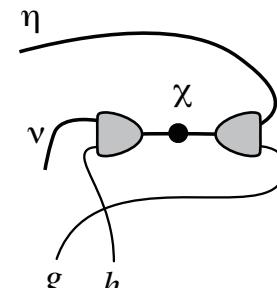
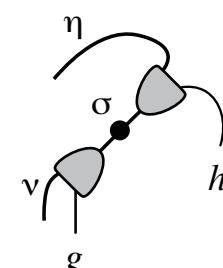
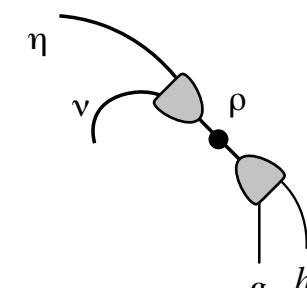
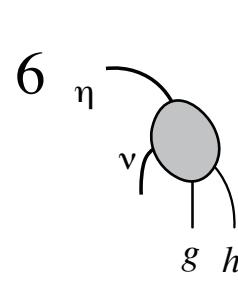
2022年9月・学会予稿より



直交性を満たす 3-leg tensor (isometry) から構成され、ネットワーク形状に loop が含まれない Tree Tensor Network (TTN) は、DMRG で用いられる Matrix Product と同様に、変分波動関数として都合の良い性質を持っている。図 1, 2, 4 は、8 site の系を記述する TTN の内から、適当に 3 つを選んで描いたものだ。黒丸で描かれた特異値は、図 5 に描いた直交化を通じて

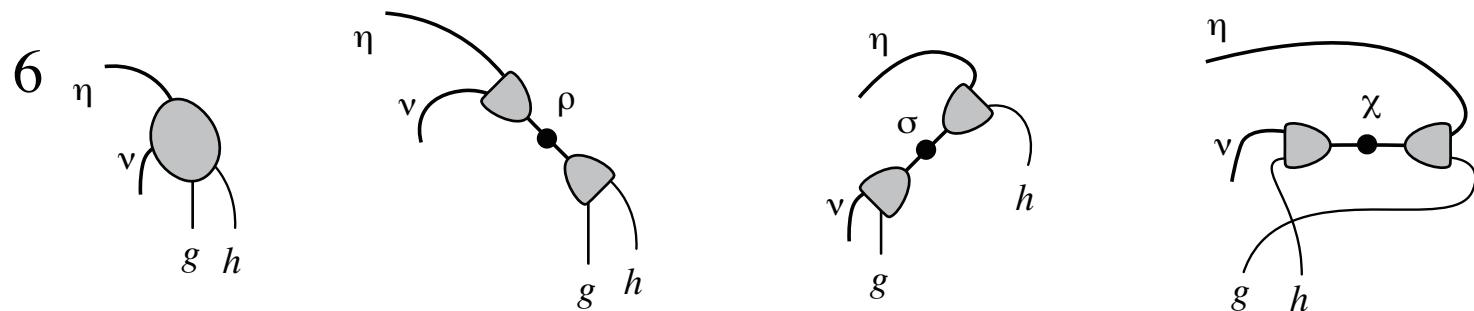


位置をどこにでも移動できる。従って図 1 と図 2 は、同じような TTN だと考えて問題ない。図 3 のように特異値と 2 つの isometry を融合させて、元とは脚の分け方を変えて特異値分解すると、図 4 のように元とは異なる TTN を生成できる。脚の分け方は図 6 のように 3 通りある。



# 手続き的にはどんな作業になるのか?

2022年9月・学会予稿より



与えられた TTN に対して、このような局所的な組み替え（基本変形）を繰り返し行うと、任意の形状を持つ TTN へと変形できる。異なる形状の TTN が何個あるかの数え上げは数学者に任せることにしよう。数値計算のプログラミングの観点からは、局所的な枝の組み替えがあった時に、その影響がどこまで及ぶかが問題となる。例えば spin Hamiltonian の期待値を求める場合に、どれだけ再計算が必要となるだろうか？また、TTN を変分関数として DMRG のような変分計算を行う場合に、繰り込まれたハミルトニアンをどう再計算すれば良いだろうか？これらについて、考察の結果を幾つか議論して行く。MERA で局所的な枝の組み替えがあった場合にも同様な再計算が発生する。MERA の場合は、まず disentangler の移動から調べて行かなければならない。以上、ゴリゴリに technical な話ばかりであった。量子回路の一部に組み替えがあった場合に ... と想像を膨らませると、少しほは物理的に (?) 楽しめるだろうか。

