

量子物理とテンソルネットワーク

東大理 量子ソフトウェア寄付講座 大久保毅



JST さきがけ 「量子情報処理」 領域

「テンソルネットワーク状態を活用した量子多体系基底状態計算手法の開発」

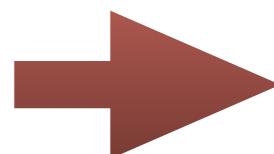
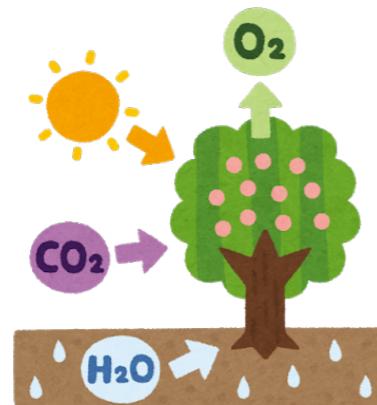
コンテンツ

- イントロダクション
 - 量子多体問題とその困難
 - テンソルネットワーク
- テンソルネットワークの応用
 - キタエフ模型とスピン液体のテンソルネットワーク表現
- 量子コンピュータへの展開とスピン液体の量子回路表現
- まとめ

量子多体問題

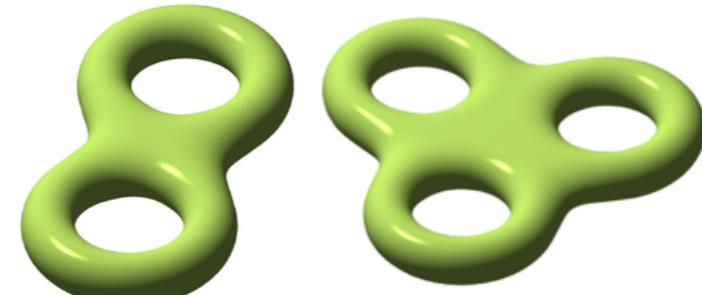
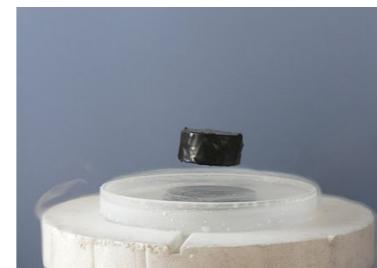
物質科学における多彩な現象

- ・ 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=シュレディンガーアルゴリズム

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \mathcal{H} |\Psi\rangle \quad \begin{array}{l} \mathcal{H} : \text{ハミルトニアン} \\ |\Psi\rangle : \text{状態ベクトル} \end{array}$$



時間に依存
しない場合

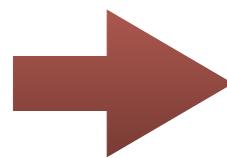
$$\mathcal{H} |\Psi\rangle = \frac{E}{\text{エネルギー}} |\Psi\rangle$$

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

- 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

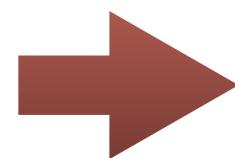


古典的な計算機でこの問題を（厳密に）解くには、
膨大なメモリと計算時間が必要

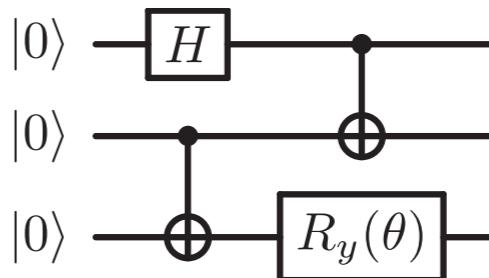
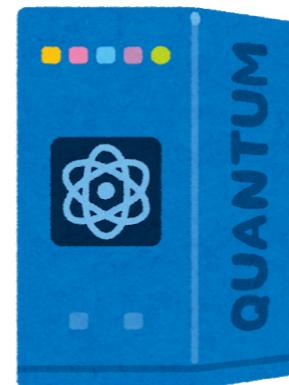
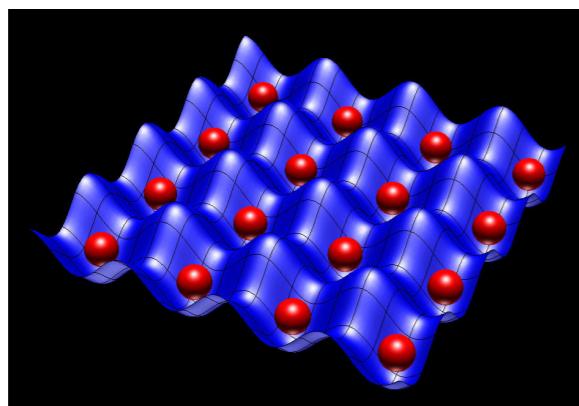
例：量子ビットの厳密シミュレーションは50 qubit程度が限界

制御された量子系：

- 量子シミュレータ
- 万力量子コンピュータ



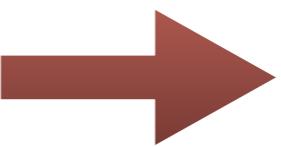
量子多体系の情報をそのまま扱え、
(理想的には) 指数関数の困難はない



(古典コンピュータでの) アプローチ：変分法

例：最低エネルギー状態

$$\mathcal{H}|\Psi_0\rangle = E_0|\Psi_0\rangle$$



コスト関数： $F = \frac{\langle \tilde{\Psi} | \mathcal{H} | \tilde{\Psi} \rangle}{\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle}$

F の最小値 = E_0

その時の $|\tilde{\Psi}\rangle = |\Psi_0\rangle$

変分法

- 固有値問題の近似解を得る方法の一つ
- F の最小値を 制限された空間 の範囲で探す

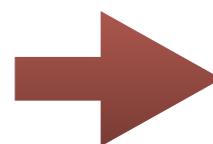


$|\tilde{\Psi}\rangle$ の形を仮定する = 試行関数、変分波動関数

- 良い試行関数 → 高精度の最低エネルギー



- 複雑な試行関数 → コスト関数の計算量が増大



テンソルネットワークによる効率的な試行関数

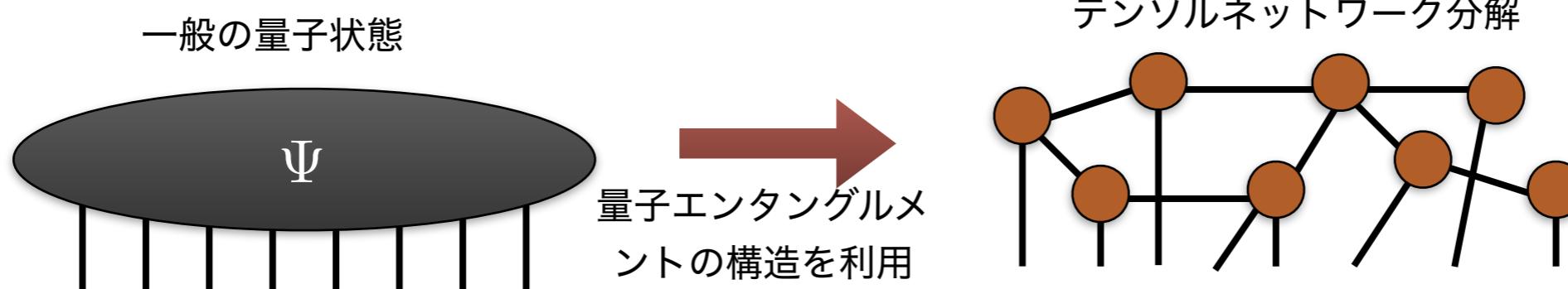
テンソルネットワークによる情報圧縮

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状態：

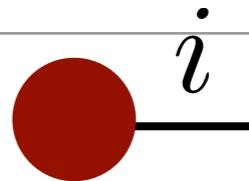
情報のエンタングルメントに注目することで、
適切な部分空間を構成



ダイアグラムを用いたテンソル表記

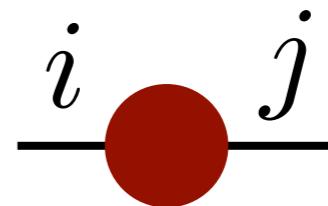
- ベクトル

$$\vec{v} : v_i$$



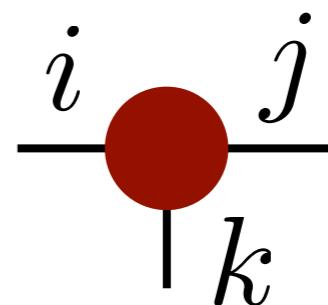
- 行列

$$M : M_{i,j}$$



- テンソル

$$T : T_{i,j,k}$$



テンソルの積（縮約）の表現

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

$$i \textcolor{teal}{C} j = i \textcolor{red}{A} k \textcolor{blue}{B} j$$

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

$$k \textcolor{teal}{D} i \textcolor{blue}{B} j = \textcolor{teal}{C} k \textcolor{blue}{B} i \textcolor{red}{A} j$$

