

一般社団法人

国際数理科学協会会報

No.135/2025.1

編集委員：藤井淳一（委員長）

目次

* 寄稿

* 寄稿

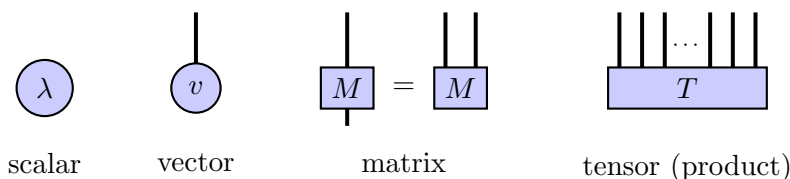
テンソルネットワークの図表現

大阪教育大学 藤井淳一

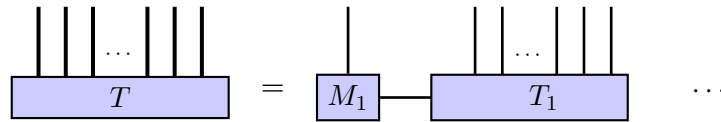
昨年 2024 年度のノーベル物理学賞は世界中を仰天させた AI 関連の研究でした。その一人である Hopfield は、その名前が冠されたニューラルネットワークで有名です。大学では情報科学関連に属していましたので、修論や卒論で、その階層のグラフ表現をよく目にしました。元は行列であったものを可視化してグラフ理論的にネットワークを表現するのは、（そもそも Shannon 線図と呼ばれるものからして）応用上有効であるものだと教えられました。

前号でも少し触れましたが、ブラックホールの Hawking-Bekenstein エントロピーと同等であることが示されたエンタングルメントエントロピーを巡って、TN(tensor network)と呼ばれる構造が、計算上の便利な道具として注目されています。それらの基本構造として MPS(matrix product state)(cf.[5]) や、ツリー型で、最も計算上適していると言われる MERA(multi-scale entanglement renormalization ansatz) があり舞う。その名前からわかるように、これも、グラフ的に可視化されるのが自然で、実際そうになっています。しかし、まだ黎明期であるせいか、多少危なっかしい解釈も多くあり、せつかくのアイデアがわかりにくくなってしまっていて、他分野との関連で納得できない部分が見受けられ (cf.[6])、素人なりに解釈できるようになるまで、少し時間を要しましたし、まとめてうまく書かれているものがあまりないようなので、ノートとして公開いたします。まだ誤りが含まれているかもしれませんので、その点をご容赦願います。

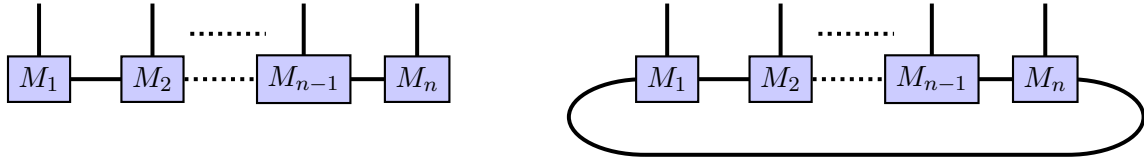
自分自身の理解の浅さも自戒しつつ、次の形に基本の MPS を解釈するまででさえかなりかかりました。決定的にしっくりくるものがありませんでしたので、適当にミックスせざるを得なかったのですが、参考にしたのは、[9, 10, 11, 13] たち（今回は結局触れませんが、検索対象の中にニューラルネット的な（冗談のような）Michael I.Jordan の graphical model もありました）です。基本的な部品の図示は



などとしておきます。テンソルを Schollwöck[12] の方法等¹⁾ で分解して行って



通常（開放型）は左の形で、巡回型なら右の形にまで変形します：



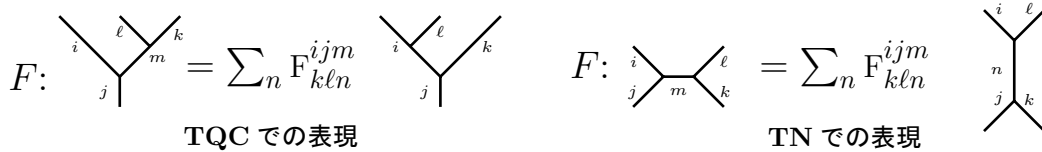
該当の多重テンソルの状態 $|\psi\rangle$ を Schmidt 分解して $|\psi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_n} c_{j_1, \dots, j_n} |j_1 \cdots j_n\rangle$ の係数の総体は n テンソル T を表していると思えるので、例えば周期的な後者であれば、

$$|\psi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_n} \text{tr}(M_{j_1} \cdots M_{j_n}) |j_1 \cdots j_n\rangle$$

