

物性研短期研究会「量子情報・物性の新潮流
—量子技術が生み出す多様な物性と情報処理技術—」
(柏 Jul.31-Aug.3, 2018)



CBSM²

テンソルネットワーク法の 情報処理



東京大学
物性研究所

川島直輝(物性研)

2018年8月1日 柏

Occam's Razor

"Pluralitas non est ponenda sine necessitate."

必要無く多くを仮定してはいけない。

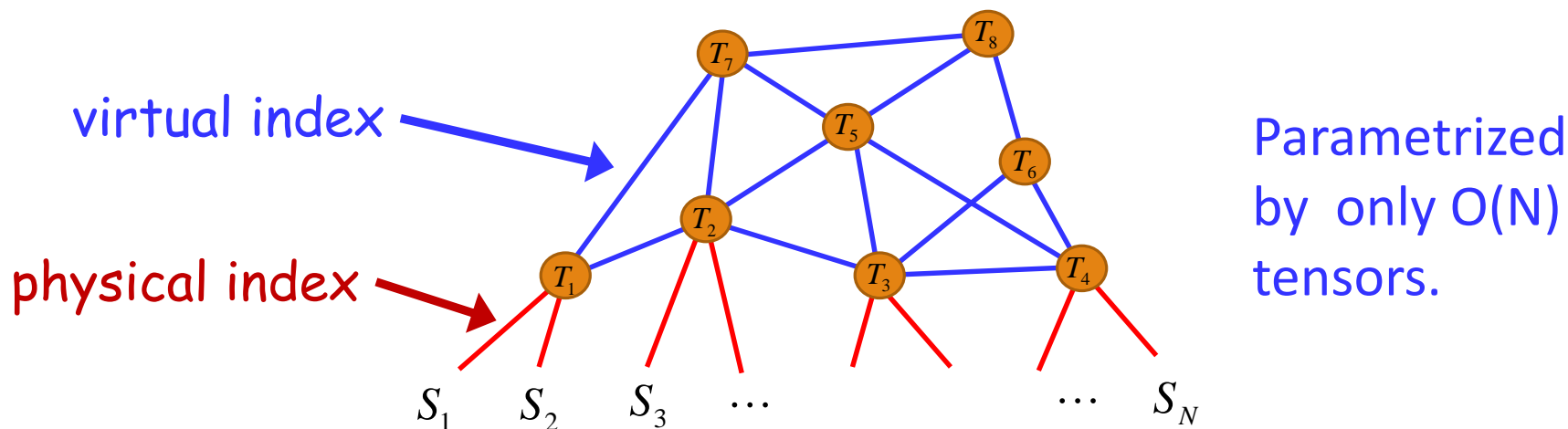
- 複数の妥当な仮説があるときには
シンプルなものを採用すべき
- 近似に含まれる変数を最小化せよ



William of Occam
ca. 1285-1349
from Wikipedia

変分波動関数としての TN (TNS)

$$|\psi(\{T_\alpha\})\rangle = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \cdots \sum_{S_N=\pm 1} \text{Cont}(\otimes_{\alpha} T_\alpha)_{S_1, S_2, \dots, S_N} |S_1, S_2, \dots, S_N\rangle$$



Traditional model
 $O(1)$

\ll

TN model
 $O(N)$

\ll

Exact model
 $O(e^N)$

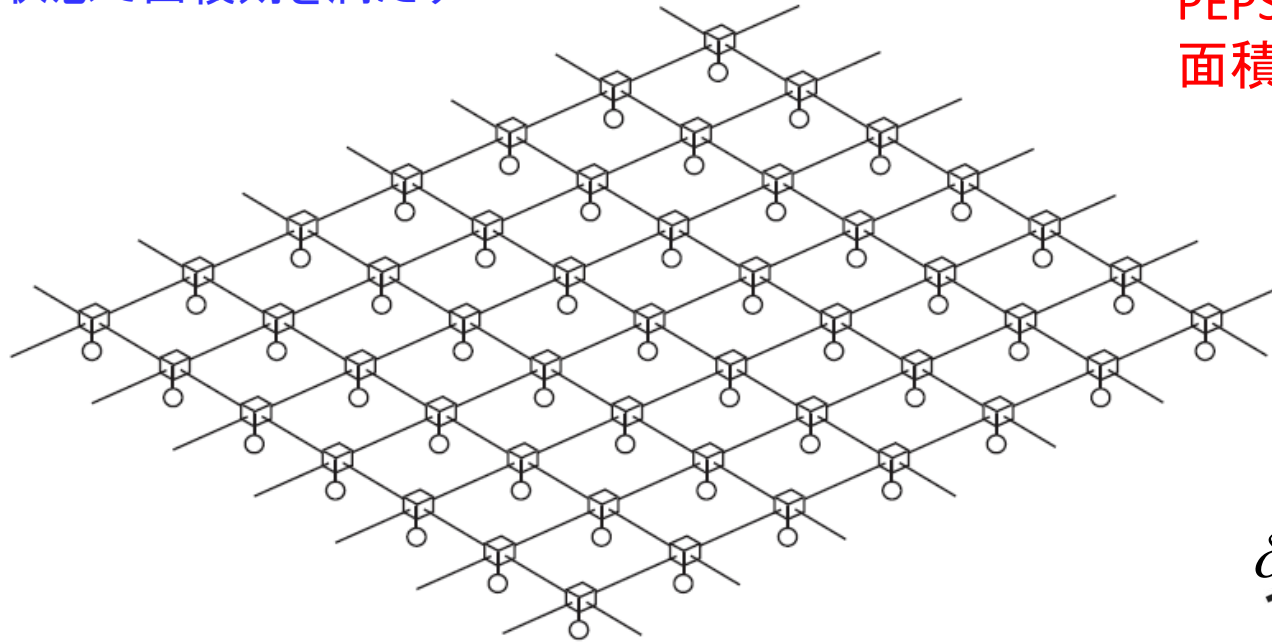
PEPS (or TPS)

Y. Hieida, K. Okunishi and Y. Akutsu (1999)

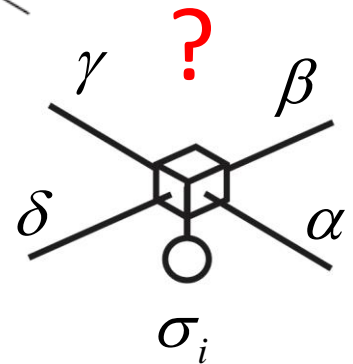
T. Nishino, et al (2001)

F. Verstraete and J. Cirac (2004)

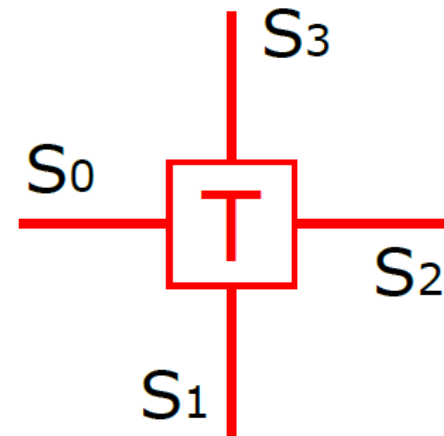
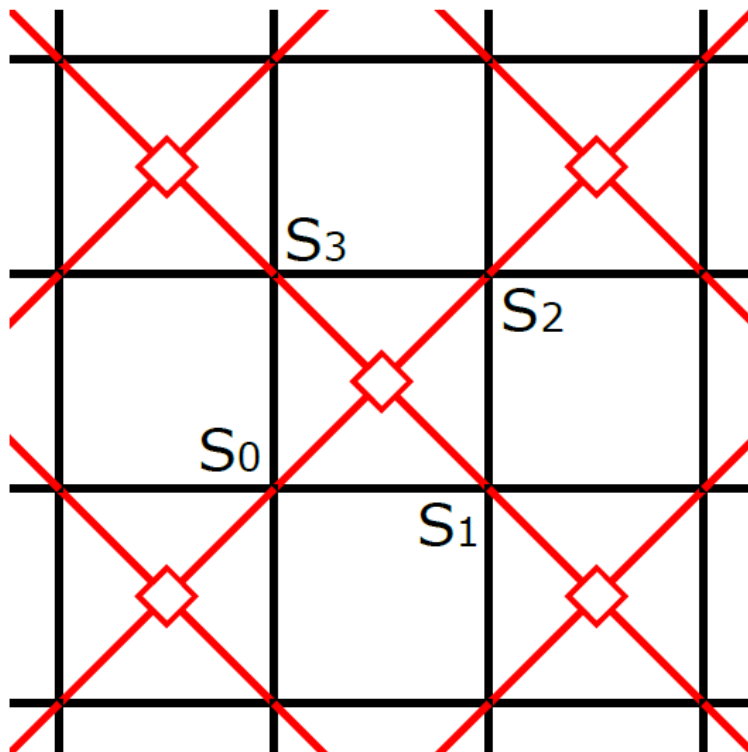
多くの物性科学の問題は
基底状態で面積則を満たす



PEPS は定義により
面積則を満たす



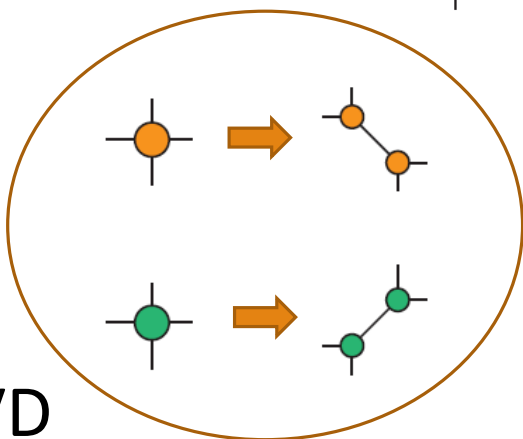
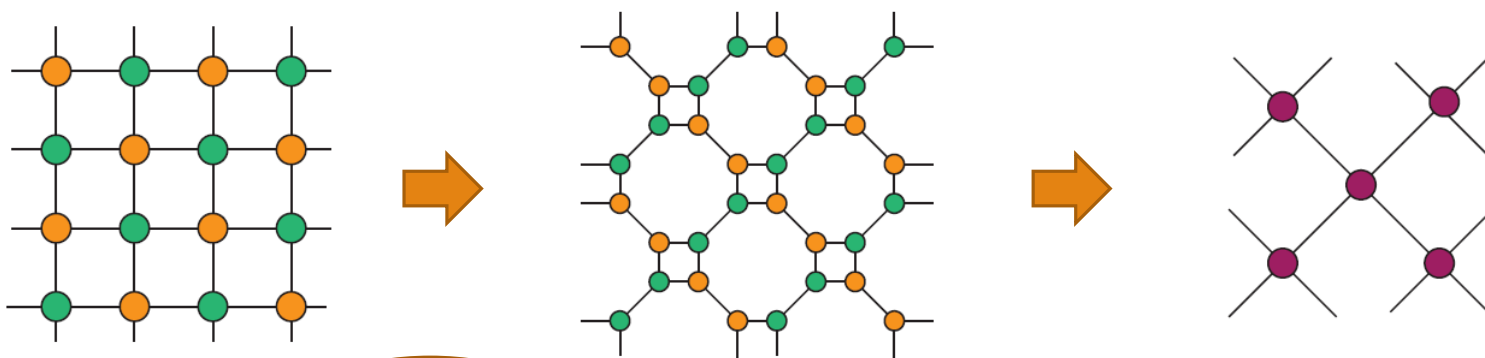
Ising Model is a TN