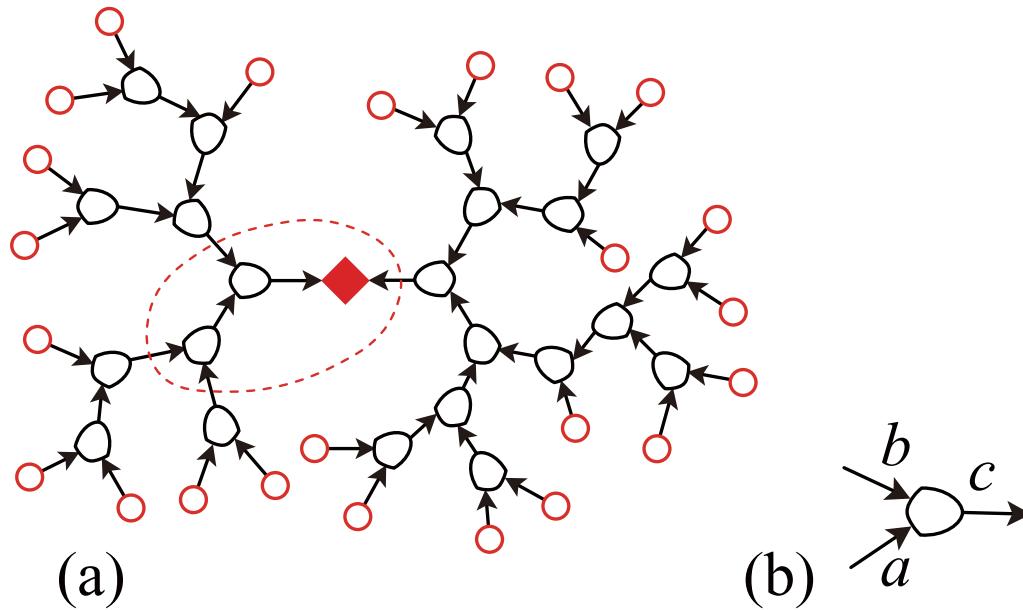


FIG. 1. (a) Schematic picture of the binary tree tensor network (TTN). The ovals (black) and circles (red) represent isometries and bare spin degrees of freedom, respectively. The arrows are the tensor legs, which we call the (auxiliary) bonds. The rhombus (red) represents the singular values. The part surrounded by the dotted curve (red) is the central area. (b) The isometry  $V_{ab}^c$ . Directions of the bonds are shown by arrows.