*n階のテンソル=n本の足

量子多体状態のテンソルネットワーク表現

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

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_N\}} \frac{\Psi_{i_1 i_2 \dots i_N}}{\sqrt{N!}} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle$$

基底

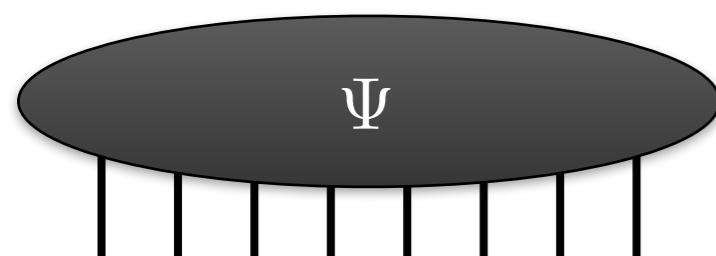
量子スピン・bit : $i = \uparrow, \downarrow = |0\rangle, |1\rangle$
 $|010100 \dots 0\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle \otimes \dots$

量子化学 :

i = 原子軌道・分子軌道の占有数

係数はテンソル

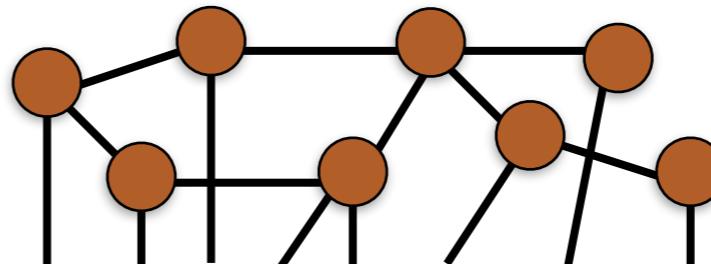
量子多体状態



$\sim e^N$ の独立要素

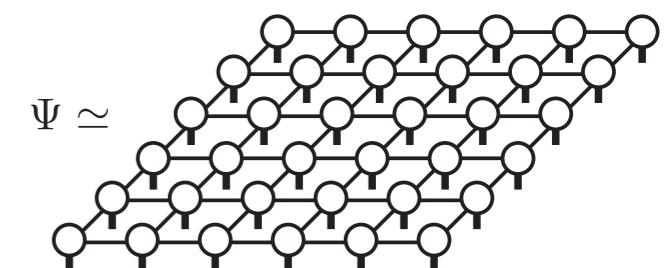
量子相関の
特徴を利用した近似

テンソルネットワーク分解



$\sim O(N)$ の独立要素

PEPS, TPS (for 2d system)



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

良いネットワークを選ぶことで、量子多体状態を効率的に表現できる

ex. TPS: 独立な要素数 $\sim ND^4$

D: テンソルTの各足の大きさ

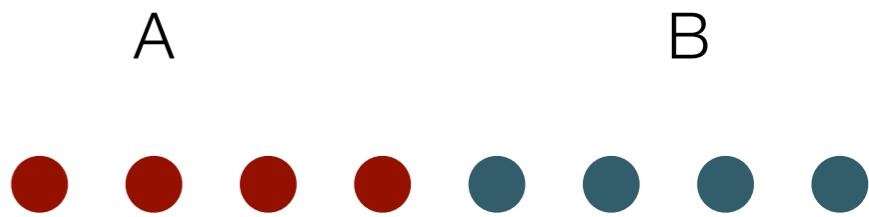
指数関数 → 線形

良いネットワークの選び方： エンタングルメントエントロピーの面積則

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:

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



EE = ρ_A の von Neumann エントロピー

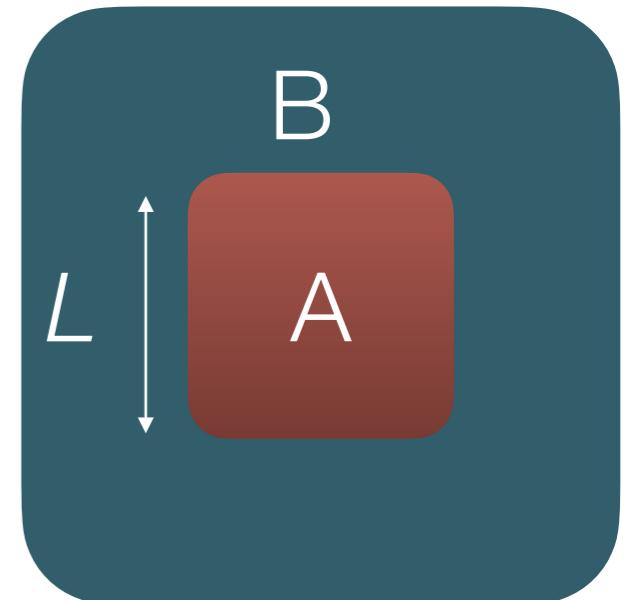
$$S = -\text{Tr}(\rho_A \log \rho_A)$$

一般の状態ベクトル :

EE は 部分系の体積 (スピニ数) に比例

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

(c.f. ランダムベクトル)



基底状態ベクトル :

多くの低エネルギー状態では, EE は面積に比例

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

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

基底状態はヒルベルト空間の狭い部分空間で表現可能

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)

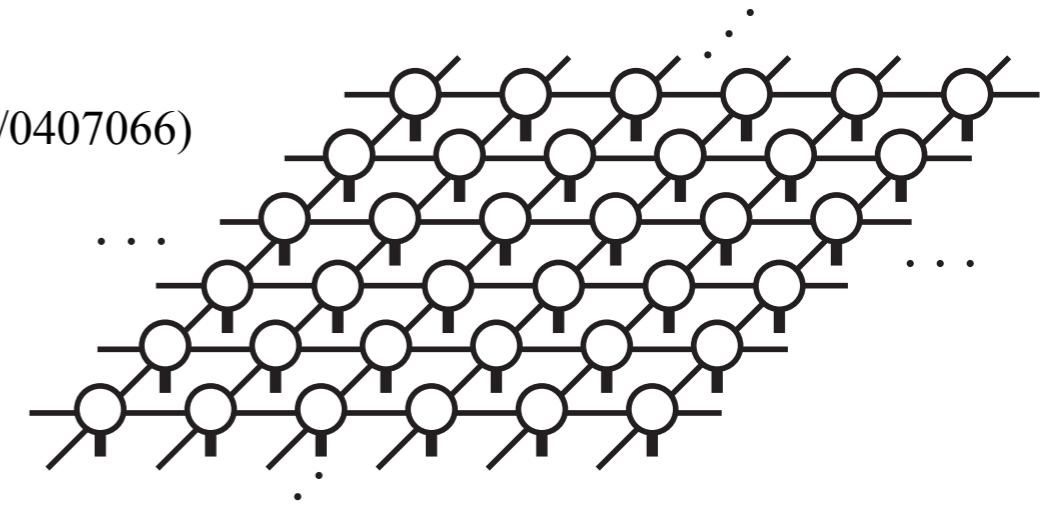
例：2次元正方格子のTPS

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

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

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を変分波動関数とする変分法

- 面積則を満たすため、有限 D でも精度の良い近似
 - 無限系も直接、有限の D で計算できる : iTPS
 - テンソルネットワークのみを仮定した、バイアスの少ない変分波動関数
 - ボンド次元の増大により、系統的に精度を改善できる