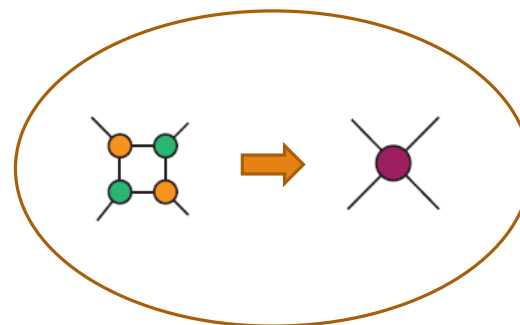
TN 表現にもとづく繰り込み群

Levin & Nave (2007); Gu, Levin, Wen (2008); Schuch, et al, (2007)

"TRG"



SVD

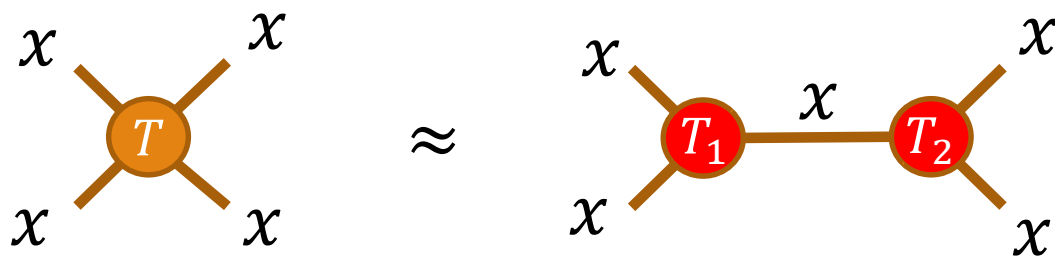


Contraction

Occam's Razor in TRG

--- 特異値分解 ---

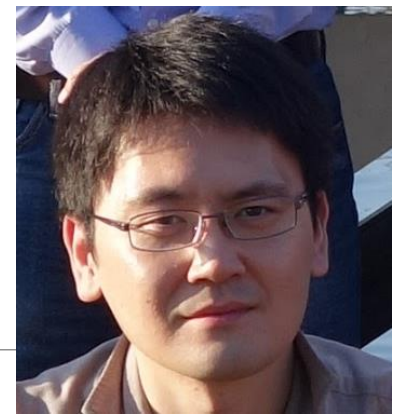
Singular Value Decomposition with Truncation



$$T = USV = \hat{U}\hat{S}\hat{V} = (\hat{U}\sqrt{\hat{S}})(\sqrt{\hat{S}}\hat{V}) = T_1T_2$$

$$x^2 \begin{matrix} x^2 \\ \boxed{T} \end{matrix} = \begin{matrix} \boxed{U} \\ \boxed{S} \\ \boxed{V} \end{matrix} \approx \begin{matrix} \boxed{\hat{U}} \\ \boxed{\hat{S}} \\ \boxed{\hat{V}} \end{matrix} = \begin{matrix} \boxed{T_1} \\ \boxed{T_2} \end{matrix} \begin{matrix} x^2 \\ x \end{matrix}$$

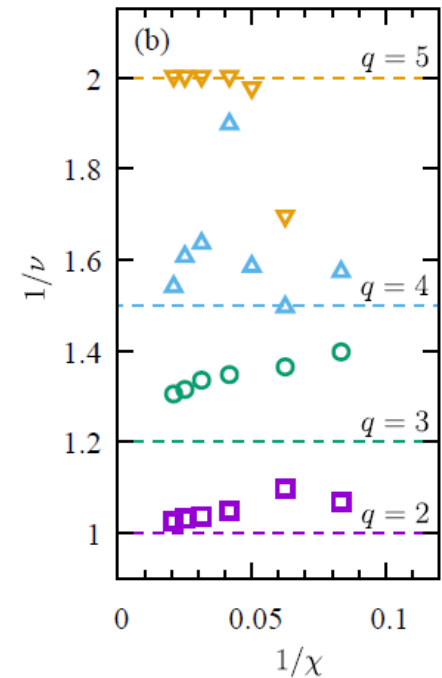
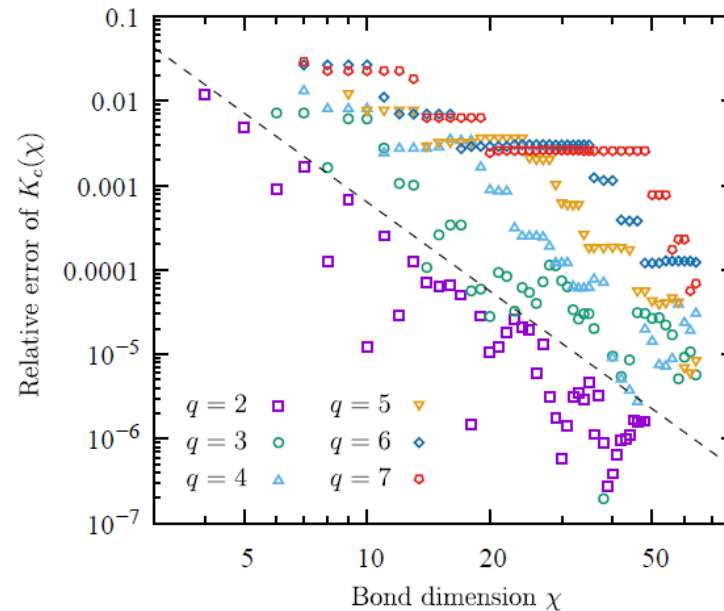
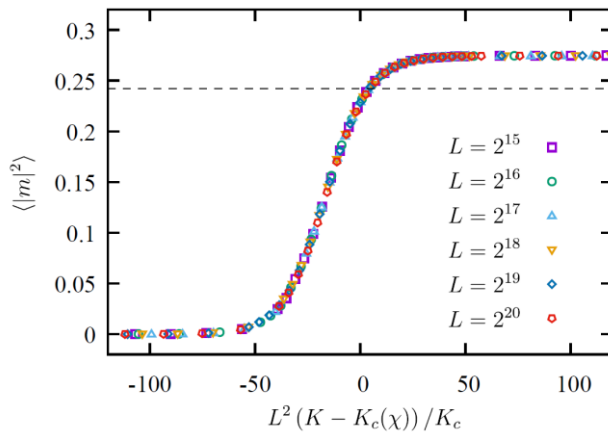
実際どのくらいいいのか？



2D Potts model ($L \leq 1,048,576$)
HOTRG calculation with $\chi \sim 50$

S. Morita and NK:
arXiv:1806.10275

Finite Size Scaling



polynomial time calculation of T_c

1st order nature
of 5-Potts
confirmed

フラストレート系も計算可能 カゴメ反強磁性体の1/3プラトー状態

Kshetrimayum, Picot, Orus, Poilblanc (2016)



T. Okubo (U. Tokyo)

DMRG

-> Resonating

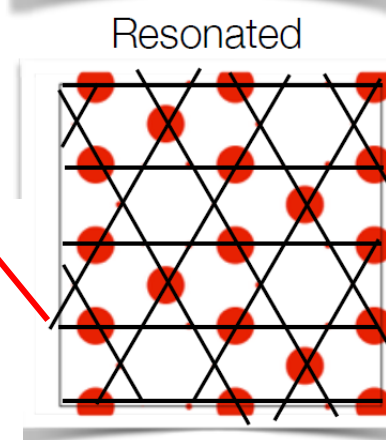
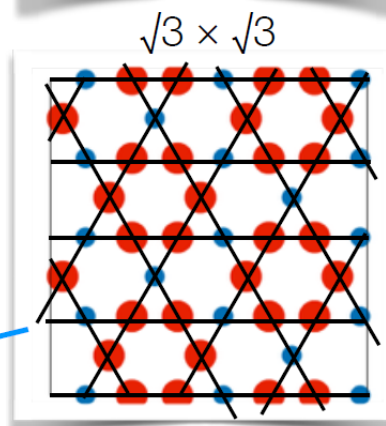
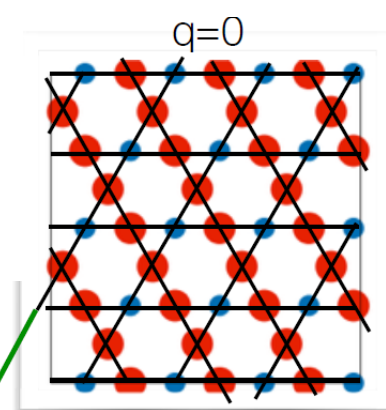
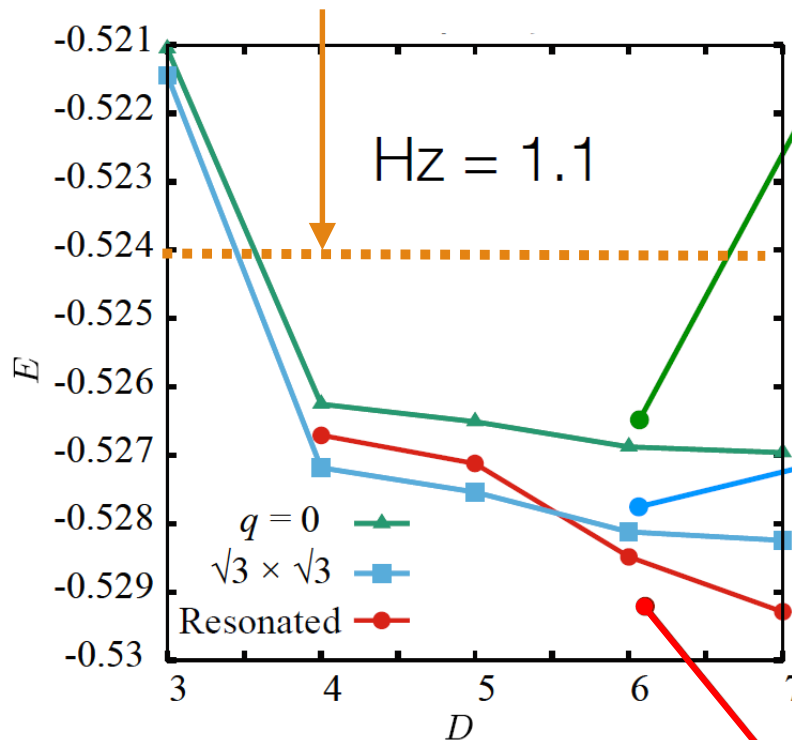
Exact Diagonalization