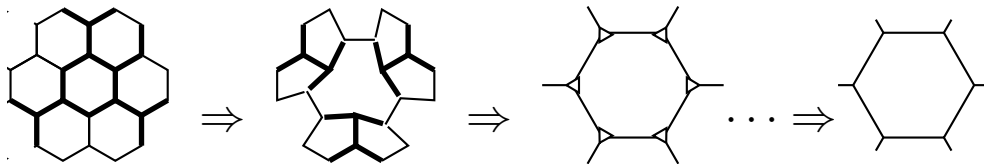
が MPS の式表現になります。このように次数の跳ね上がるテンソルを次数を抑えた「行列の積」に直して、計算させる手段で、もともとはコンピュータですぐにオーバーフローして計算しづらかったことで生まれたもののようです。

1. TN の基本変形 その 1 (3-valent)

テンソルネットワーク (TN) の変形が図上でもわかりにくかったのですが、従来の TQC²⁾ ともつながる論文 [8] を見つけて腑に落ちました。まず六角格子で説明しますが、3-valent なら F 変形で、空間の縮小ができます：



これを使うと次の変形が可能になります（一度にやると難しいので disjoint な太字部分で徐々に F 変形）：



¹⁾ あまり明確に書いていないので困りますが、大まかにはスカラー c_{j_1, \dots, j_n} を $c_{j_1, (j_2, \dots, j_n)}$ と分けて行列的に (j_2, \dots, j_n) 空間から j_1 空間への変換とみなして特異値分解を行って行列に直す方法です。これで残りのスカラーがなくなるまで繰り返すと MPS になります。もはやこれがスタンダードになっているので、分解の方法の吟味などはせず、分解された後の処理的なものにしか、物理学者は興味がないようです。特異値分解は核を含んだ分解になっています。

²⁾ 例えば、[4] の F 行列の図とは枝のフリップが逆方向になっていますが、 F は $F^2 = I$ となる symmetry と呼ばれる特殊なユニタリ行列なので同等です。なお、右側の図は共形場理論等でもよく使われているものです。

再度やると向きも戻って図上では $\sqrt{2}$ 倍の大きさになりますが、点線部分の処理は次のようにバブルに直して消去しています³⁾ (k の部分でくっついた形からの変形です) :

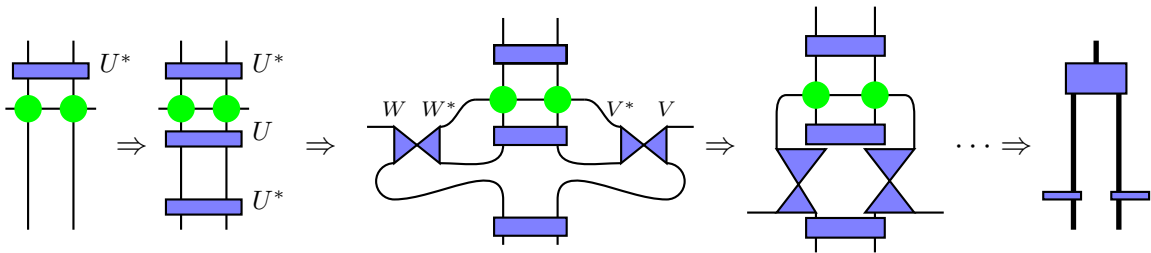
$$\begin{array}{c} i \\ \ell \\ j \end{array} \begin{array}{c} n \\ k \\ m \end{array} \xrightarrow{\text{太線 F 変形}} F_{jmk}^{nil} \begin{array}{c} i \\ k \\ j \end{array} \begin{array}{c} n \\ m \\ k \end{array} \xrightarrow{\text{バブル消去}} \sqrt{\frac{d_m d_n}{d_k}} \delta_{ijk} F_{jmk}^{nil} \begin{array}{c} i \\ k \\ j \end{array}$$