テンソルネットワークの他の例1：量子回路

量子回路：

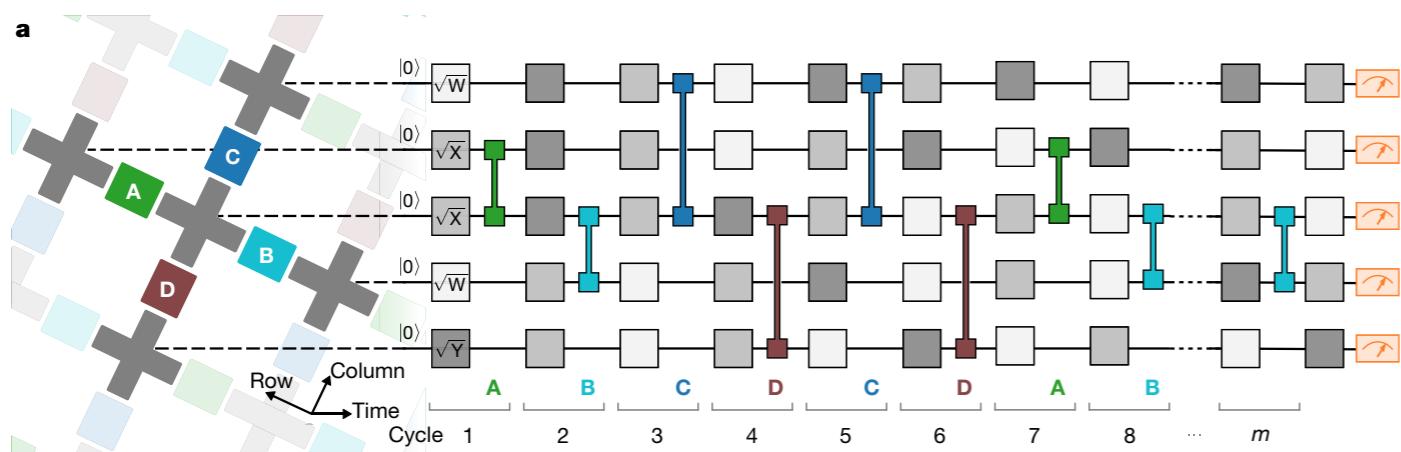
量子ビットに演算するゲート操作の回路図

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)

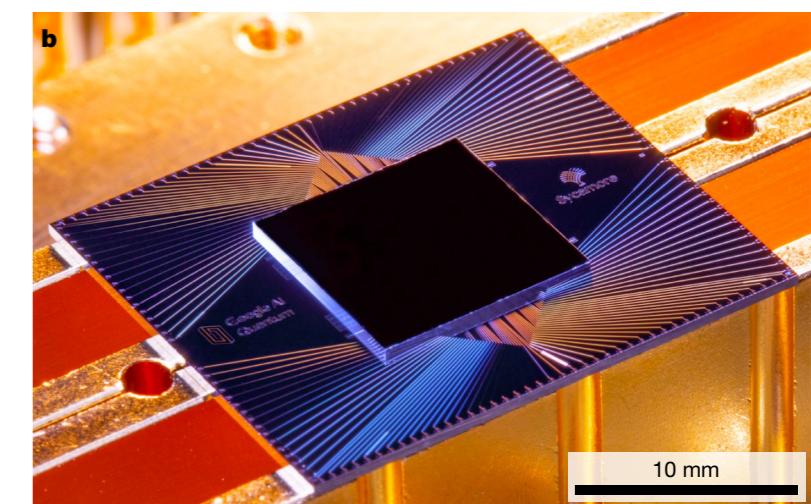
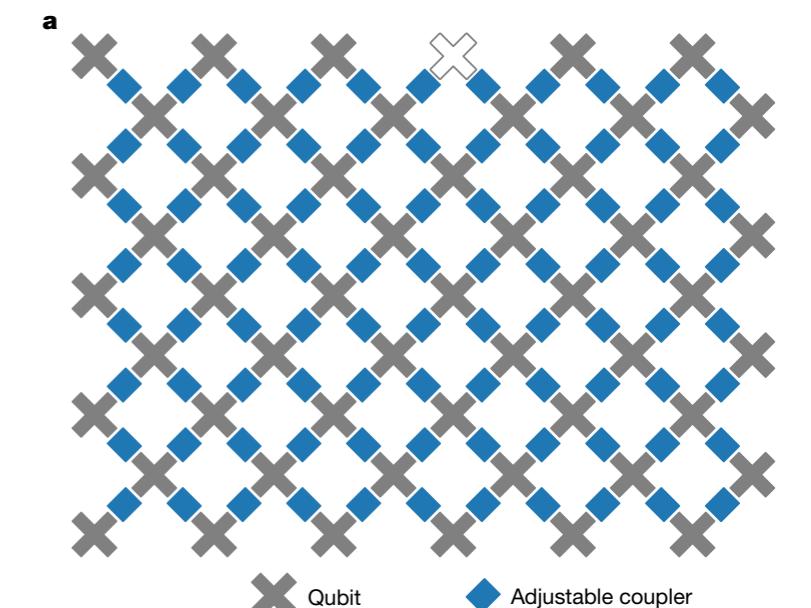


量子回路=テンソルネットワーク

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

googleの"量子超越" 回路

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



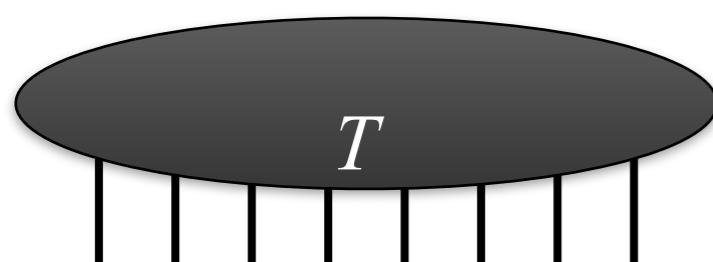
cf. 永井さん

テンソルネットワークの他の例2：テンソル型データ

任意のテンソル型データ

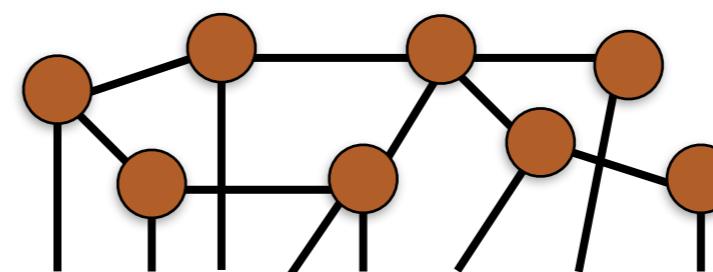
T_{i_1, i_2, \dots, i_N} : 量子多体状態と同様にして分解可能

テンソル型データ



情報の相関構造の
特徴を利用した近似

テンソルネットワーク分解



cf. 原田さん

例1：画像データセット

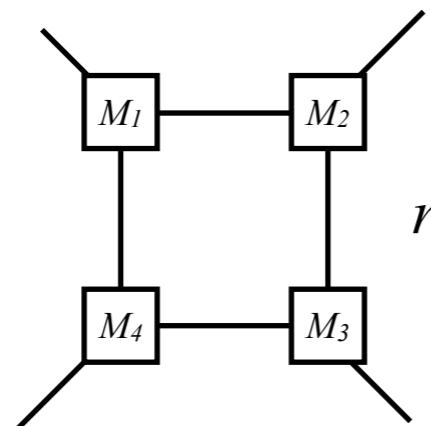
(Q. Zhao, et al arXiv:1606.05535)