-> Ramp (gapless)

Tensor Network

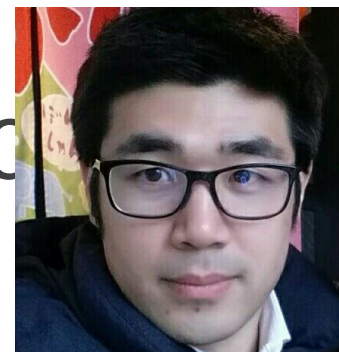
(local update)

-> up-up-down state



Tensor Network -> Resonating
(loop update / PESS) state is likely

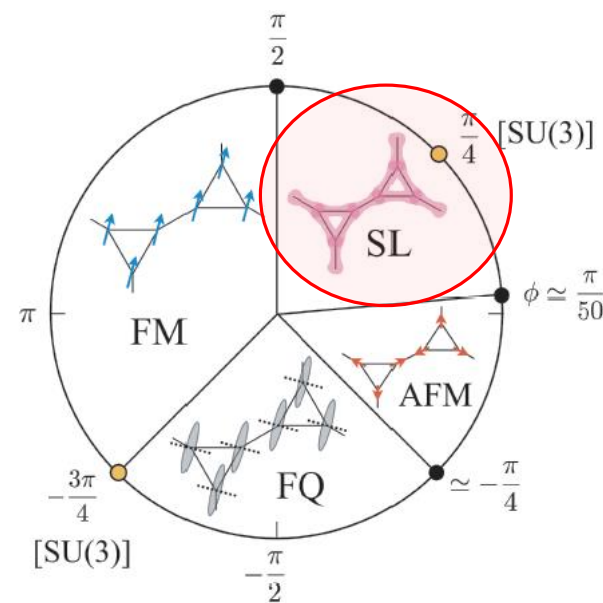
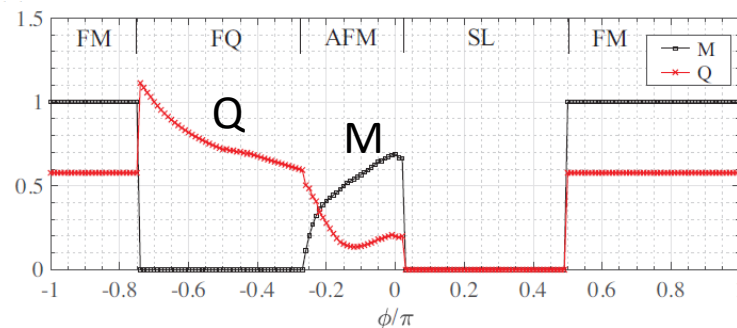
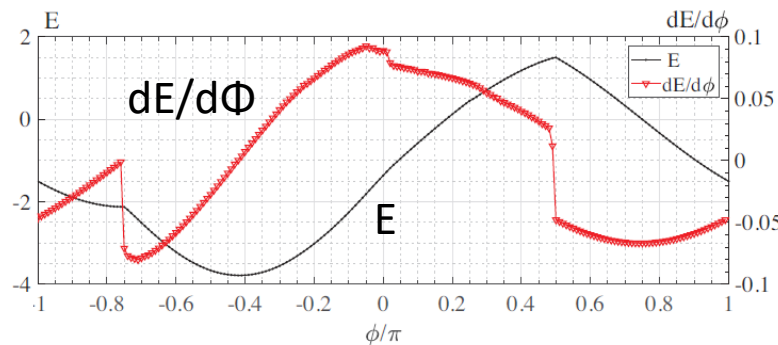
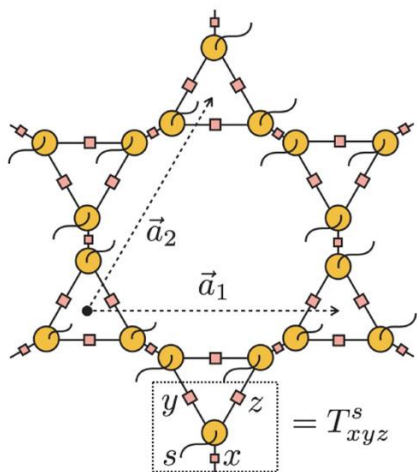
S=1 Bilinear-Biquadratic Model



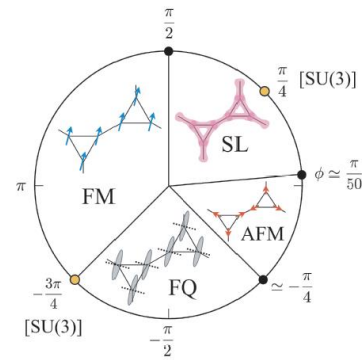
Hyunyoung LEE
(ISSP)

H.Y. Lee and NK: PRB 97, 205123 (2018)

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\left(\cos \phi - \frac{\sin \phi}{2} \right) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{\sin \phi}{2} \mathbf{Q}_i \cdot \mathbf{Q}_j \right]$$



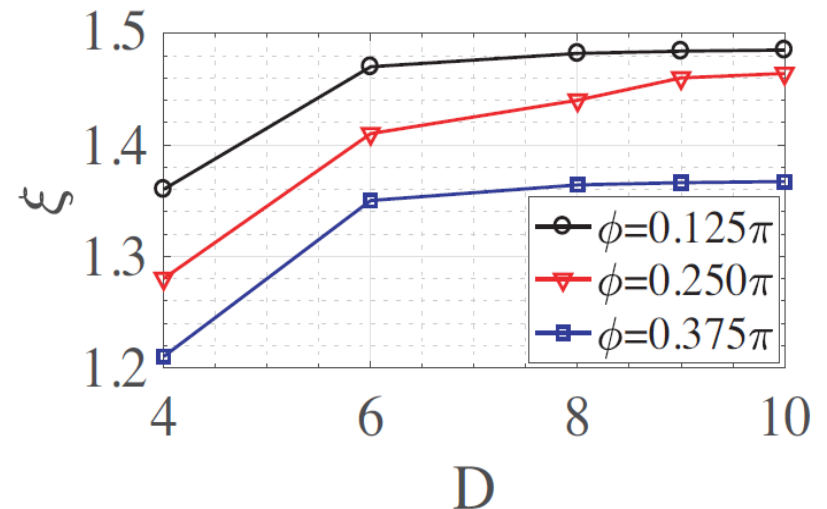
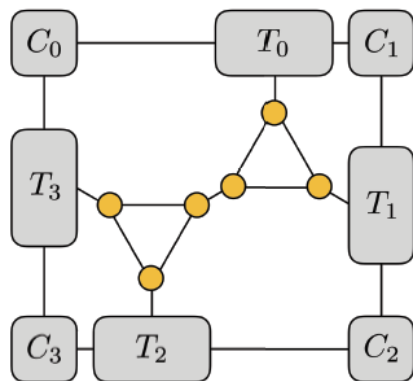
相関長の直接計算



Transfer matrix constructed from CTM-RG

$$X_{(\alpha, \alpha'; \beta, \beta')} = \begin{array}{c} \alpha \text{ --- } \boxed{T_0} \text{ --- } \beta \\ | \\ \alpha' \text{ --- } \boxed{T_2} \text{ --- } \beta' \end{array}$$

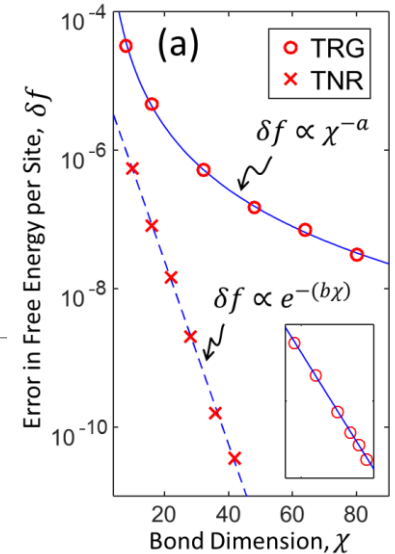
H.Y. Lee and NK:
PRB 97, 205123 (2018)