TTN には上も下も中心もない

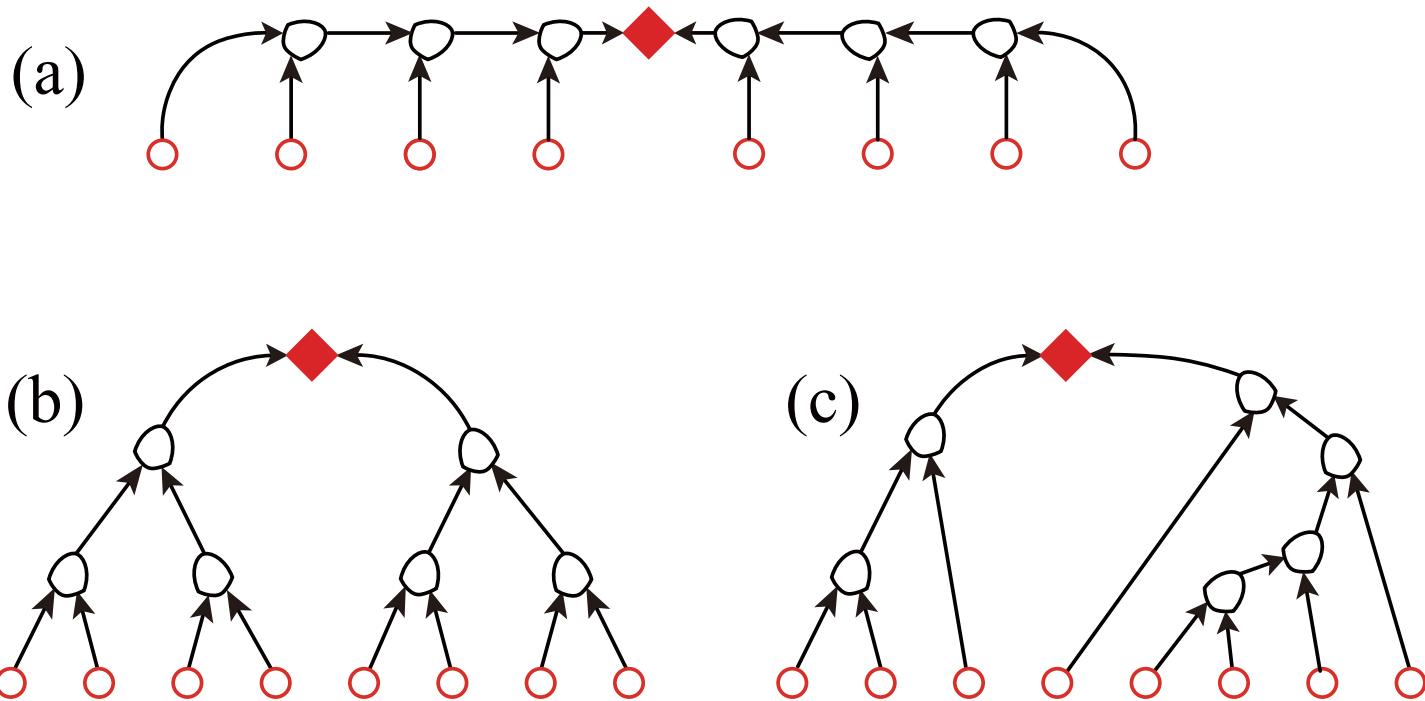


FIG. 2. A variety of tree tensor network (TTN) geometries.

- (a) The matrix product network (MPN). (b) The perfect binary TTN.  
(c) An example of the nonuniform TTN.

いろいろな TTN が考えられる

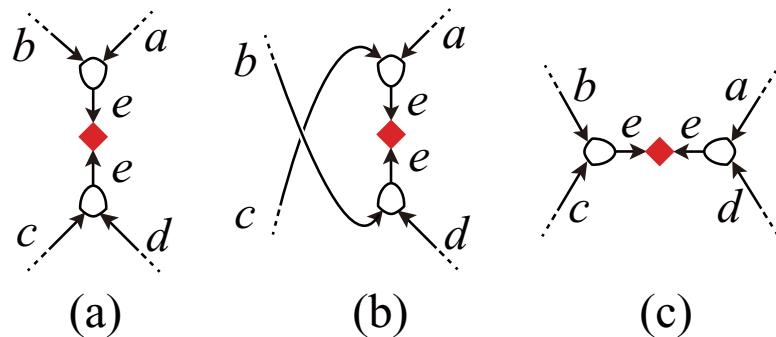


FIG. 4. Three possible applications of singular-value decomposition (SVD) to  $\tilde{\Psi}_{abcd}$ , as candidates for the local reconnection.