COIL-100 dataset = $32 \times 32 \times 3 \times 7200$ テンソル

ピクセル 色 画像数



テンソルリング分解



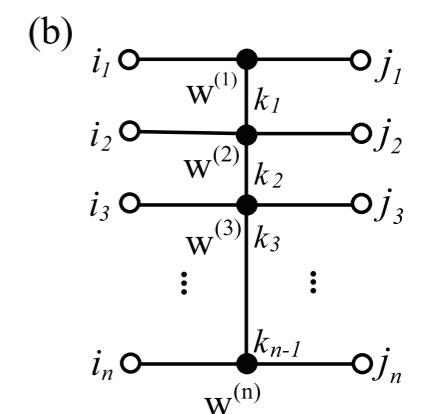
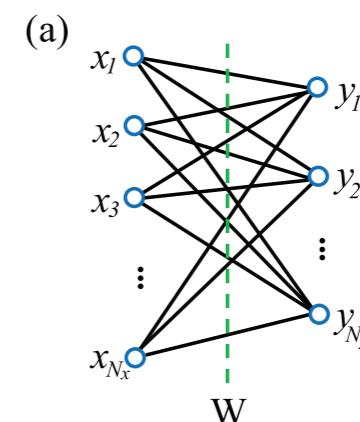
例2：ニューラルネットワークの重み行列

(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



テンソルネットワークの量子多体問題への応用

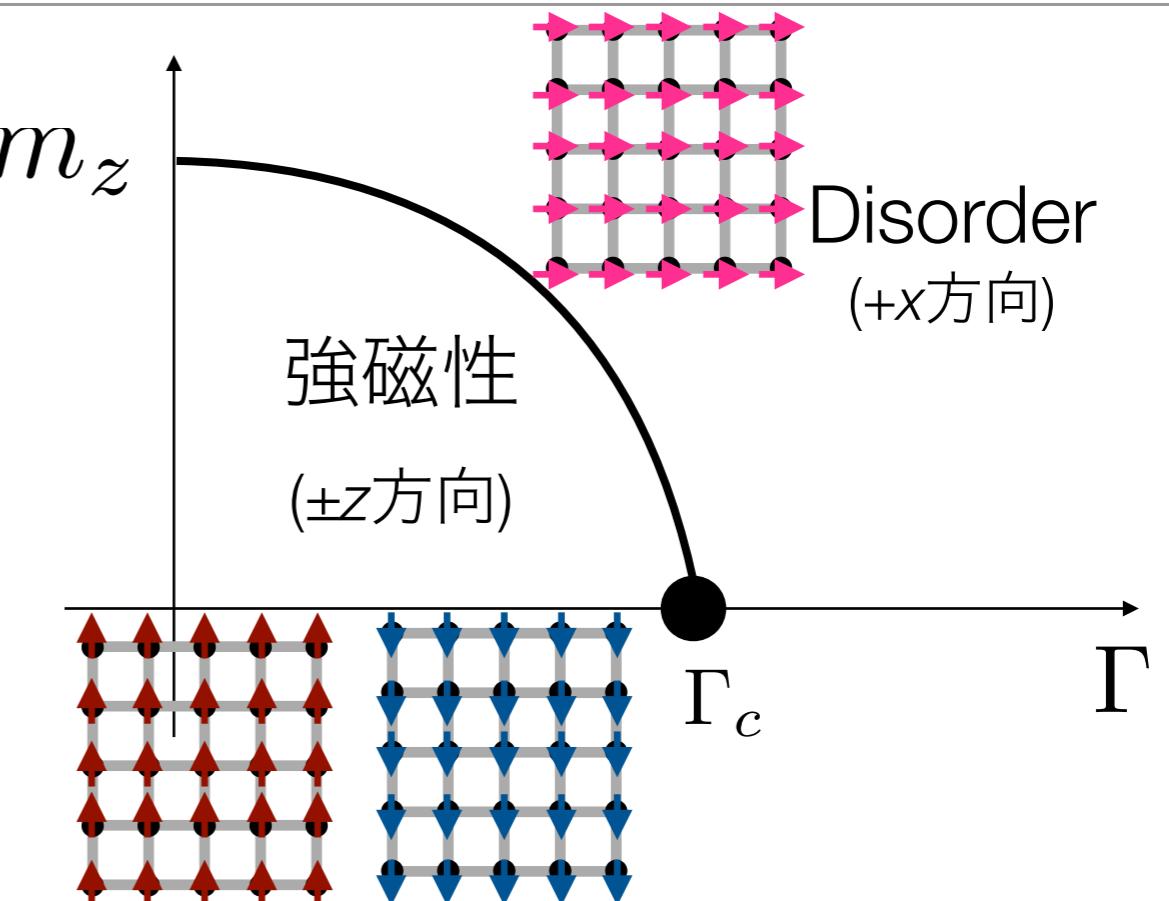
(量子) スピン模型と典型的な(基底状態)相図

例：横磁場イジングモデル

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

$S = \frac{1}{2}$ 量子スピンの行列表示

$$S_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, S_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, S_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$



通常、量子スピン系の基底状態は(磁気的な)長距離秩序を持つ：

- ・自発的対称性の破れ
- ・外部磁場の効果

量子スピン液体

(量子) スピン系の相互作用にフラストレーションがあると:

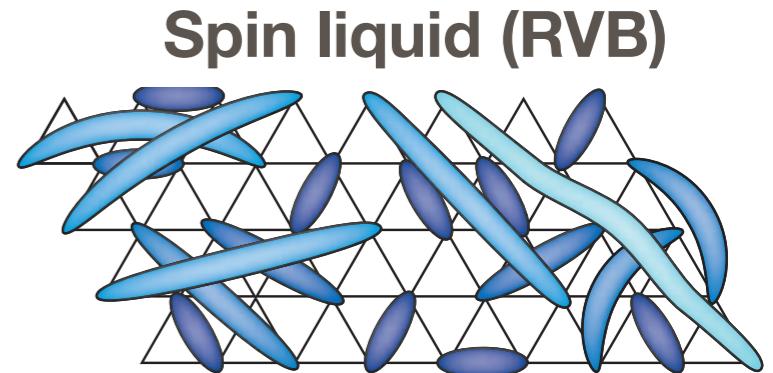
→ 場合によっては、基底状態が長距離秩序を持たない

量子スピン液体

平均場描像に基づく、スピン液体状態が数多く存在

- Gapped spin liquid
- Z_2 spin liquid
- Chiral spin liquid
- ...
- Gapless spin liquid
- $U(1)$ spin liquids
- ...

(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

ハニカム格子キタエフ模型

A. Kitaev, Annals of Physics 321, 2 (2006)

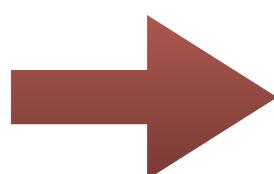
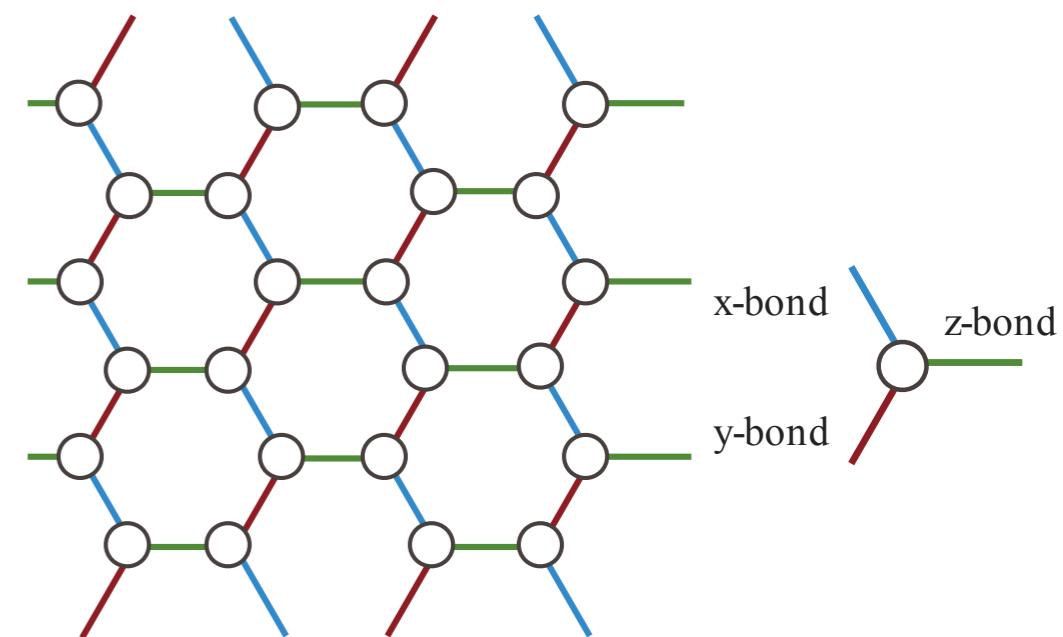
キタエフ模型