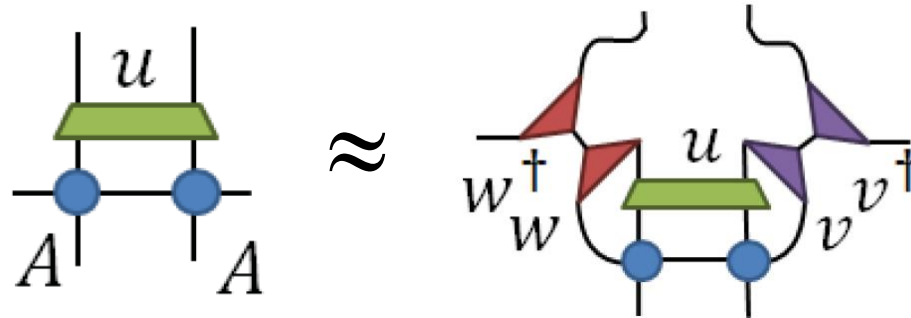
TRG の改良

CF: 原田さんの講演

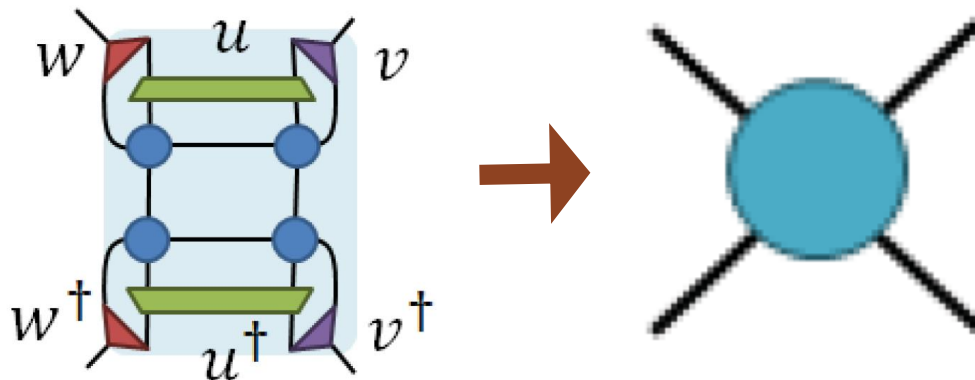
Evenbly and Vidal: Phys. Rev. Lett. 115, 180405 (2015)



Optimization condition for u , v and w



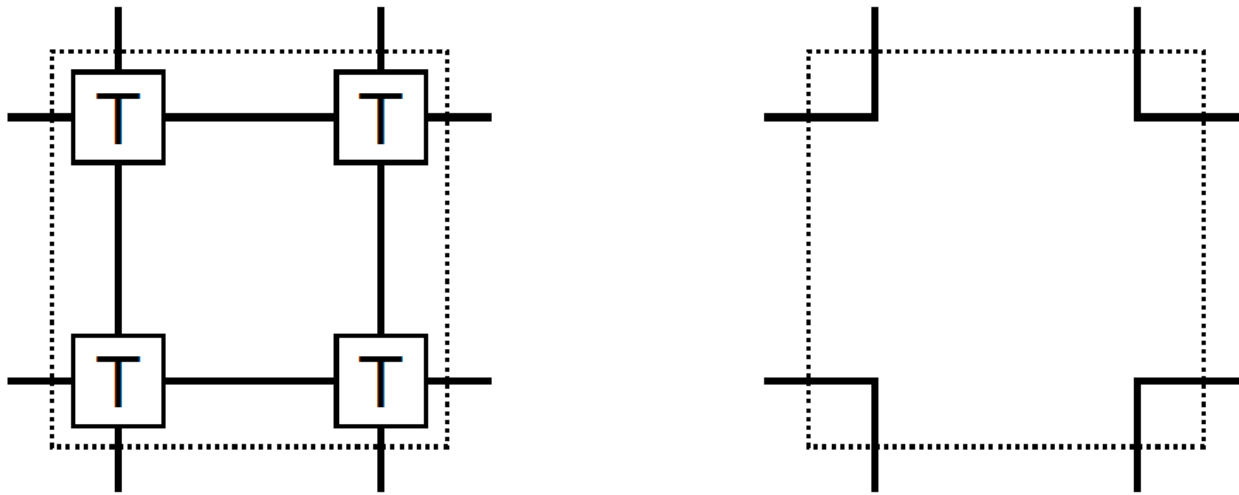
RG transformation:



can get rid of local entanglement
converges faster
when D increased

なにが改良されたのか？

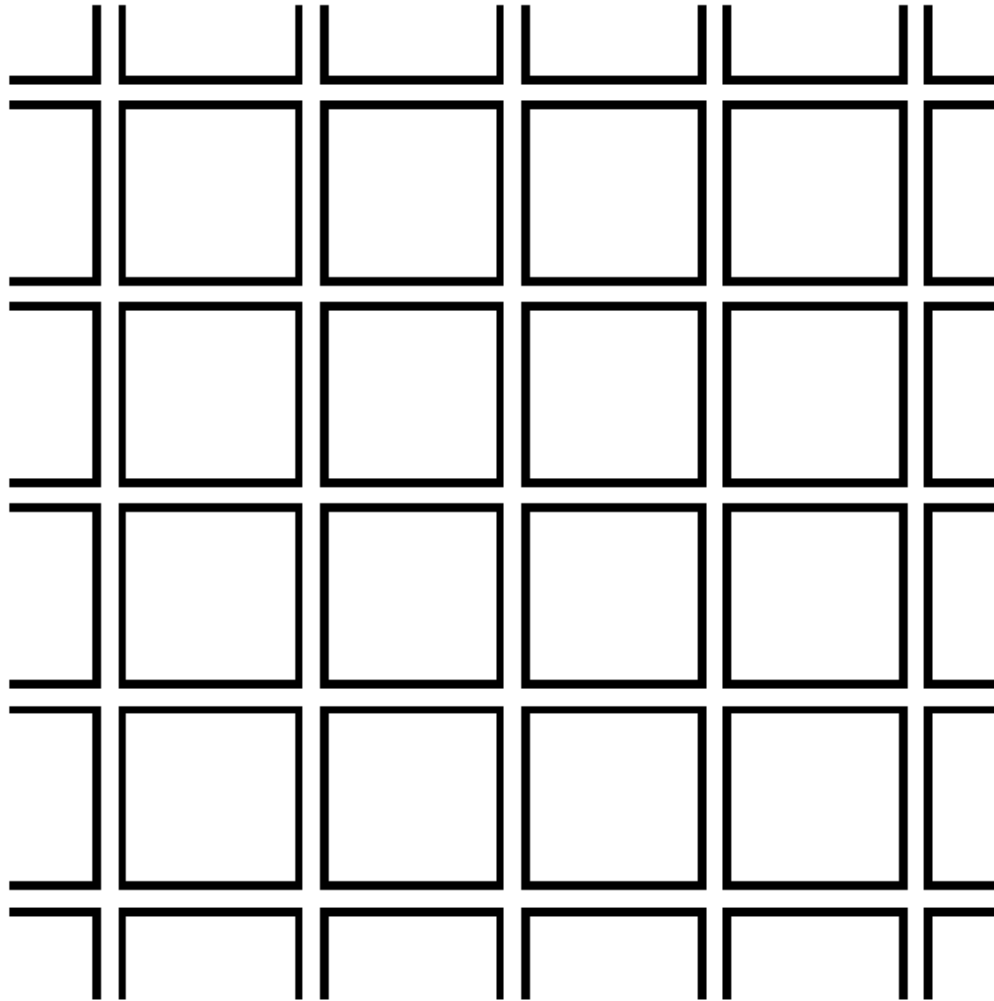
--- Corner Double Line (CDL) Tensor ---



In the lowest order in $1/T$, a cluster of 4 Ising tensors is a CDL.
It also appears as the fixed point tensor of the TRG procedure in the disordered phase.