in Fig. 3(c). We draw this diagram again in Fig. 4(a). As in Figs. 4(b) and 4(c), however, there are the other two possible arrangements of the collective indices [64]. If we adopt  $ac$  and  $bd$ , the SVD yields

$$\tilde{\Psi}_{abcd} = \sum_e V_{ac}^e D'_e V_{bd}^e, \quad (6)$$

as shown in Fig. 4(b). If we choose  $ad$  and  $bc$ , we obtain

$$\tilde{\Psi}_{abcd} = \sum_e V_{ad}^e D_e'' V_{bc}^e, \quad (7)$$

より小さなEE  
を導出する分割  
を選ぶ

(どの EE か?!)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N-1} J_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1},$$

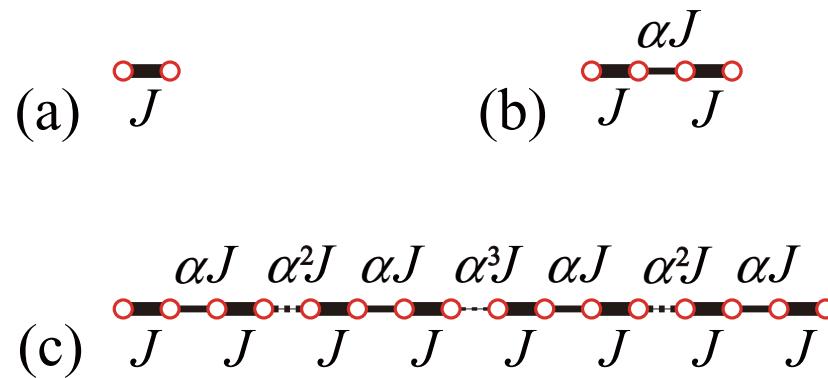
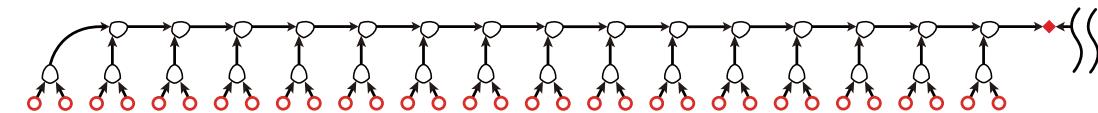
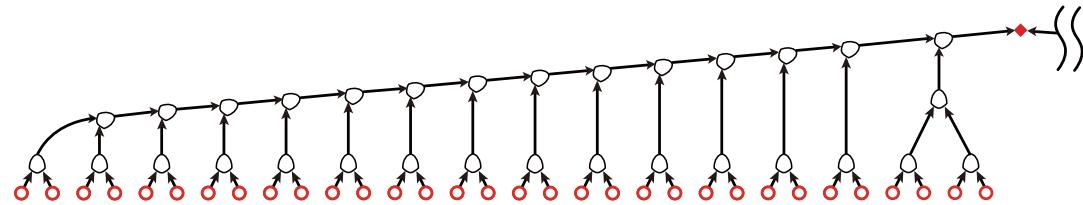


FIG. 6. Inhomogeneous interactions on the hierarchical chain when (a)  $N = 2$ , (b)  $N = 4$ , and (c)  $N = 16$ .

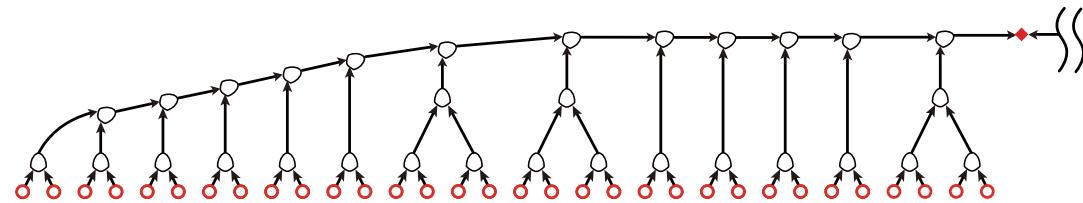
この系の自然な TTN は?



(a)



(b)



(c)

FIG. 10. Optimal structures for (a)  $\alpha = 1.00$ , (b)  $\alpha = 0.80$ , and (c)  $\alpha = 0.75$ . The system size is  $N = 64$ . Only the left half of the tree tensor network (TTN) is presented, while the right half is symmetric with respect to the center of the system.