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

γ : 相互作用の方向

相互作用の方向に応じて、異なるスピン成分がイジング型に相互作用

ハニカム格子



この模型は「マヨラナフェルミ粒子」
を用いて、自由粒子の問題に変換可能

Spin



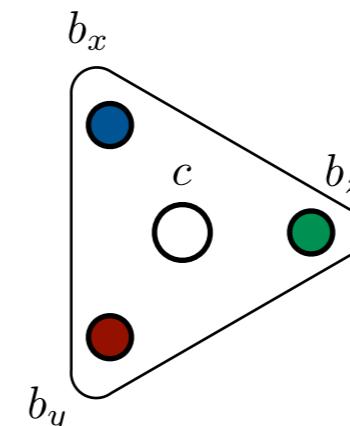
$$\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$$

$$2S^\gamma = \sigma^\gamma = ib^\gamma c$$

Majorana fermions:

$$(b^\gamma)^\dagger = b^\gamma$$
$$c^\dagger = c$$

Four Majorana fermions



キタエフ模型の基底状態

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

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

γ : ボンドの方向

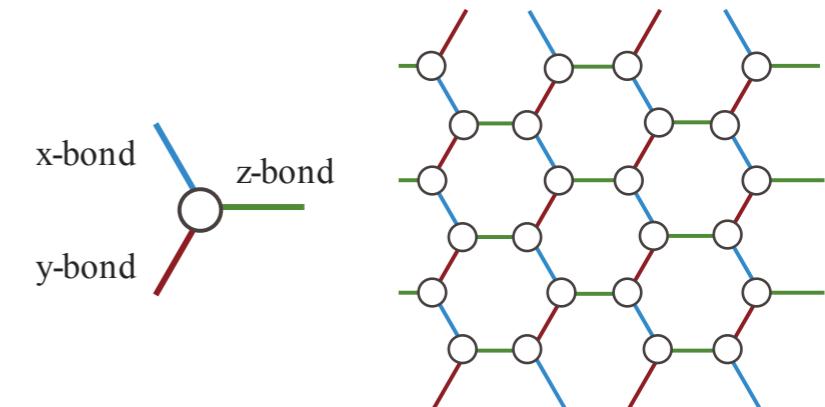
2つのスピン液体

非等方領域 (A) : gapped spin liquid

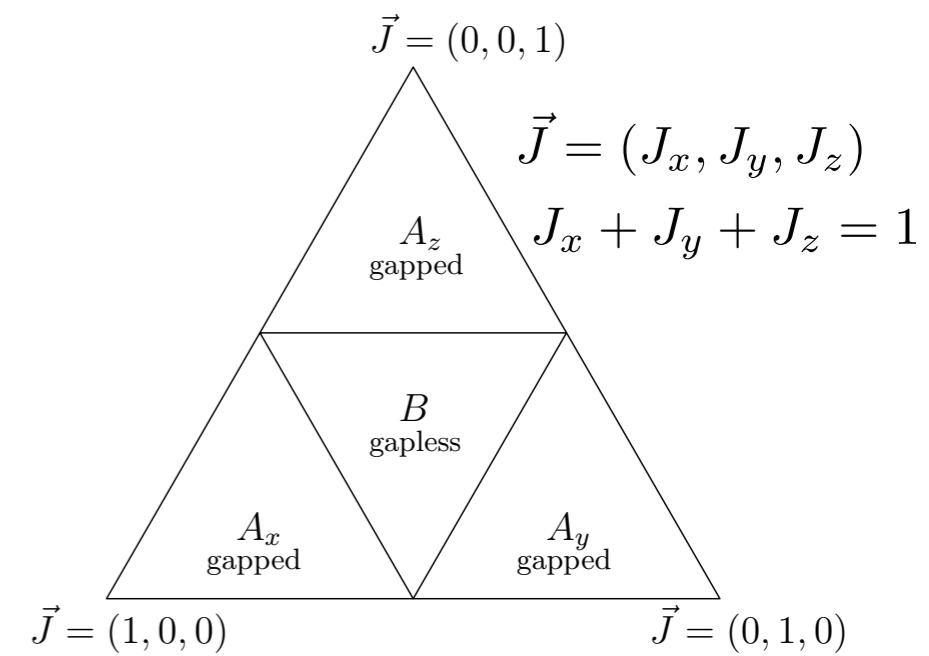
- 基底状態と励起状態に有限のエネルギーギャップ
- 量子誤り訂正に使われるtoric code状態と"同じ"状態
- Toric codeには**コンパクトなTN表現が存在**

等方領域(B) : gapless spin liquid

- 励起エネルギーにエネルギーギャップがない
- 磁場の印加でトポロジカル相が実現
- コンパクトなTN表現が未知 (だった)**



基底状態相図



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

Na₂IrO₃の第一原理スピンハミルトニアン

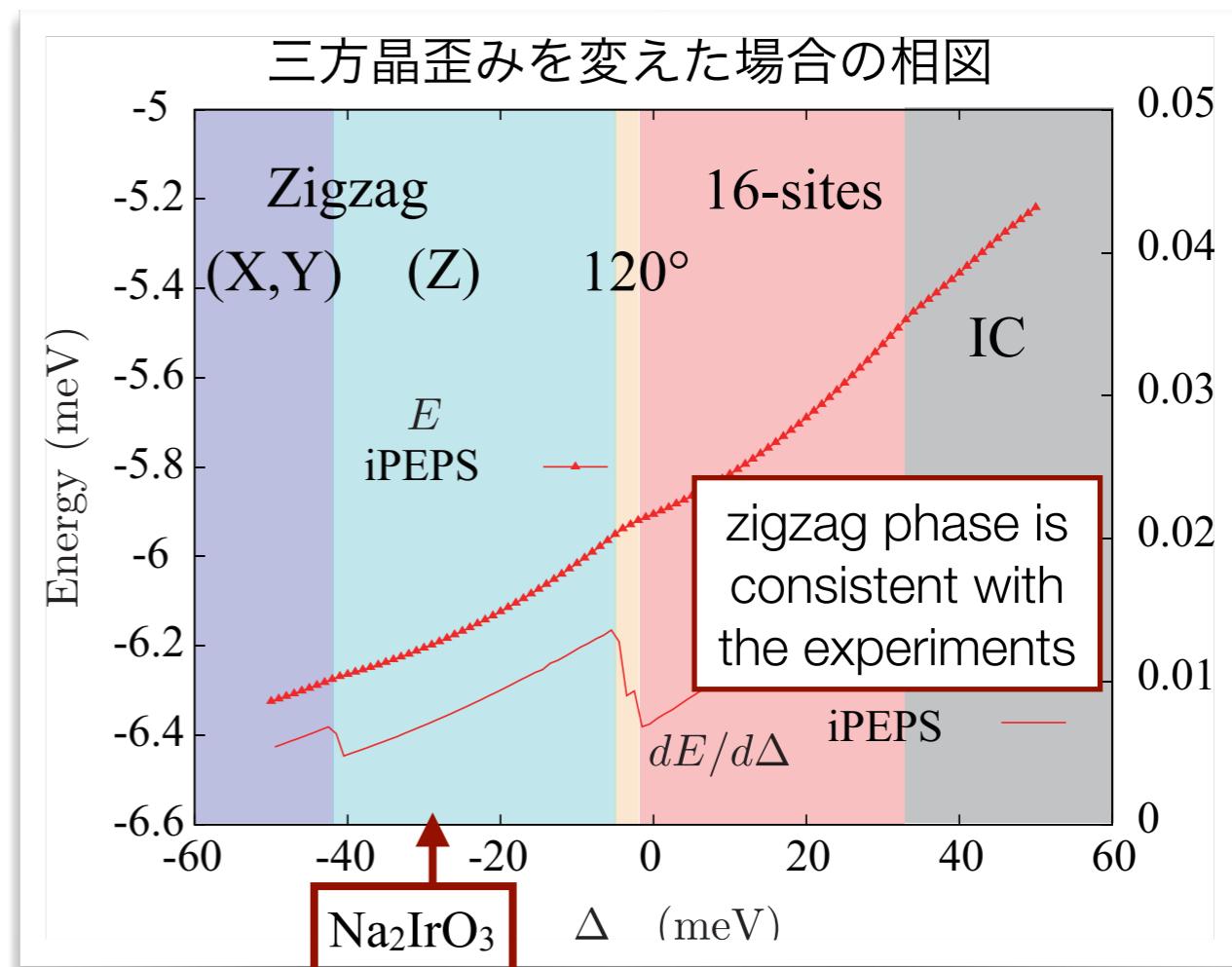
(Y. Yamaji et al. Phys. Rev. Lett. 113, 107201(2014))

