重なり積分

step 1 にて損失関数として用いる。

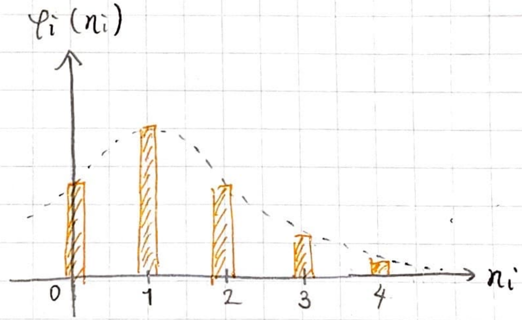
定義

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

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

$$\begin{cases} |\Phi_{train}\rangle = \prod_{i=1}^{M} \left(\sum_{n_i=1}^{N_r} \varphi_i(n_i) |n_i\rangle_i \right). \\ \varphi_i(n_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} c} \exp\left(-\frac{(n_i - b)^2}{2c^2} \right) \end{cases}$$

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

$$|\psi\rangle = \sum_{n} \psi(n)|n\rangle$$

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

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

$$= \sum_{n} \varphi(n)\,|n\rangle$$

♡

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

よって、

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

$$= \left\langle \left(\sum_{n'} \varphi(n') \langle n'| \right)' \middle| \left(\sum_{n} \psi(n)\,|n\rangle \right) \right\rangle$$

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

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

モンテカルロ計算

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

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

$$= \sum_{n} |\psi(n)|^2 \frac{\varphi(n)}{\psi^*(n)}$$

☆

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

ただし、$C = \sum_{n} |\psi(n)|^2$

♡ 確認 $N_p = 2,\ M = 2$ のとき

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

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

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

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

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

☆

$$\sum_{n} |\psi(n)|^2 A(n) = C\langle A\rangle_M$$

$$K = \frac{\langle \Phi_{train} | \psi \rangle^2}{\langle \Phi_{train} | \Phi_{train} \rangle \langle \psi | \psi \rangle}$$

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

より.

$$\langle \Phi_{train} | \Phi_{train} \rangle = \left\langle \left(\sum_{n'} \varphi(n') \langle n' | \right) \middle| \left(\sum_{n} \varphi(n) |n\rangle \right) \right\rangle$$

$$= \sum_{n'} \sum_{n} \varphi(n')\varphi(n) \langle n' | n \rangle$$

$$= \sum_{n} \varphi^2(n)$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{n} \psi^2(n)$$

よって、

$$K = \frac{\left(\sum_{n} \varphi(n)\psi(n) \right)^2}{\sum_{n} \varphi^2(n) \sum_{n} \psi^2(n)}$$

$$= \frac{\left(\sum_{n} \psi^2(n) \cdot \frac{\varphi(n)}{\psi(n)} \right)^2}{\left(\sum_{n} \psi^2(n) \cdot \frac{\varphi^2(n)}{\psi^2(n)} \right) \left(\sum_{n} \psi^2(n) \right)}$$

$$\simeq \frac{\left(c \left\langle \frac{\varphi(n)}{\psi(n)} \right\rangle_M \right)^2}{c \left\langle \frac{\varphi^2(n)}{\psi^2(n)} \right\rangle_M \; c \langle 1 \rangle_1}$$

$$= \frac{\langle A \rangle_M^2}{\langle A^2 \rangle_M}$$

ただし、 $A = \dfrac{\varphi(n)}{\psi(n)}$