この系の自然な TTN は?

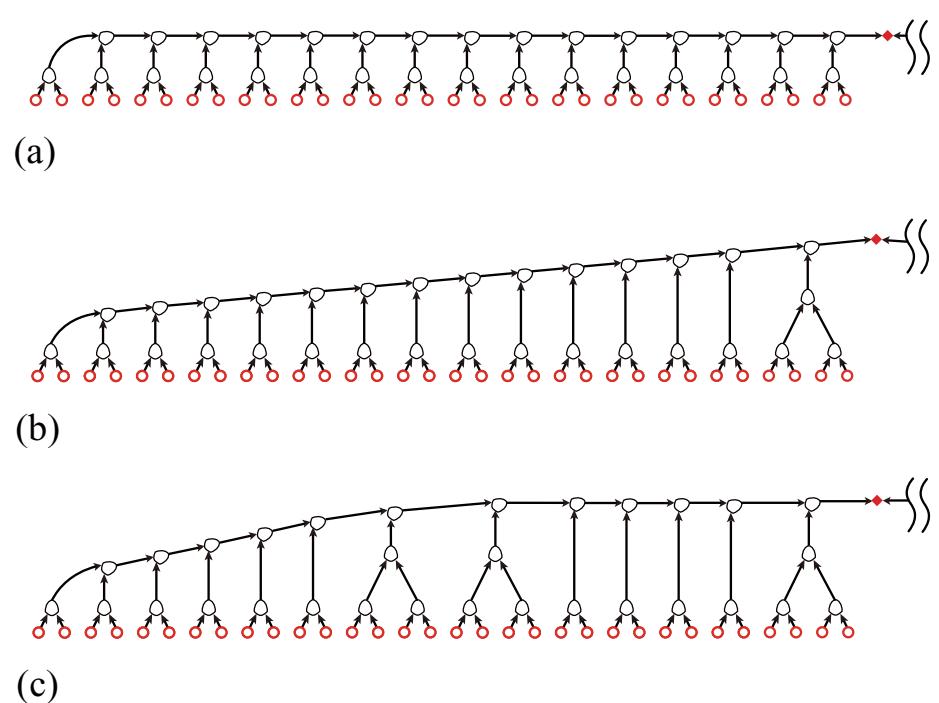


FIG. 10. Optimal structures for (a)  $\alpha = 1.00$ , (b)  $\alpha = 0.80$ , and (c)  $\alpha = 0.75$ . The system size is  $N = 64$ . Only the left half of the tree tensor network (TTN) is presented, while the right half is symmetric with respect to the center of the system.