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

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

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

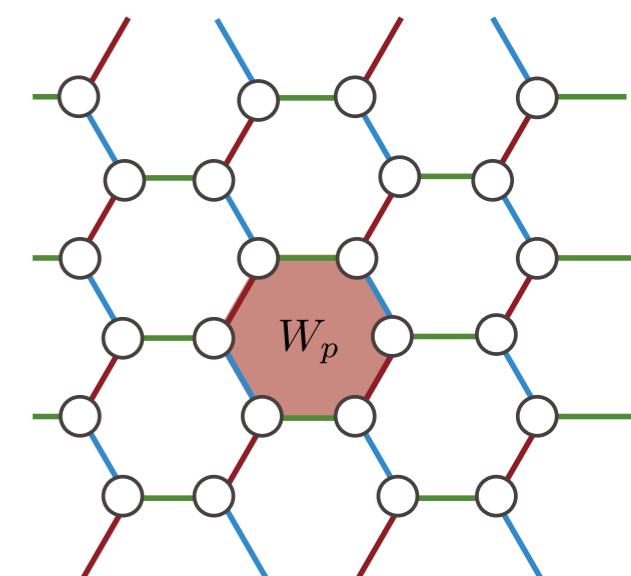
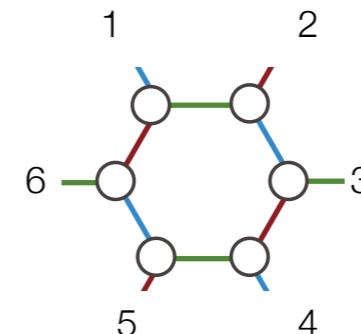


キタエフ模型の保存量とテンソルネットワーク

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

★ キタエフスピニ液体は、全ての六角形でフラックスが1



"Vortex free"

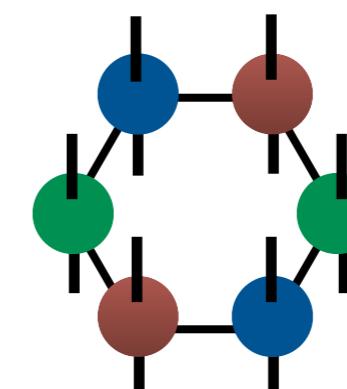
$W_i = 1$ への射影演算子? :

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

→ 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

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

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

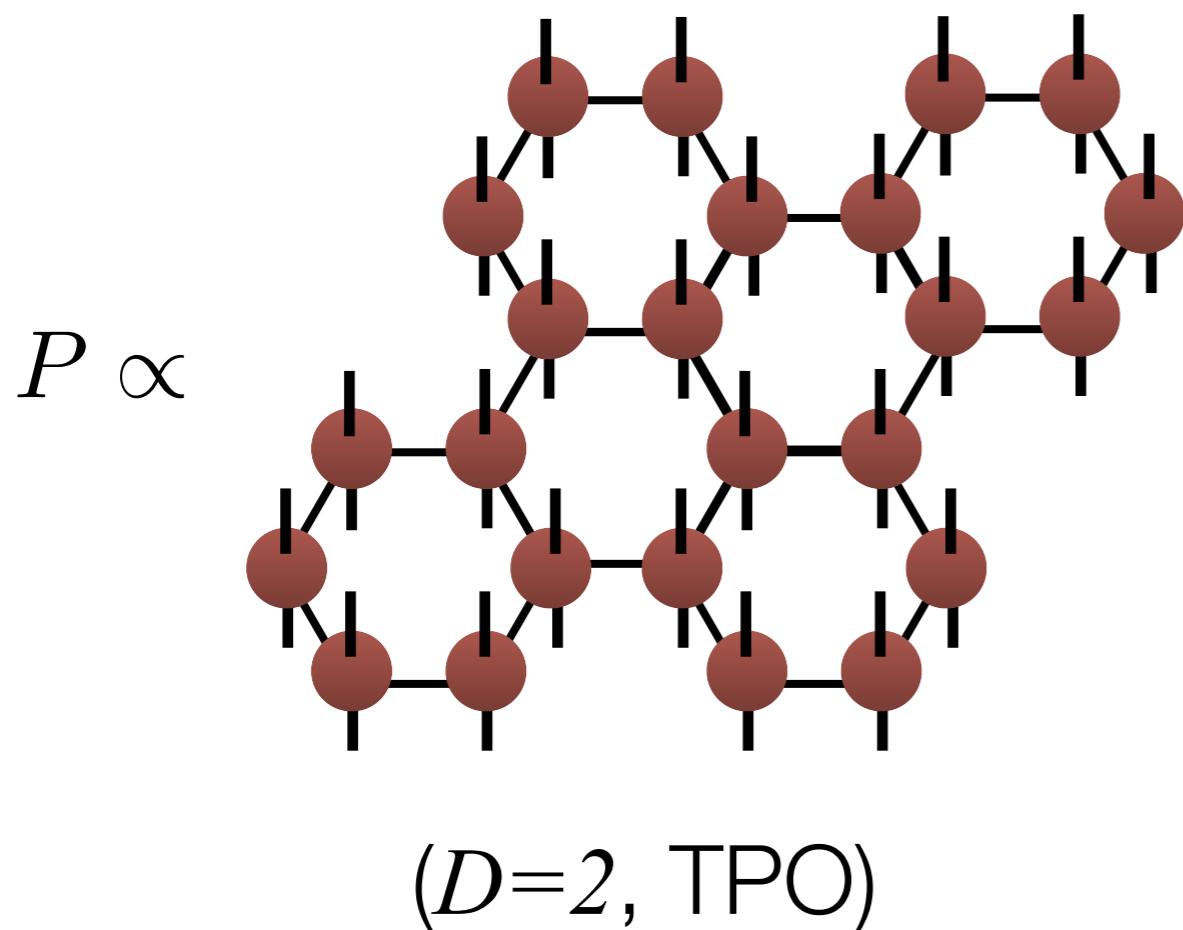


Vortex free への射影演算子

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



$$Q_{ijk}^{ss'} = \begin{array}{c} i \\ \diagup \\ s \\ \diagdown \\ j \\ \diagup \\ k \\ \diagdown \\ s' \end{array} \quad i, j, k = 0, 1$$

