

令和 6 年 6 月 20 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20K03766

研究課題名（和文）多体問題におけるエンタングルメント構造の最適化とその応用

研究課題名（英文）Optimization of entanglement structure in many-body problems and its applications

研究代表者

原田 健自（Harada, Kenji）

京都大学・情報学研究科・助教

研究者番号：80303882

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：テンソルネットワーク法は多体問題における要素同士の相関関係をテンソル縮約を表すネットワーク構造にコンパクトに埋め込み計算する手法である。しかし、ネットワーク構造自身は仮説として与えられて動的には最適化されていなかった。そこで、基底状態計算や量子生成モデルなどの多体問題に対して、テンソルネットワークのネットワーク構造を自動的に最適化する手法を提案し、その有用性を確かめた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

量子多体系に関連した基底状態計算や量子生成モデルは、量子科学の先端的話題として研究が進められている。我々の提案したテンソルネットワークのネットワーク構造の自動最適化は従来法と異なり柔軟に問題に応じた構造を見つけることができ、基礎・応用どちらにも展開可能な新しい方法論を提供する。

研究成果の概要（英文）：The tensor network method efficiently represents correlations between elements in a many-body problem using a network structure that represents a tensor contraction. However, the network structure is typically chosen as a hypothesis and is not dynamically optimized. We have developed a method to automatically optimize the network structure of tensor networks for many-body problems such as ground-state calculations and quantum generative models. We have confirmed the usefulness of this method.

研究分野：計算物理学

キーワード：テンソルネットワーク ネットワーク構造最適化 基底状態計算 量子生成モデル エンタングルメント構造

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

## 様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

量子情報や統計物理の可解モデルの研究から、縮約演算で結合したテンソル集合をもちいて、複雑で巨視的な高次多体相関を表すテンソルネットワーク表現が提案され、その利用が進んでいる。テンソルネットワークのネットワーク構造はエンタングルメント構造に対応するが、エンタングルメント構造はテンソルネットワーク全体の表現能力に大きな影響を与えることが示されている。しかし、従来のテンソルネットワークを用いた手法では、テンソルネットワークのエンタングルメント(ネットワーク)構造の直接的最適化はほとんど試みられてこなかった。

### 2. 研究の目的

従来の手法にはなかったネットワーク構造の直接的最適化を取り入れた手法の開発とその検証を行い、提案手法による2次元の量子系や時間発展系の未解決問題の解明を目指す。

### 3. 研究の方法

テンソルネットワーク中のエンタングルメント構造の定量化を行い、それをを用いた多様体制約下のエンタングルメント構造の直接的最適化法の構築を行う。特に繰り込み群法をベースにエンタングルメント構造最適化を行う手法を開発し、2次元量子系や2次元時間発展系への提案手法の応用を行う。

### 4. 研究成果

量子系の基底状態計算によく用いられる密度行列繰り込み群法は、1次元テンソルネットワークである行列積状態で表された量子状態クラスを用いた変分法という見方ができる。行列積状態は局所テンソルの1次元な構造に従ったテンソル縮約として波動関数が表現できる量子状態のクラスで、行列積状態を用いた密度行列繰り込み群法では、基底状態のエンタングルメントに応じた変分試行基底を局所テンソルの最適化として自動的に選ぶことができる。この操作の1種として、2つの局所テンソルをまとめて最適化し、再度、2つの局所テンソルに分解する手法が従来知られていたが、我々はこの分解時に、元の分割構造以外に考えられる新しい2つの分解構造を取り入れることで、ネットワーク構造を1次元な偏ったツリー構造から一般のツリー構造に自動的に拡張する手法を提案した。具体的には、図1のように局所的な2テンソルを合成したテンソルを密度行列繰り込み群法で最適化し、再分解する際に3つの分解構造の候補から、エンタングルメント最小の構造を選択するということを繰り返して、基底状態に近づけていく手法である。