2. TN の基本変形 その 2 (4-valent)

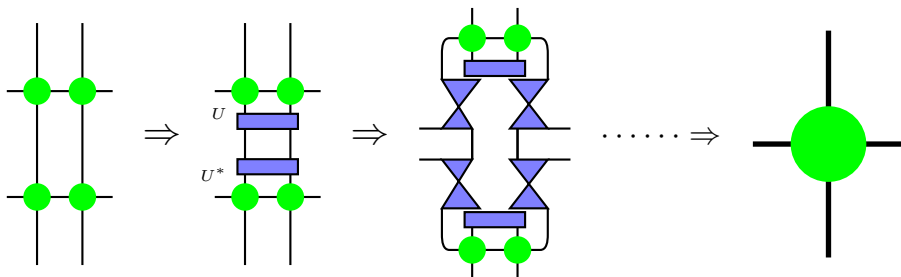
四角形の格子の場合は 4-valent なので、ユニタリ U (四角) やイソメトリ=等長作用素 W (三角) を挟む必要があります [2] :

$$\begin{array}{c} \leftarrow \\ \leftarrow \end{array} \begin{array}{c} | \\ | \\ | \\ | \end{array} \begin{array}{c} \leftarrow \\ \leftarrow \end{array} = \begin{array}{c} \leftarrow \\ \leftarrow \end{array} = \begin{array}{c} \leftarrow \\ \leftarrow \end{array} \begin{array}{c} \triangleleft \\ \triangleright \end{array} \begin{array}{c} \leftarrow \\ \leftarrow \end{array} \quad \text{あるいは} \quad \begin{array}{c} \leftarrow \\ \leftarrow \end{array} \begin{array}{c} \triangleleft \\ \triangleright \end{array} \begin{array}{c} \leftarrow \\ \leftarrow \end{array} = \begin{array}{c} \leftarrow \\ \leftarrow \end{array}$$

これに基づいて、結構大胆な変換をしていきます。まずは下が開放型の部分から:



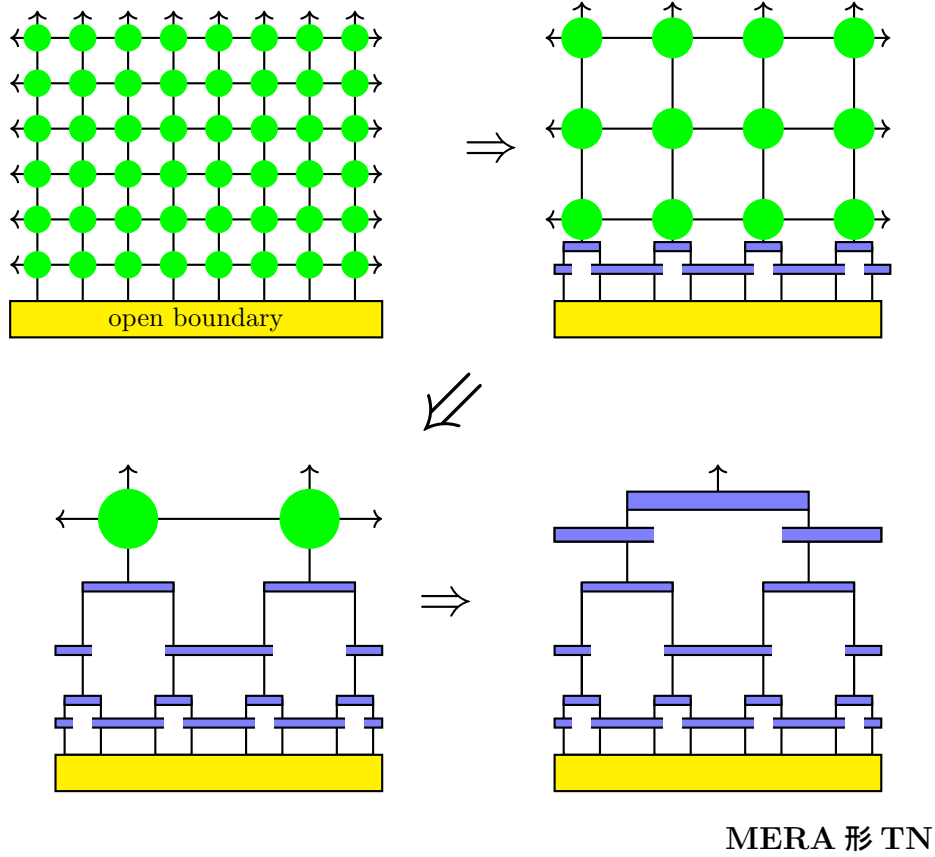
これは、一番下の部分が open boundary の場合にこうなるのですが、上が続いている場合は、上下にひっくり返した形をとって



このように変形すれば、無限四角形格子も含めて、格子型 TN から MERA 形へ、次のように変形できるようです:

³⁾ 元論文 [8] では最終項に δ_{ijk} がかかっていましたが不要と思われ、斜線で消しました。また、変形に余計な処理が入っているので略しました。

1 辺開放型 2 次元正方格子 TN



ここで、四角格子の端以外の場合に縮約できる部分 (**Tucker 積・分解**というらしい) を略しましたが、補足しておきます。実際は、1 回目で $\sqrt{2}$ 倍で 45 度傾いたものができ、それを 2 回繰り返すことになります。

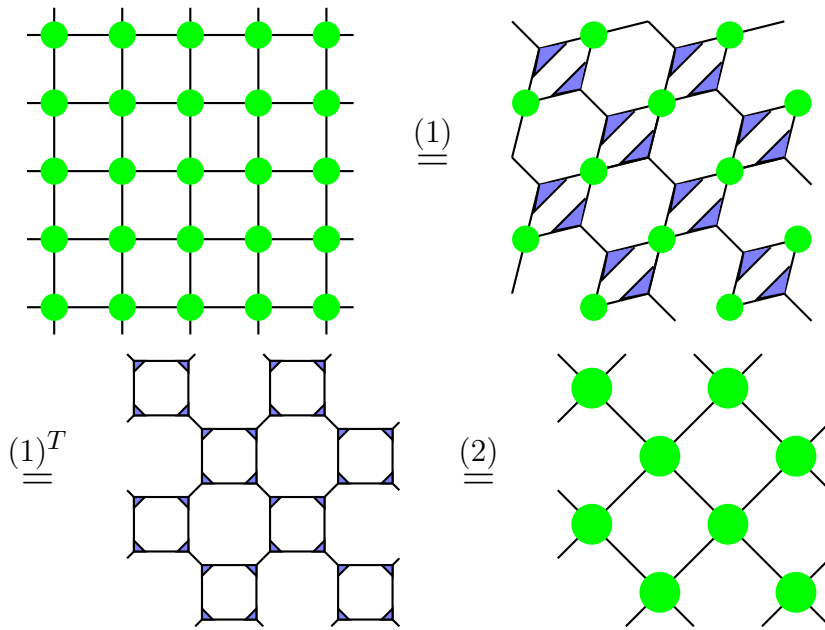
まず各部品の変形について述べておきます: [1] での特異値分解の図は -45 度の分解のみ描くと、

(1)

となって、逆にまとめる図は、

(2)