Non zero elements:

$$\begin{array}{c} 0 \\ \diagup \\ 0 \\ \diagdown \\ 0 \end{array} = I$$

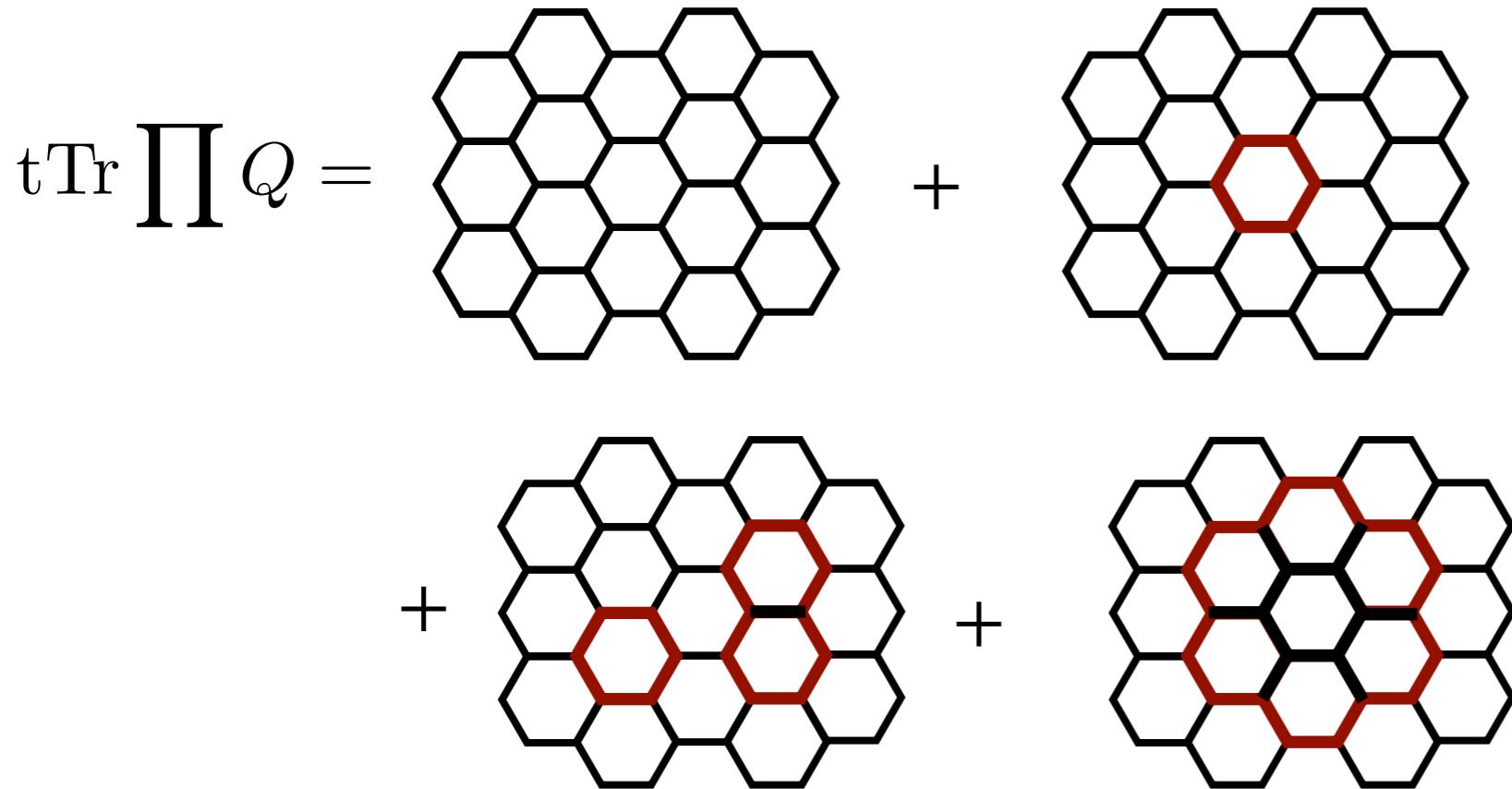
$$\begin{array}{c} 0 \\ \diagup \\ 1 \\ \diagdown \\ 1 \end{array} = \sigma^x$$

$$\begin{array}{c} 1 \\ \diagup \\ 1 \\ \diagdown \\ 0 \end{array} = \sigma^y$$

$$\begin{array}{c} 1 \\ \diagup \\ 0 \\ \diagdown \\ 1 \end{array} = \sigma^z$$

演算子のループ構造

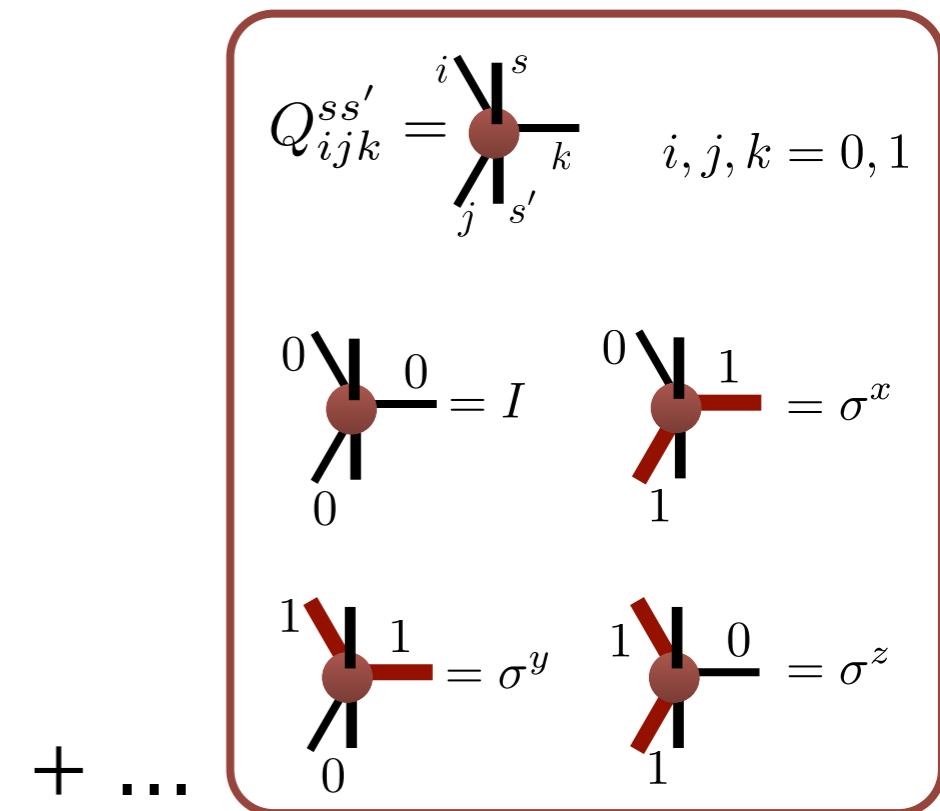
H.-Y. Lee, R. Kanako, T.O. and N. Kawashima, PRL **123**, 087203 (2019)



全ての閉じたループの和 !

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

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



注: = W_p

= $W_p W'_p$

...

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

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

(1,1,1) 方向に揃った強磁性状態

対称性 :

Q と $|111\rangle$ 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

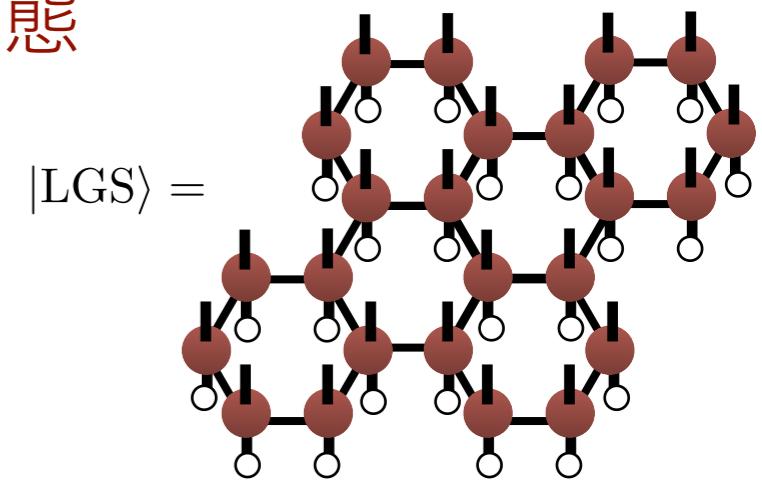
に関する対称

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



$$D=2, iTPS \quad |111\rangle = \text{---}$$

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



LGS はキタエフスピン液体定性的に同じ状態 !