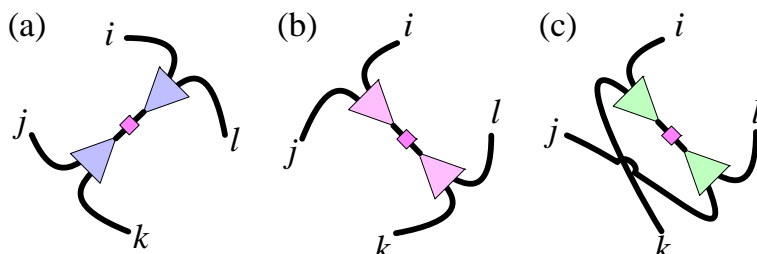


図1: 2つの局所テンソルから作られる3つの局所ネットワーク構造。

我々の提案手法を、相互作用の強さが階層的な構造を持つ1次元ハイゼンベルグモデルに適用し、基底状態を計算した結果、階層的なエンタングルメント構造に対応する階層的な構造を自動的に得ることができた(図2参照)。初期ネットワーク(a)から図1で示される局所2テンソルの最適化と局所ネットワーク構造の組み替えを1スweep続けると、少し局所的な階層構造ができていくネットワーク構造(b)が得られる。さらにスweepを続けることで、最終的にはモデルの基底状態を持つ階層構造(c)が再現された。このように、我々の手法は単に変分エネルギーを下げるだけでなく、エンタングルメント構造を正しく反映した構造を自動的に得ることができるとも示すことができた。

我々の提案手法はネットワーク構造を自動的に最適化する初めての手法で基底状態計算におけるテンソルネットワーク法の有用性を高めることで注目を集めている。関連する手法は量子化学計算でも提案されているが、完全に自動的にネットワーク構造を最適化することが難しかった。一方で、局所的なネットワーク構造の組み替えを、エンタングルメント最小を指針にして行うことで、近似精度の高い変分波動関数が得られる点はシンプルで応用範囲の広い。

ランダムネスを含むモデル系への適用では、自動最適化の有用性をさらに得ることができると考えられる。例えば、ランダムな相互作用のある系に提案手法を適用することで、従来法よりも

精度の高い基底状態を得ることを検証していくことは今後の展望の一つである。

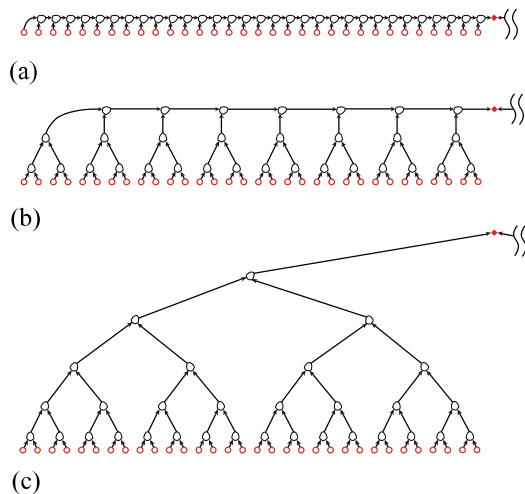


図 2: ネットワーク構造の最適化過程。(a)初期ネットワーク構造。(b) 最初のスイープ後のネットワーク構造。(c) 2 スイープ後のネットワーク構造。系の中心反転対称性から左半分のネットワーク構造のみをプロットしている。

その他の主たる研究成果としては、量子臨界現象などの解析によく用いられる有限サイズスケールリング法の欠点を克服する新手法が挙げられる。臨界現象では種々の物理量が臨界点付近でスケールリング則に従うことが知られている。スケールリング則にフィットするようにスケールリング指数を選ぶことで、ユニバーサルな臨界指数などの情報が実験結果から得ることができる。しかし、スケールリング関数自身のフォームは一般には知られていない。我々はスケールリング関数形をニューラルネットワークで近似させることでスケールリング指数と同時にスケールリング関数の学習も行う新手法を提案した。この手法を用いることで、任意のスケールリング関数に対応することができ、高速で柔軟なスケールリング解析が行えるようになった。もっとも高度な解析手法であったベイズ推定を用いたスケールリング解析手法と比べて、計算時間の大幅な短縮が行えるため（図 3 参照）、大量のデータを持つような実験のスケールリング解析に威力を発揮することが期待される。