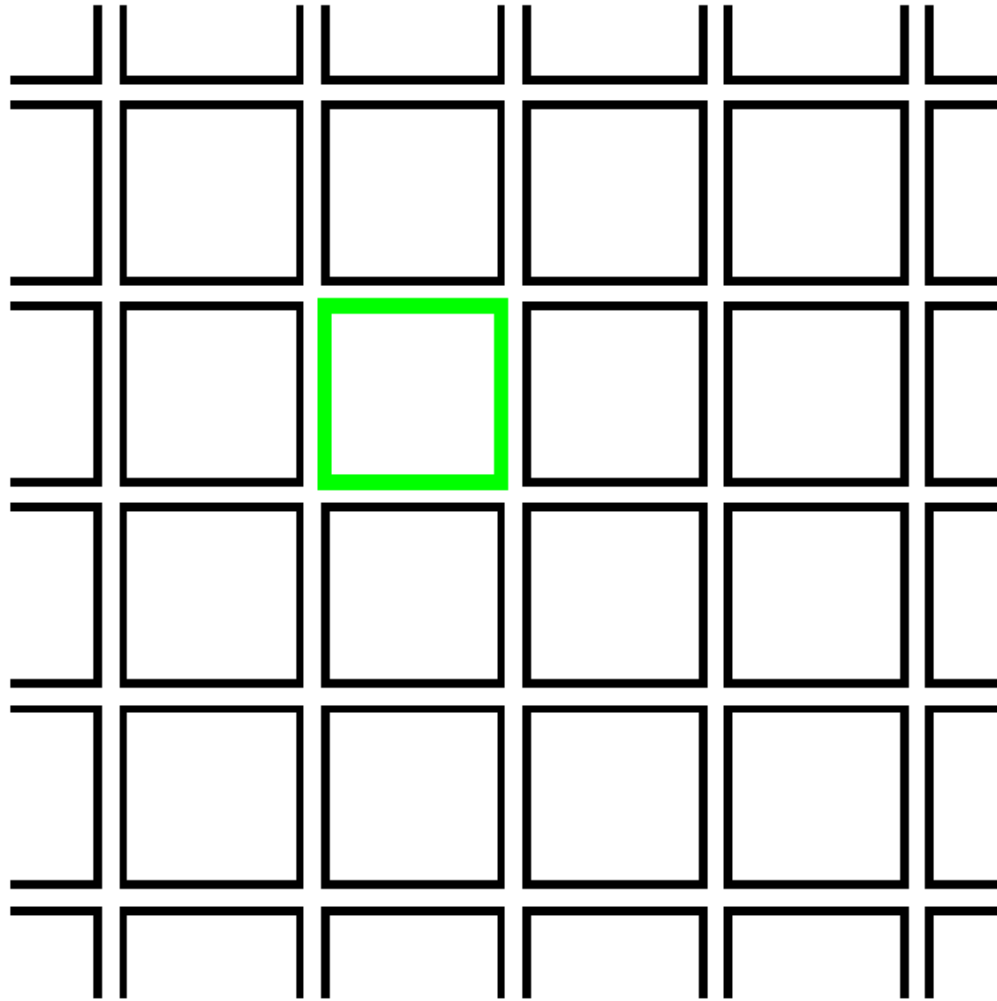
局所的エンタングルメントループの行方

各テンソルが
CDL だとする



局所的エンタングルメントループの行方

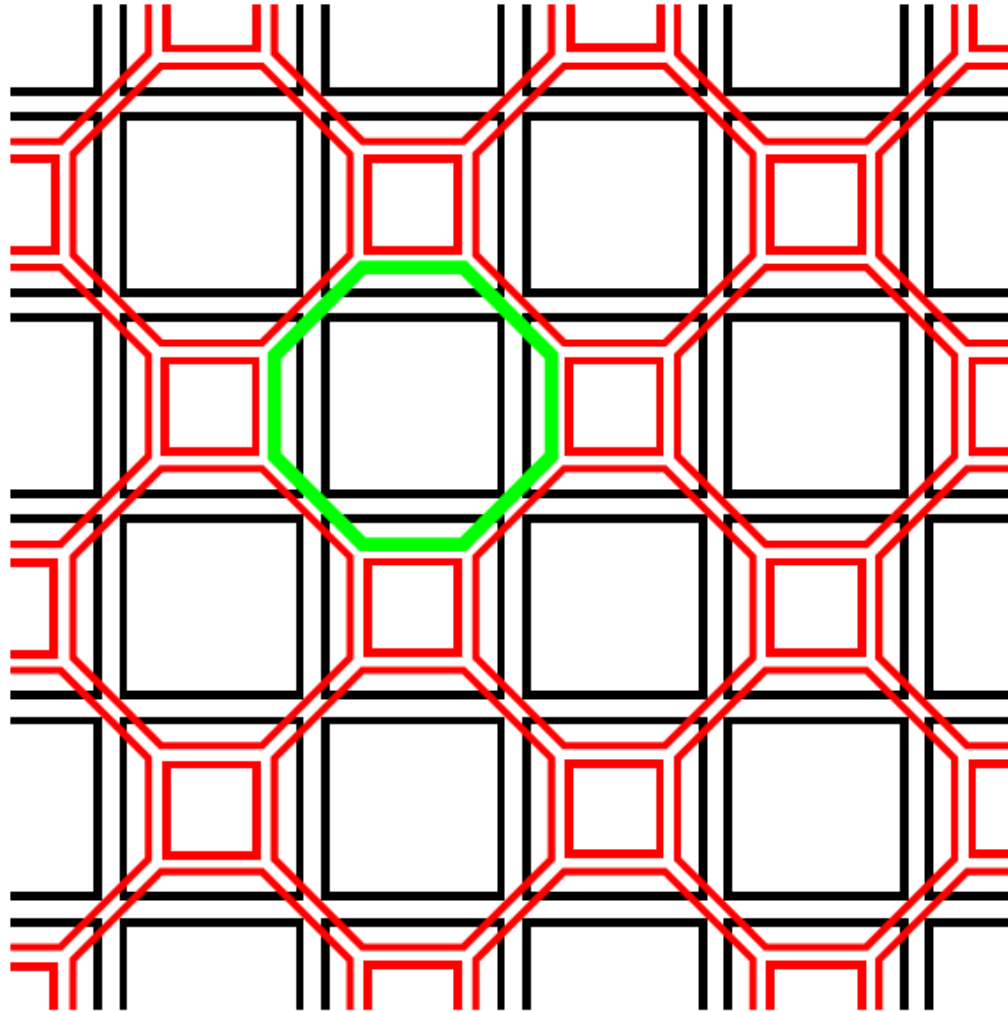
ある1つの
ループに着目



局所的エンタングルメントループの行方

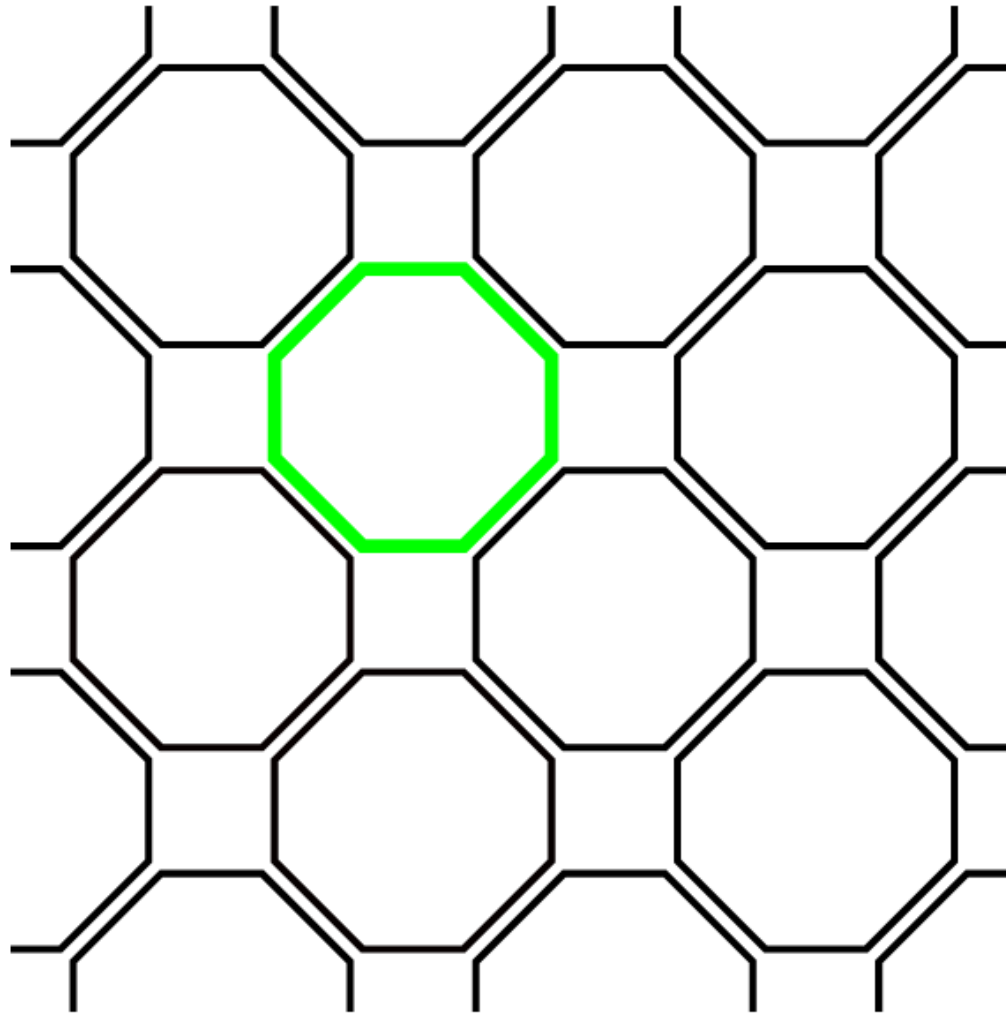
1回目の SVD

(ループは残っている)