局所励起による系統的な改善

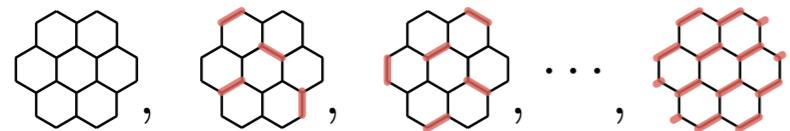
*n*次のstring gas state (SGS)

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

$$|\psi_n\rangle = \left[\prod_i^n \hat{R}_{DG}(\phi_i) \right] |\text{LGS}\rangle \quad \{\phi_i\} : \text{変分パラメタ}$$

- $|\psi_n\rangle$ は $D = 2^n$ iTPS.

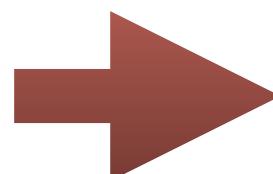
\hat{R}_{DG} は"局所" 励起を導入する



	$ \psi_0\rangle = \text{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
$\Delta E/E_{\text{ex}}$	0.17	0.02	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。



量子コンピュータによる量子多体問題への
アプローチ法へのヒント？

量子コンピュータへの展開

近未来の量子コンピュータ

数百ビットの量子コンピュータ

→ 古典計算機では達成できない精度で、量子多体問題が解ける可能性

近い将来に実現： 誤り訂正のない（ゲート型）量子コンピュータ

NISQ: Noisy Intermediate-Scale Quantum computer

- ・ 計算結果に（様々な）ノイズが含まれる
- ・ 演算回数（量子ゲートの適用回数）に制限

→ 量子多体問題への応用法の一つ：

VQE: Variational Quantum Eigen solver

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

- ・ 量子回路で試行関数を構成
 - ・ *NISQデバイスでも可能な"深さ"の量子回路
- ・ コスト関数（やその微分）を（項毎に）NISQデバイスで計算
 - ・ 多数の試行でノイズ付きの期待値を得る
- ・ 量子回路のパラメタを古典計算機での計算に従い最適化

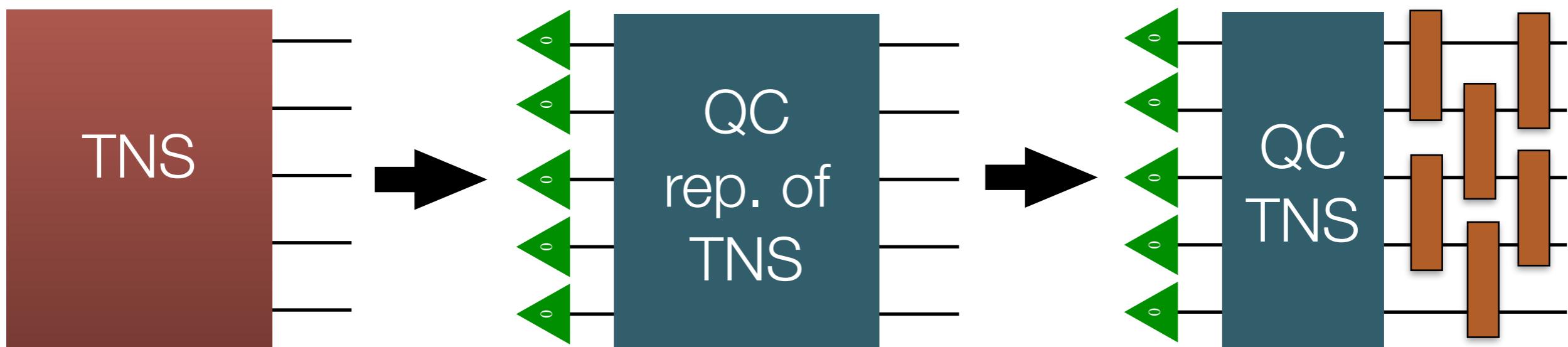
テンソルネットワークを活用したVQE

テンソルネットワークからの知見

- 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。

→ VQE用の量子回路構成の指針

- 長距離のエンタングルメントはテンソルネットワークから量子回路に輸入
 - テンソルネットワーク状態を量子回路に変換
- 短距離相間に相当する回路を追加し、NISQを用いたVQEで追加部を最適化
 - 短距離部分のみの最適化であれば、NISQでも最適化可能？



LGS の量子回路表現

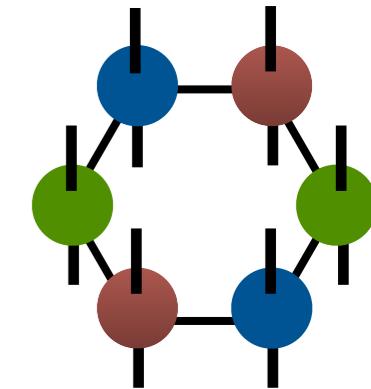
Flux1つの射影演算子：

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

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

spin と virtual leg
に作用する行列

：このテンソルは"行列"
としてみると ユニタリ行列



しかも、コントロール
パウリゲートそのもの

→ 量子ゲートで構成可能！

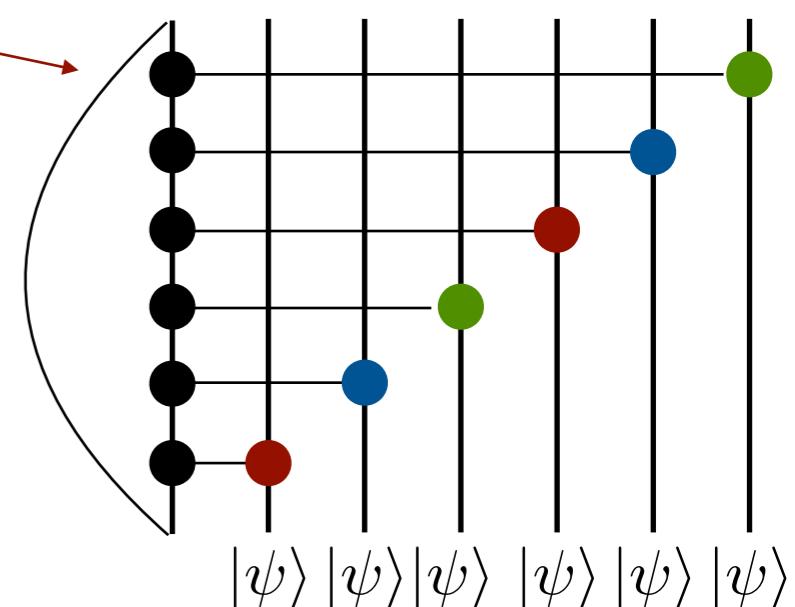
ただし、そのままでは量子回路にはならない...

"ループ" は通常の量子回路では（おそらく）表現できない

→ "測定"により、このループを実現することはできる。

Cf. T. A. Bespalova, and O. Kyriienko, arXiv:2109.13883

- LGSのために必要な測定の回数は $O(N)$ になるが、NISQの規模だと許容可能？
- 測定の方法を使った場合でも、LGSを用いた方が、上記論文よりはよい性能が出せる (On going)。



まとめ

- ・ 量子多体状態の表現として、テンソルネットワークは非常に効率的
 - ・ 低エネルギー状態の面積則を事前知識として採用
 - ・ 非自明なスピン液体状態もコンパクトに表現可能
- ・ テンソルネットワークの知見を用いることで、NISQ量子コンピュータでの量子多体問題計算を実用的にできる可能性
 - ・ 長距離のエンタングルメントは（古典的な）テンソルネットワークが担う
 - ・ スpin液体のテンソルネットワーク状態は量子回路へ変換可能
 - ・ 短距離の励起を量子回路で表現しNISQで最適化する