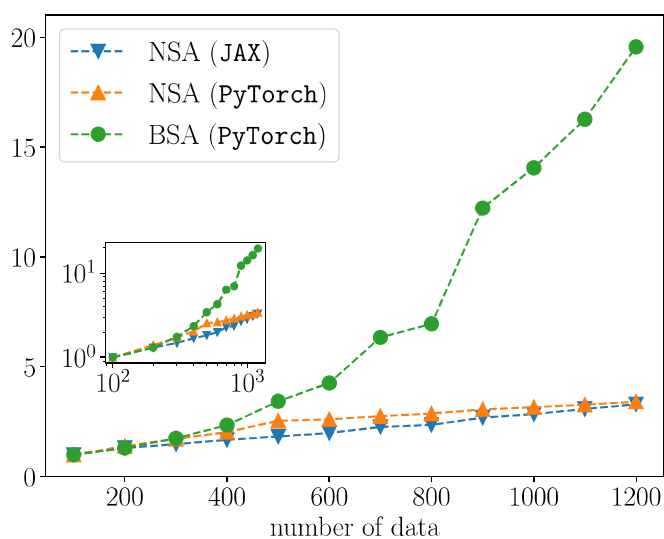


図 3: 相対的な 1 エポックの実行時間。100 データ点の実行時間を 1 とした。二次元ボンドパーコレーションのデータを用いた。NSA は提案手法。BSA はベイズ推定を用いた手法。PyTorch、JAX は実装に使った線形計算ライブラリー。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Hikihara Toshiya, Ueda Hiroshi, Okunishi Kouichi, Harada Kenji, Nishino Tomotoshi	4. 巻 5
2. 論文標題 Automatic structural optimization of tree tensor networks	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 13031
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.5.013031	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Yoneda Ryosuke, Harada Kenji	4. 巻 107
2. 論文標題 Neural network approach to scaling analysis of critical phenomena	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 44128
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevE.107.044128	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計13件（うち招待講演 1件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 原田健自, 大久保毅, 川島直輝
2. 発表標題 テンソルネットワークを用いた生成モデルの情報量に基づくネットワーク最適化
3. 学会等名 日本物理学会 2023年年次大会（東北大学）
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Kenji Harada
2. 発表標題 Optimizing tensor network structure
3. 学会等名 2024 Annual Meeting of the Physical Society of Taiwan, Topical Symposia: Many-body systems and advanced numerical methods（招待講演）
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 原田健自, 大久保毅, 川島直輝
2. 発表標題 テンソルネットワークを用いた生成モデルの最適化されたネットワーク構造の解析
3. 学会等名 日本物理学会 2024年春季大会 (オンライン)
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 引原俊哉, 上田宏, 奥西巧一, 原田健自, 西野友年
2. 発表標題 ネットワーク構造最適化を含んだツリーテンソルネットワーク法の開発
3. 学会等名 日本物理学会 2022年秋季大会 (東京工業大学)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 原田健自
2. 発表標題 テンソルネットワーク状態を用いた教師なし生成モデルのネットワーク構造の最適化
3. 学会等名 日本物理学会 2022年秋季大会 (東京工業大学)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 阿蘇品侑雅, 原田健自
2. 発表標題 行列積状態を用いたテンソル化深層学習における最適ランクの推定
3. 学会等名 日本物理学会 2022年秋季大会 (東京工業大学)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 引原俊哉, 上田宏, 奥西巧一, 原田健自, 西野友年
2. 発表標題 ネットワーク構造最適化を含んだツリーテンソルネットワーク法の開発II
3. 学会等名 日本物理学会 2023年春期大会 (オンライン)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 原田健自
2. 発表標題 テンソル化深層学習における圧縮性能の解析
3. 学会等名 日本物理学会 2023年春期大会 (オンライン)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 原田健自
2. 発表標題 吸収状態相転移の非平衡臨界点における普遍的スペクトラム構造のテンソル繰り込み群による研究
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 真鍋秀隆、原田健自
2. 発表標題 テンソルネットワークを用いた量子回路学習
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 原田健白、米田亮介
2. 発表標題 ニューラルネットワークを用いたスケーリング解析手法
3. 学会等名 日本物理学会 2022年年次大会（オンライン）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 原田健白
2. 発表標題 臨界有向浸透現象のスペクトラムを用いた新しい普遍性の提案
3. 学会等名 日本物理学会 2020年秋季大会（オンライン）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 原田健白
2. 発表標題 テンソルネットワーク状態の幾何学的変換
3. 学会等名 日本物理学会 2021年年次大会（オンライン）
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	阿蘇品 侑雅  (Asoshina Yuga)		

## 6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	真鍋 秀隆  (Manabe Hidetaka)		
研究協力者	米田 亮介  (Yoneda Ryosuke)		
研究協力者	川島 直輝  (Kawashima Naoki)		
研究協力者	大久保 毅  (Okubo Tsuyoshi)		
研究協力者	引原 俊哉  (Hikihara Toshiya)		
研究協力者	上田 宏  (Ueda Hiroshi)		
研究協力者	奥西 巧一  (Okunishi Kouichi)		
研究協力者	西野 友年  (Nishino Tomotoshi)		



7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------