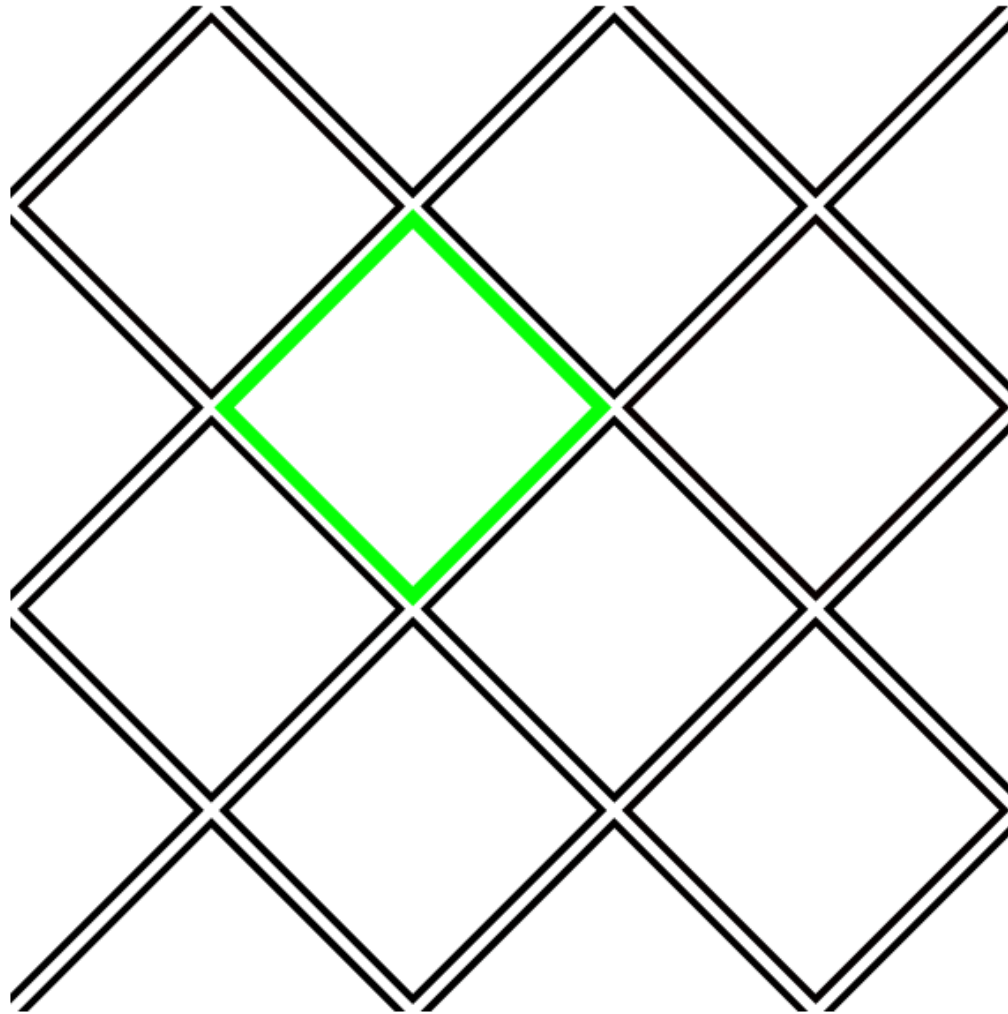
局所的エンタングルメントループの行方

SVD 後の
ネットワーク



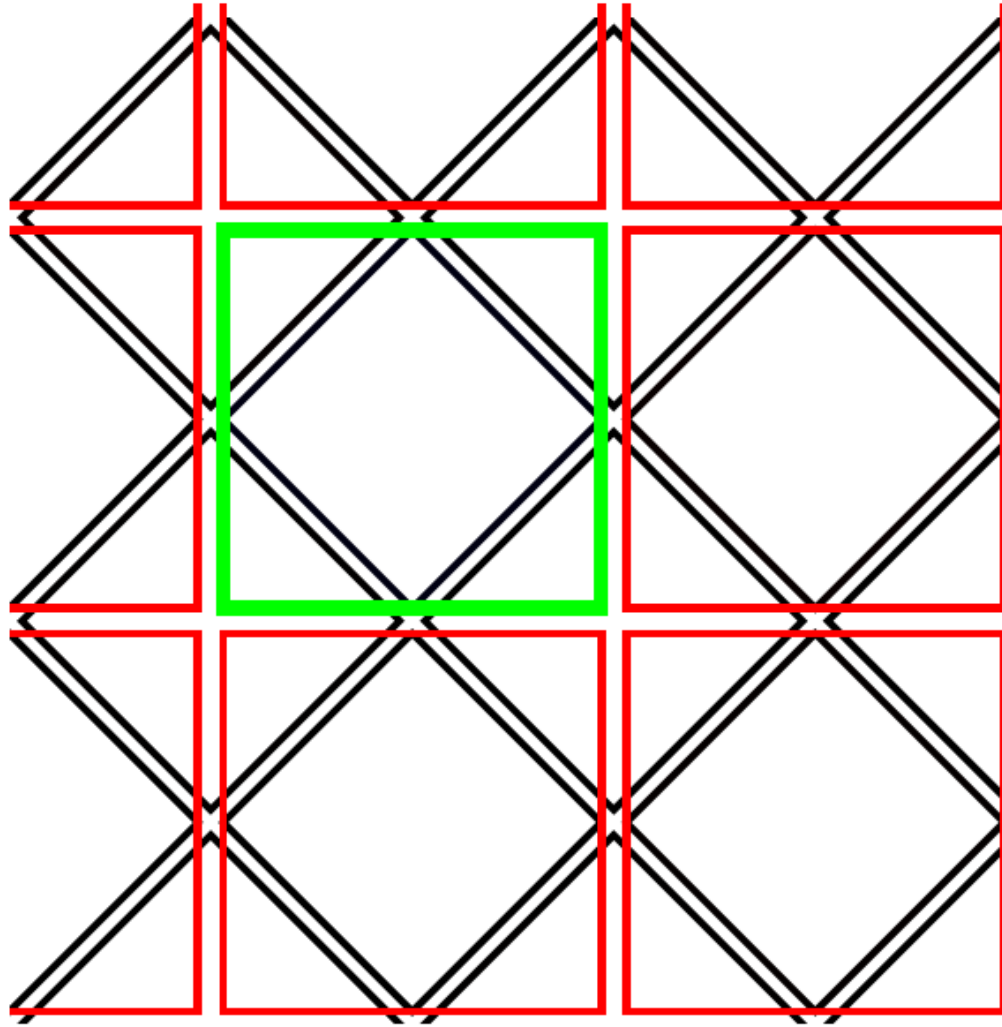
局所的エンタングルメントループの行方

四角形縮約後の
ネットワーク



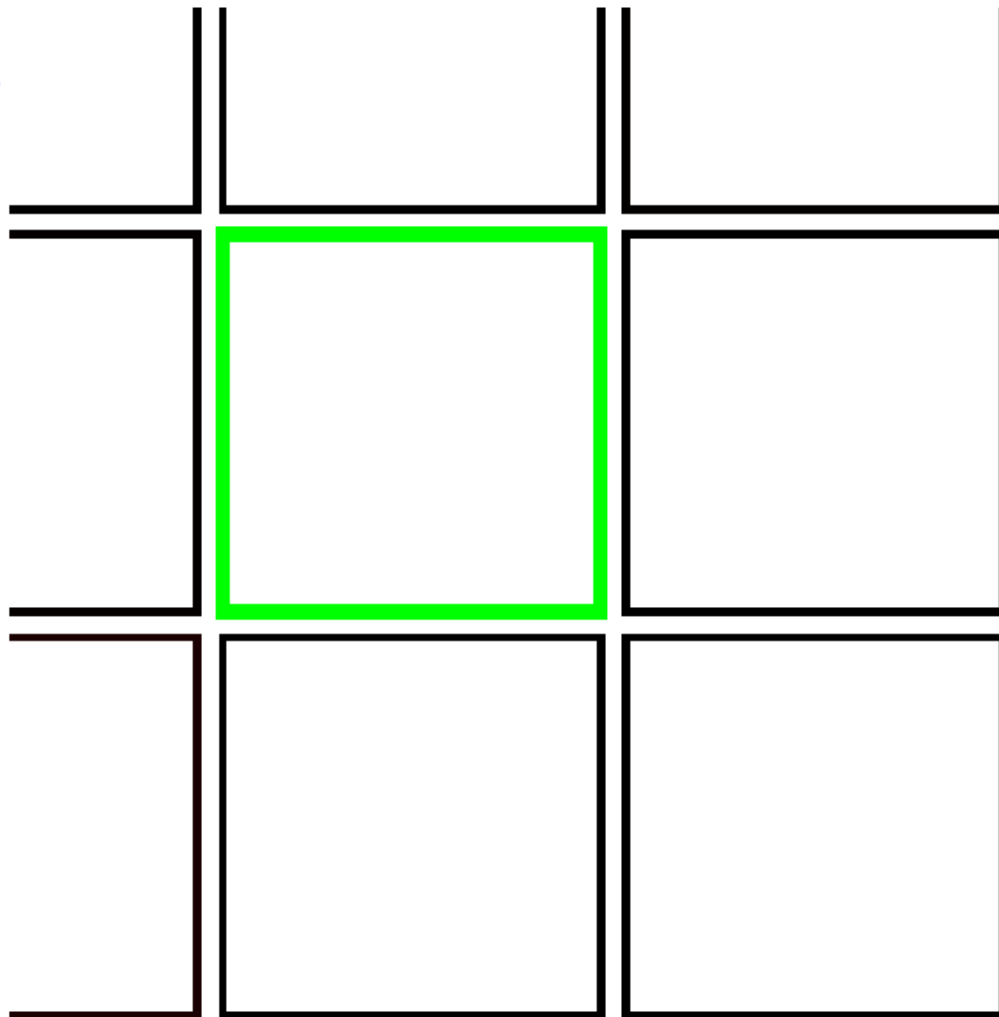
局所的エンタングルメントループの行方

2回目の SVD



局所的エンタングルメントループの行方

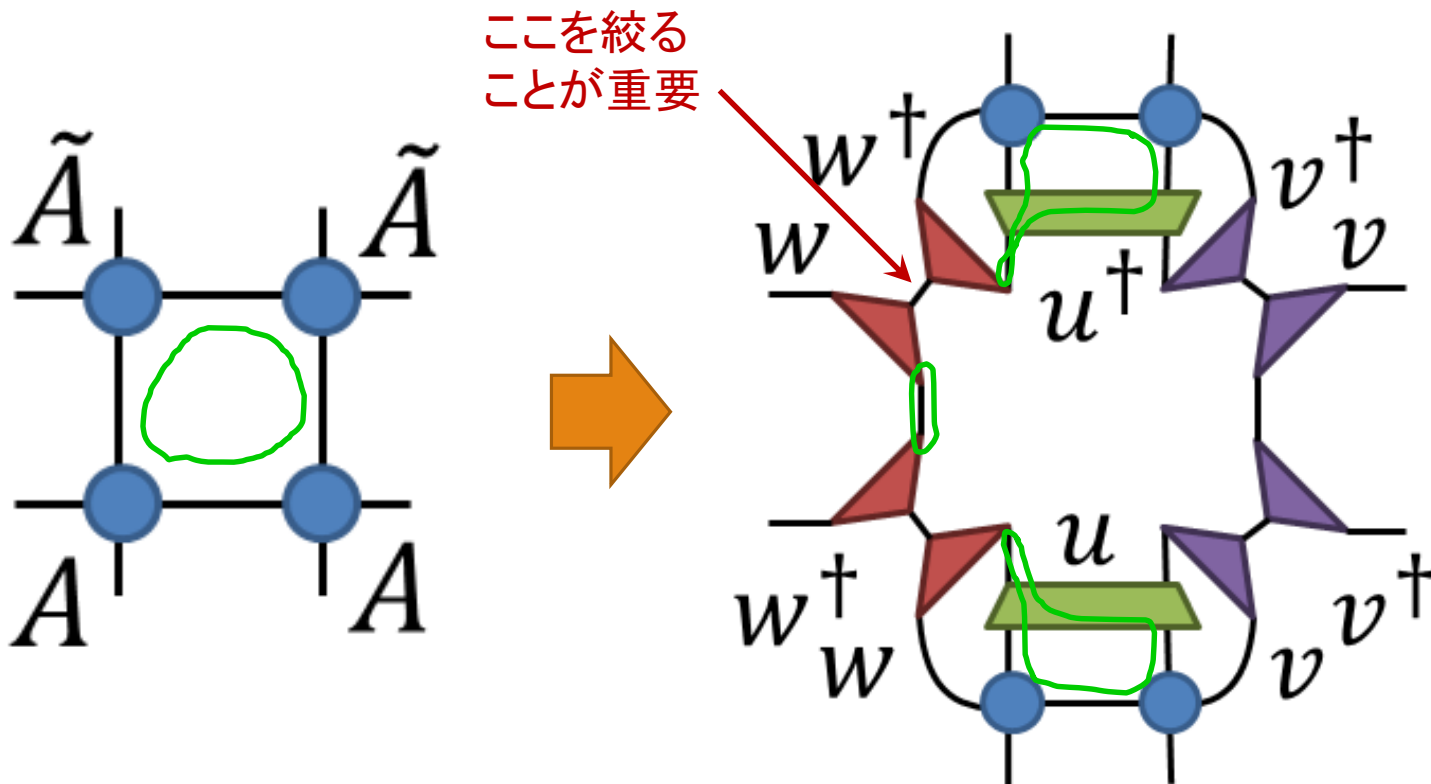
2回目の SVD 後の
ネットワーク



どこまで
「繰り込み」
変換をしても,
 $O(1)$ スケール
のループが
残っている.

テンソルの
自由度を
無駄に
食いつぶ
している.

