重なり積分

step1 にて 損失関数として用いる。
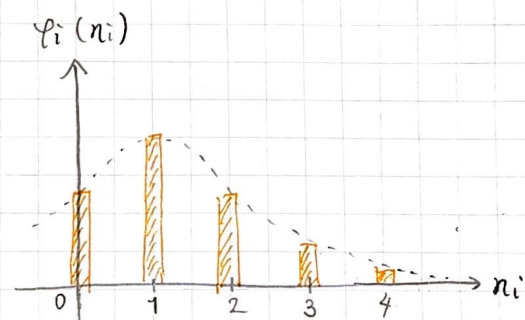
定義

$$K = \langle \Psi_{train} | \psi \rangle$$

ただし、$|\psi\rangle$ はネットワークの出力、$|\Psi_{train}\rangle$ は以下の関数

$$\begin{cases} |\Psi_{train}\rangle = \prod_{i=1}^{M}\left(\sum_{n_i=1}^{N_f} \varphi_i(n_i) |n_i\rangle_i \right) \\ \varphi_i(n_i) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}\,c} \exp\left(-\dfrac{(n_i-b)^2}{2c^2} \right) \end{cases}$$

中心：$b = 1$
標準偏差：$c = 0.5$
のガウス分布

$\varphi_i(n_i)$ をこのような ガウス分布にとる

計算結果

$$K = \sum_{n} \varphi(n)\,\psi(n)$$

ただし、$\varphi(n) = \prod_i \varphi_i(n_i)$

モンテカルロ計算でこれを近似すると、

$$K \simeq C \left\langle \frac{\varphi(n)}{\psi^*(n)} \right\rangle_M$$

ただし、$C = \sum_{n} |\psi(n)|^2$

計算過程

$$|\psi\rangle = \sum_m \psi(m)|m\rangle$$

$$|\psi_{train}\rangle = \prod_i \left(\sum_{n_i} \varphi_i(n_i)|n_i\rangle_i \right)$$

$$= \sum_{n_1} \cdots \sum_{n_M} \left\{ \prod_i \left(\varphi_i(n_i)|n_i\rangle_i \right) \right\}$$ ♡

$$= \sum_m \varphi(m)|m\rangle$$

ただし、 $\varphi(m) = \prod_i \varphi_i(n_i)$

よって、

$$\langle \Phi_{train} | \psi \rangle$$

$$= \left\langle \left(\sum_{m'} \varphi(m') \langle m'| \right) \middle| \left(\sum_m \psi(m)|m\rangle \right) \right.$$

$$= \sum_{m'} \sum_m \varphi(m') \psi(m) \underbrace{\langle m'|m\rangle}_{\delta_{m,m'}}$$

$$= \sum_m \varphi(m) \psi(m)$$

モンテカルロ計算

$$\langle \Phi_{train} | \psi \rangle$$

$$= \sum_m \varphi(m) \psi(m)$$

$$= \sum_m |\psi(m)|^2 \frac{\varphi(m)}{\psi^*(m)}$$ ✿

$$= C \left\langle \frac{\varphi(m)}{\psi^*(m)} \right\rangle_M$$

ただし、 $C = \sum_m |\psi(m)|^2$

♡ 確認　$N_p = 2, M = 2$ のとき

$$|\Phi_{train}\rangle = \prod_i \left(\sum_{n_i} \varphi_i(n_i)|n_i\rangle_i \right)$$

$$= \left(\varphi_1(1)|1\rangle_1 + \varphi_1(2)|2\rangle_1 \right)$$

$$\otimes \left(\varphi_2(1)|1\rangle_2 + \varphi_2(2)|2\rangle_2 \right)$$

$$= \left(\varphi_1(1)\varphi_2(1) \right)\left(|1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 \right) + \left(\varphi_1(1)\varphi_2(2) \right)\left(|1\rangle_1 \otimes |2\rangle_2 \right)$$

$$+ \left(\varphi_1(2)\varphi_2(1) \right)\left(|2\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 \right) + \left(\varphi_1(2)\varphi_2(2) \right)\left(|2\rangle_1 \otimes |2\rangle_2 \right)$$

$$= \sum_{n_1=1}^2 \sum_{n_2=2}^2 \prod_{i=1}^2 \left(\varphi_i(n_i)|n_i\rangle_i \right)$$

✿

$$\sum_m |\psi(m)|^2 A(m) = C \langle A \rangle_M$$