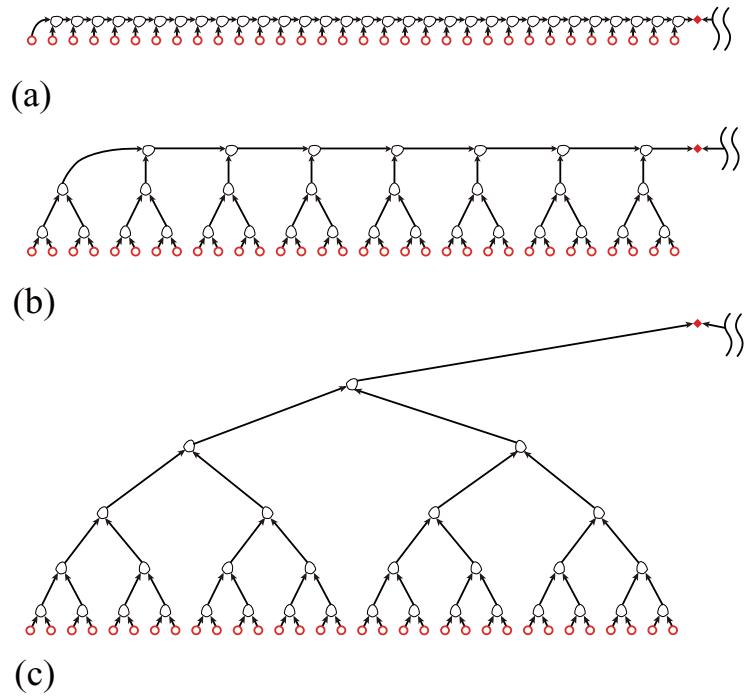
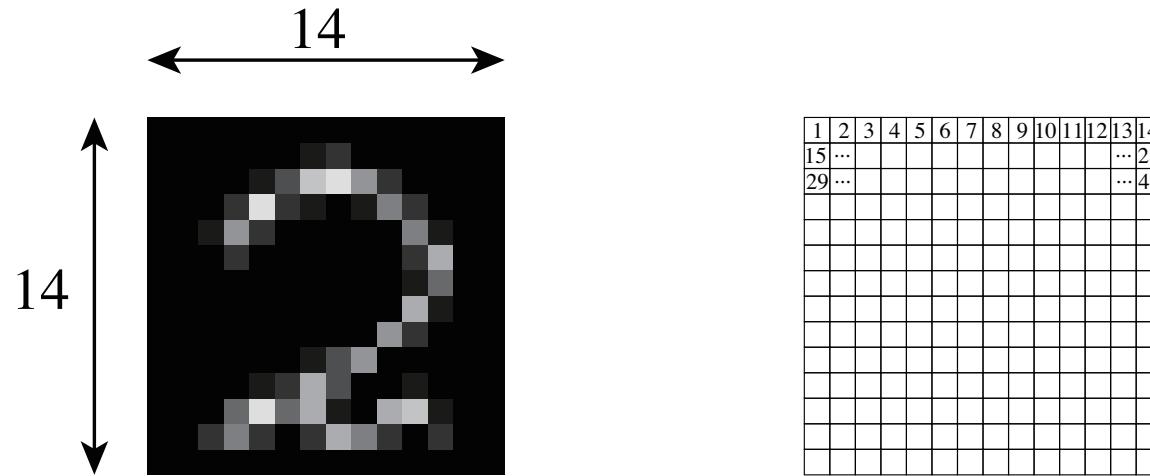


FIG. 7. Optimization process when  $\alpha = 0.5$  and  $N = 64$ . (a) The initial matrix product network (MPN). (b) After the first sweep. (c) Any time after the second sweep. Only the left half of the tree tensor network (TTN) is presented, while the right half is symmetric with respect to the center of the system.