ループの消去



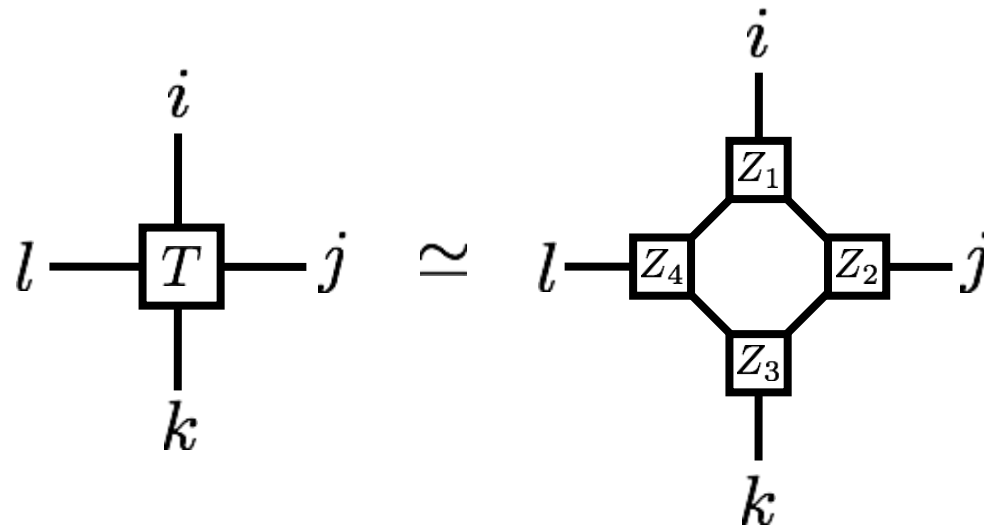
isometry で「情報伝達経路」を絞り、ループを断ち切ることで以前は次世代まで残っていたループが現世代で消去される。

より直接的な方法の模索

情報伝達経路を絞ることで
ループを消去したが、方法が複雑。

より直接的にループの構造を見つけ出して、
消去することはできないか？

テンソルリング分解 (TRD)



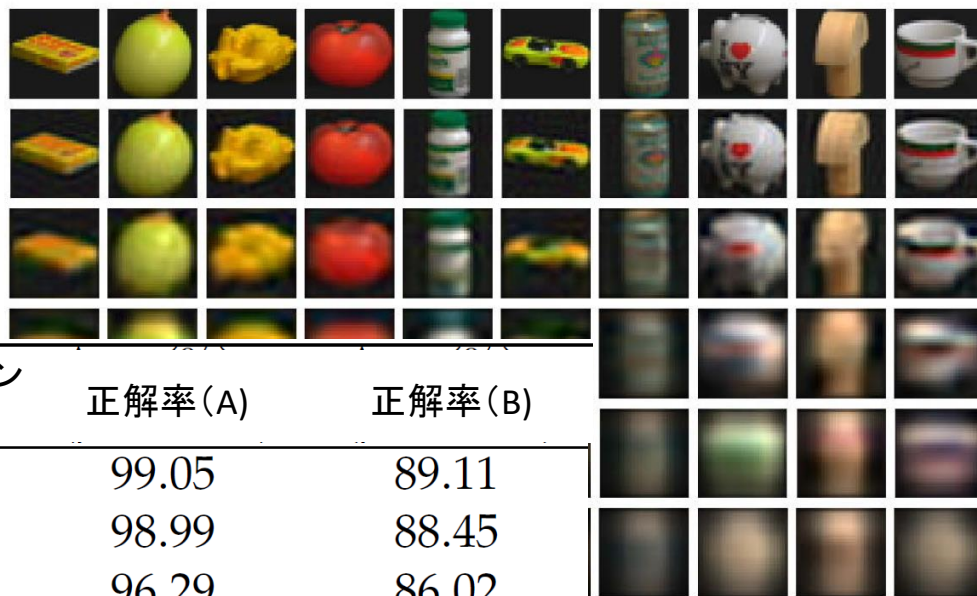
リング分解の効果

Zhou, Cichocki ら arXiv:1606.05535

COIL100 分類課題
(2次元画像分類)

128 x 128 x 3 x 7200 bits

KNN 分類器 (K=1) を画像番号核に適用

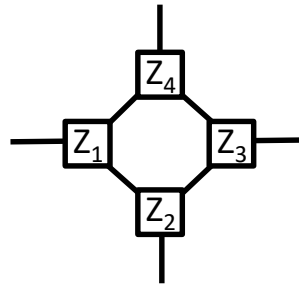


	許容誤差	最大ボンド次元	平均ボンド次元	正解率 (A)	正解率 (B)
	0.19	67	47.3	99.05	89.11
	0.28	23	16.3	98.99	88.45
TT-SVD	0.37	8	6.3	96.29	86.02
オープンチェイン	0.46	3	2.7	47.78	44.00
	0.19	23	12.0	99.14	89.29
	0.28	10	6.0	99.19	89.89
TR-SVD	0.36	5	3.5	98.51	88.10
リング	0.43	3	2.3	83.43	73.20

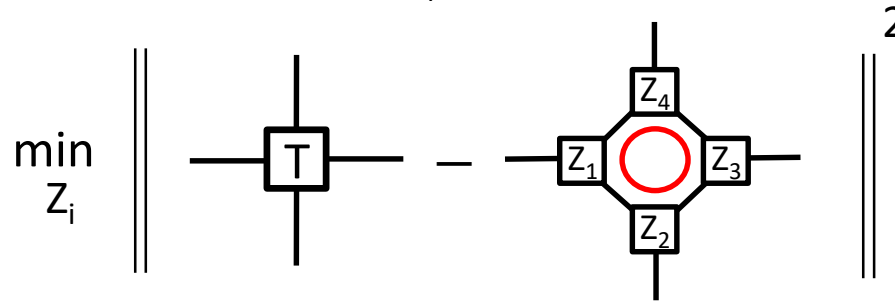
リングにすると,
同等の一般化性能
を少ないパラメータ
で実現できた

Alternating Least Square (ALS)

(1) random initial tensors Z_i



(2) for $i=1,2,3,4$, update Z_i by

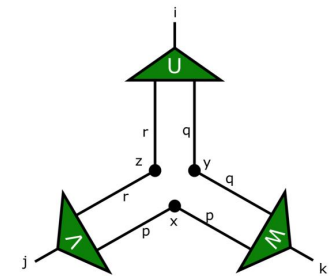
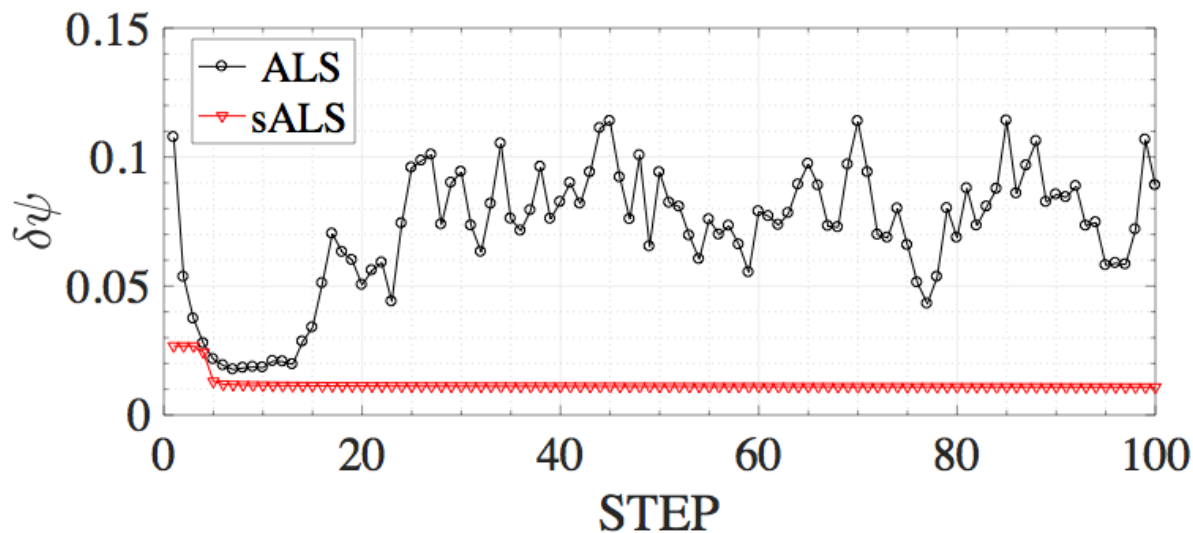


(3) repeat until the error converges

However, ALS is trapped by local loops.

ALS on CDL

$$\delta\psi = \|T - \text{tTr}\{Z^a\}\|_F / \|T\|_F$$

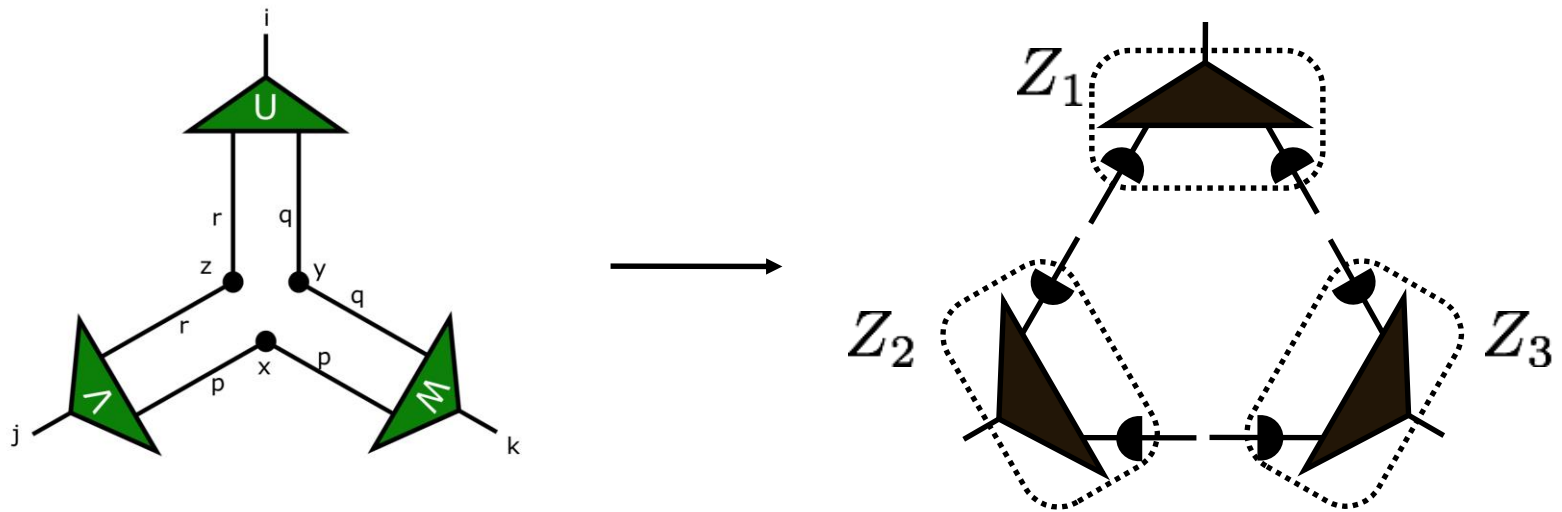


sALS ... The initial condition obtained by sequential (open chain) SVD

ALS on CDL is either unstable or stuck with a local minimum.