となります。これに基づいて、一つ飛ばしに (1) 変形してやると、次のように斜めに $\sqrt{2}$ 倍したような図が出来上がります。

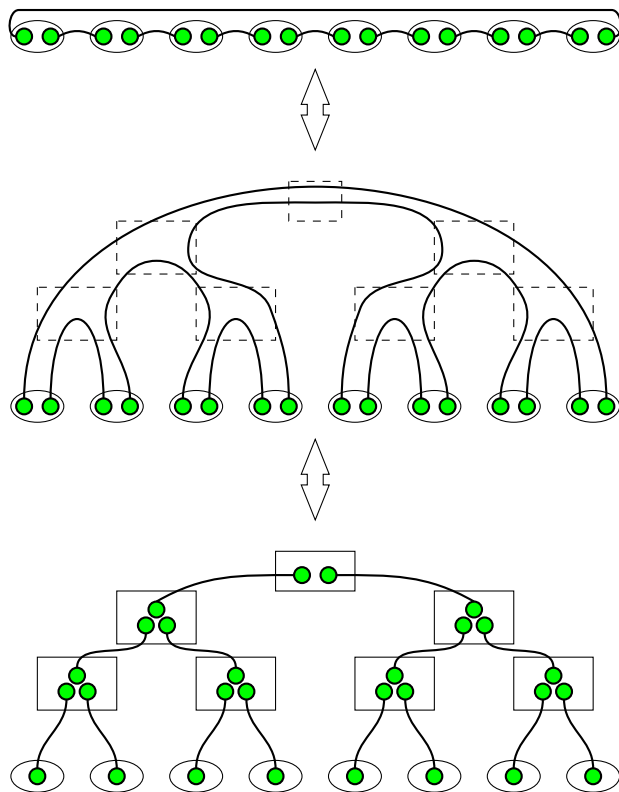


同じことを再度やれば、元から2倍のような図が出来上がります。

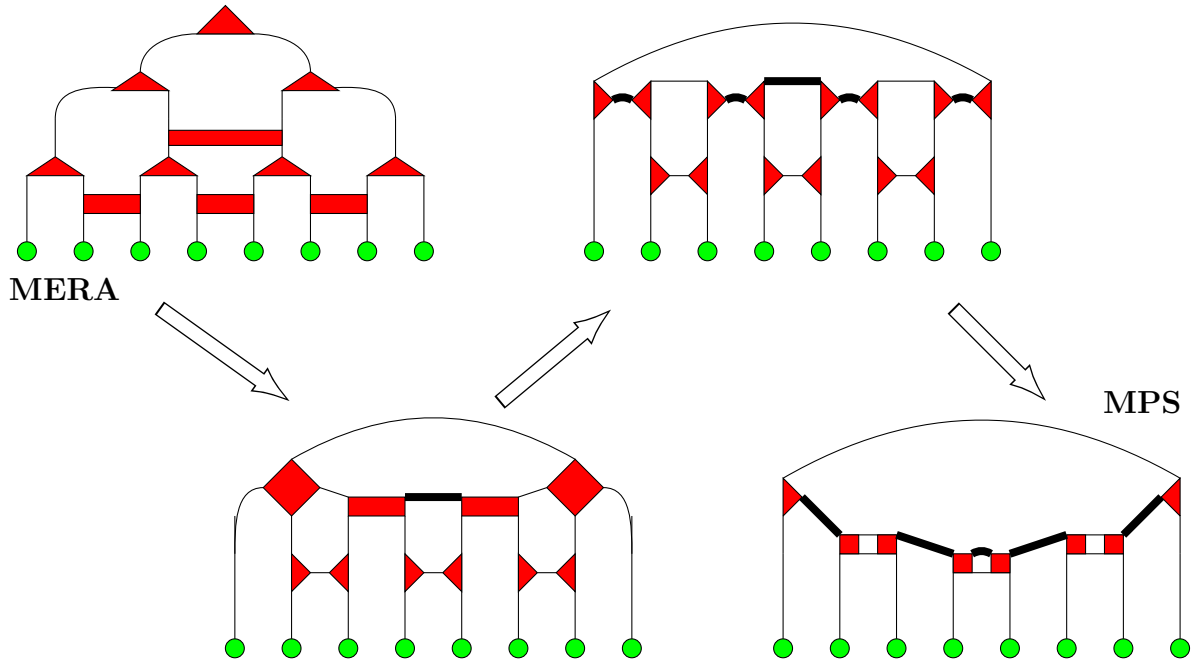
3. TN 相互間の変形

いままでの解釈で、[5] で挙げた相互変換の図はより分かりやすくなったと思われるので、ここに転載いたします:

境界周期型 MPS の図から tree net に変形 [13]:



繰り込み群 (renormalization group) を加味すれば更には **MERA** の TN 図示に至ります ([14])。ここでは逆に、▲は isometry, ■は unitary で表して、[7] にある「MERA から MPS への変形」を挙げておきます (太線部分が効率の悪化を示しています) :



参考文献

- [1] A.Desrosiers, G.B.Eventbly and T.E.Baker, The Basics of Tensor Network —An overview of tensors and renormalization, LN in Université de Sherbrooke, 2018.
- [2] G.Eventbly and G.Vidal, Tensor network renormalization, Phys. Rev. Lett., **115**(2015), 180405.
- [3] G.Eventbly and G.Vidal, Tensor network renormalization yields the multi-scale entanglement renormalization ansatz, Phys. Rev. Lett., **115**(2015), 200401.
- [4] 藤井淳一, Fibonatti anyon における TQC 再説, 数学教育研究, **49**(2020), 139–154.
- [5] 藤井淳一, Entanglement の周辺, 数学教育研究, **52**(2023), 121–139.
- [6] 藤井淳一, スピンネットを巡って, 数学教育研究, **53**(2024), 91–106.
- [7] 松枝宏明, テンソルネットワークと 量子情報・可解性・重力の関わり, 物性研究電子版, **6**(9)(2017), 064204.
- [8] R.König, B.W.Reichardt and G.Vidal, Exact entanglement renormalization for string-net models, Phys. Rev., **B79**(2009), 195123.
- [9] R.Orús, A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states, Annals of Physics, **349**(2014), 117–158.
- [10] J.K.Taylor, An introduction to graphical tensor notation for mechanistic interpretability, 2024, arXiv:2402.01790.
- [11] S-J.Ran et al., Tensor Network Contraction, Springer, 2020.
- [12] U.Schollwöck, The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states, Annals of Phys., **326**(2011), 96–192 .
- [13] G.Vercleyen, The Mathematical Structure of Tensor Networks, Masters Thesis at Ghent Unniv., 2017–2018.
- [14] F.Verstraete, J.I.Cirac and V.Murga, Matrix product states, projected entangled pair states, and variational renormalization group methods for quantum spin systems, Adv. Phys. **57**(2)(2008), 143–224.