この系の自然な TTN は？

### 他の分野での応用 パターン認識

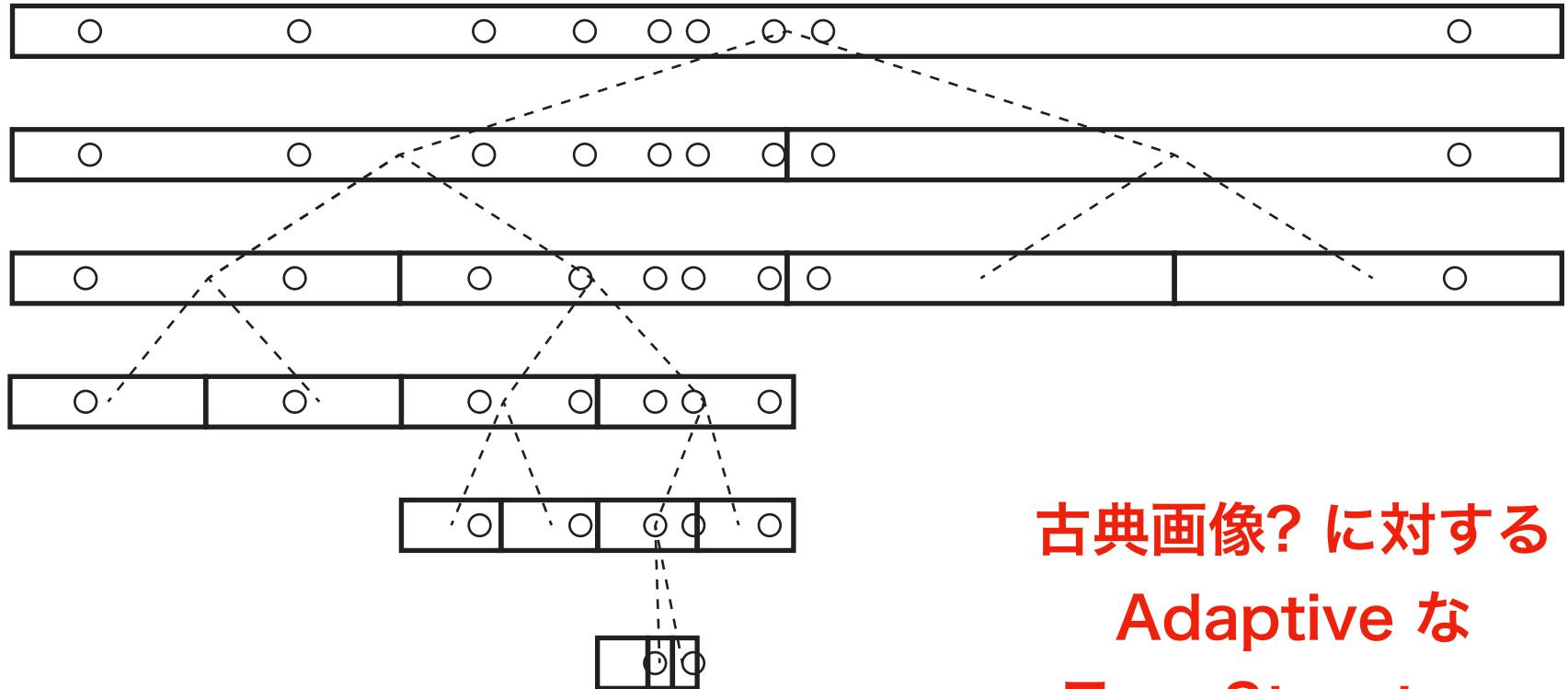
黒板に書いた数字の見分けを考えてみよう。黒板をカメラで撮影して、画像を計算機に入力することが最初の作業だ。人間が見て読めるならば、画像が少しボケていたり荒い画像でも問題ない。数字であれば、下図に示した縦横に 14 個くらいの解像度で充分だ。この画像は誰が見ても  $\ell = 2$  だろうか。ピクセル（画素）の総数は  $M = 14^2 = 196$  となる。



# Entanglement Entropy が良い指標か? という点については検討が必要

# 画像 Tree の初期値はどう選ぶ?

まだ conjecture の段階 ... (予算申請しよか)



古典画像? に対する  
Adaptive な  
Tree Structure

箱の長さの逆数が、およその解像度

# 波動関数を Tree Tensor Network で 表してみなさい

西野友年（神戸大）

## Abstract

分子や原子核の基底波動関数など有限多体系を Tensor Network (TN) で扱う場合、Matrix Product State (MPS) を変分関数とする DMRG が定番の解析手段となる。計算の結果として得られた N-site 系の MPS には、系を M-site の部分系と、残りの N-M-site 部分系に分割した際の Entanglement Entropy (EE) が付随している。さて、**MPS は Tree Tensor Network (TTN) の特殊な場合**であって、**MPS から任意の TTN へと、局所的な枝の組み替え(基本変形)を通じて変形できる**。こうして得られる膨大な数の TTN のうち、自然なもの(?)はどんな形をしているだろうか? EE を指標として「自然な TTN」を構築するアルゴリズムについて、まず解説する。この考え方を有限系の DMRG に持ち込むと、**自然な TTN を変分関数とする計算手法**へと至る。MPS は Tensor Train の別名でデータサイエンスにも用いられて久しいが、こちらにも自然な TTN を持ち込むことが可能である。これらの応用で Tree 形状の最適化をどのように行うかは、まだまだ蓄積に乏しく、検討課題となっている。

**MERA は? PEPS, TePS は?**