TRD of CDL

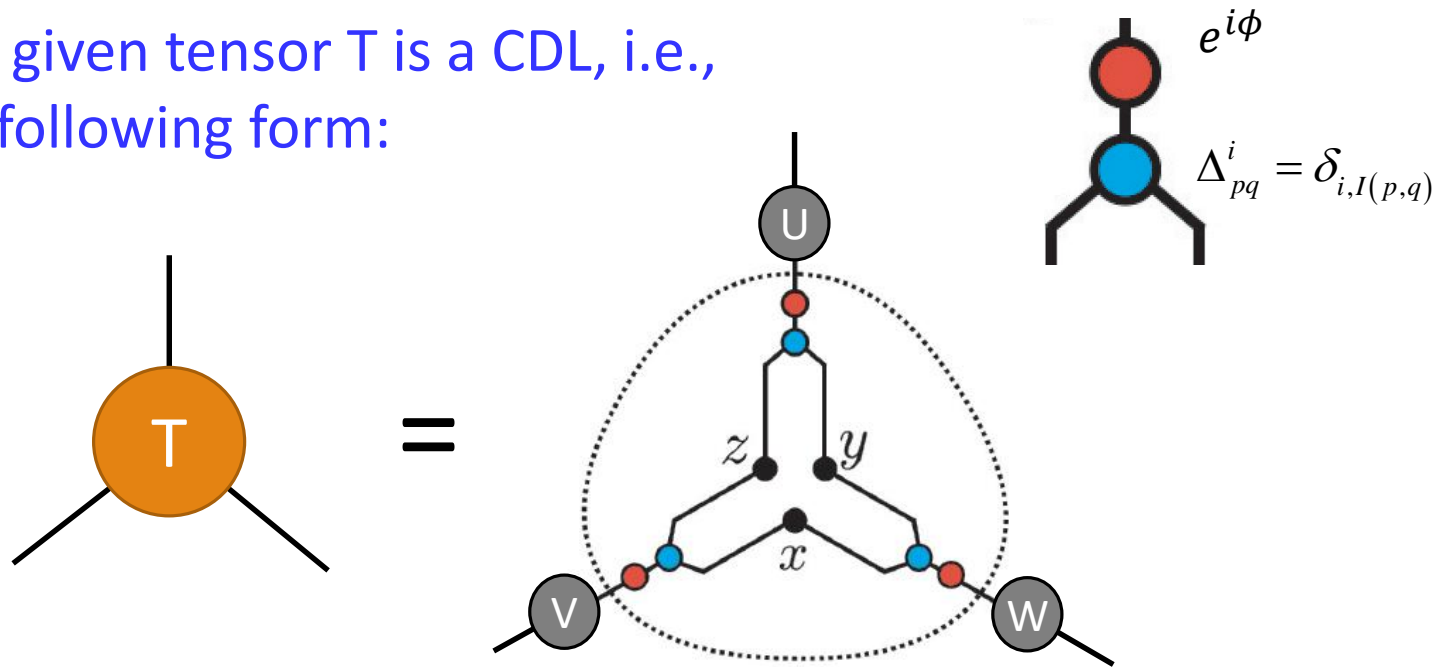
If we knew U, V, W and x, y, z explicitly,
we can find Z_1, Z_2, Z_3 of the TRD very easily.



... but how do we know them?

インデックス分割によるリング近似

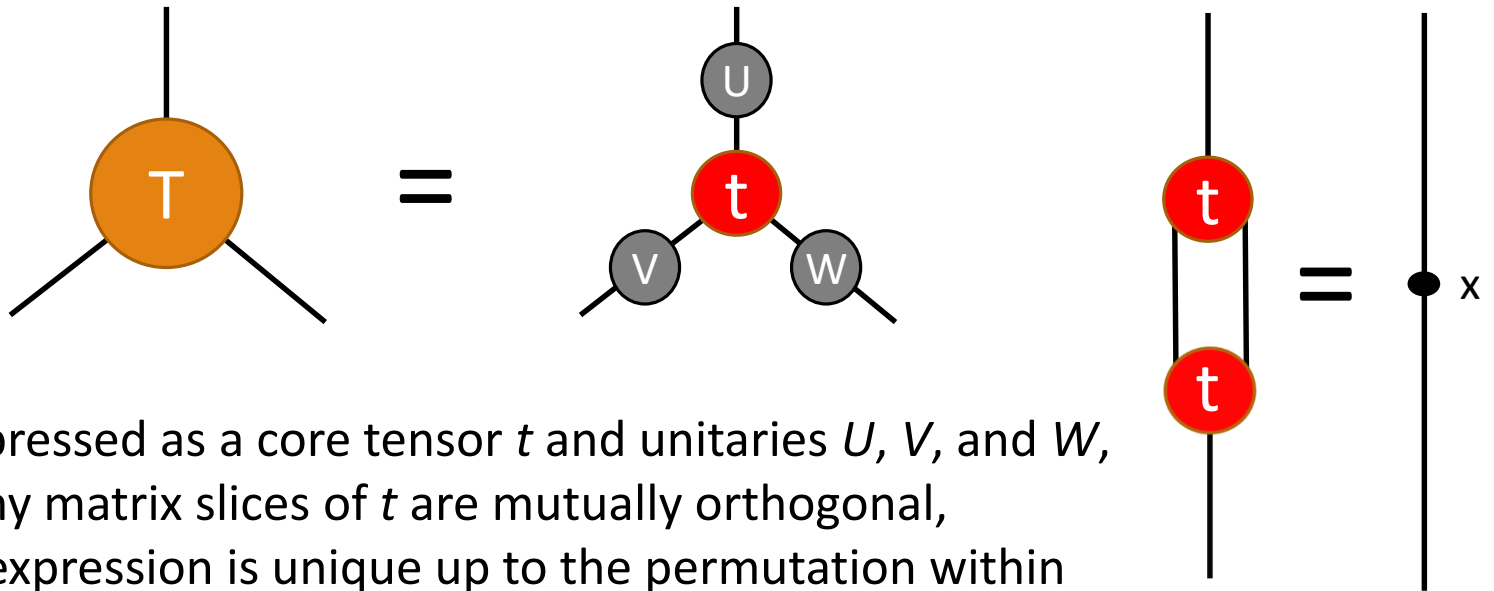
When the given tensor T is a CDL, i.e.,
it has the following form:



... then, we can find U , V and W by HOSVD

HOSVD の一意性

HOSVD



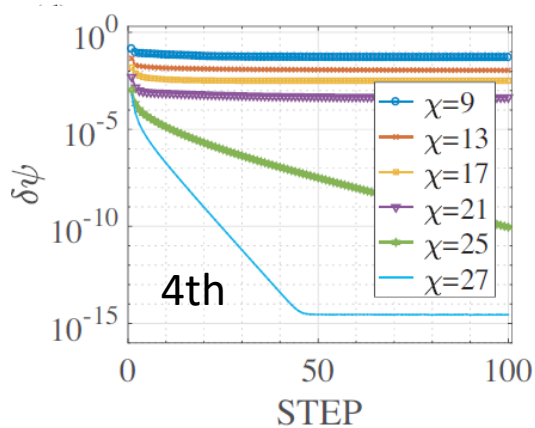
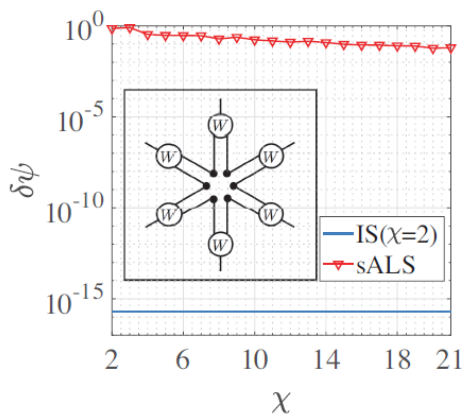
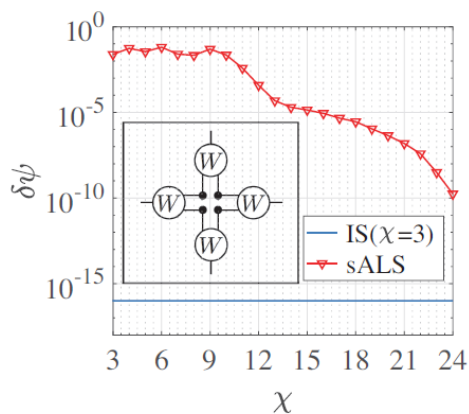
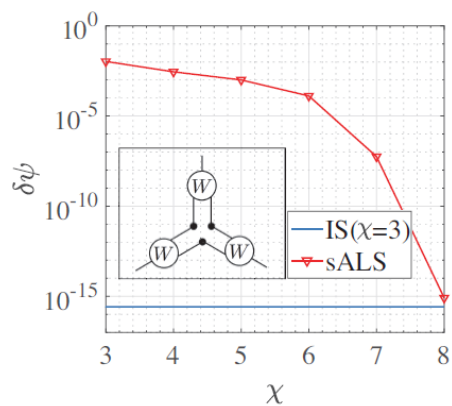
If T is expressed as a core tensor t and unitaries U , V , and W , where any matrix slices of t are mutually orthogonal, such an expression is unique up to the permutation within each index and the phase factors.

CDL は mutual orthogonality を満たすので、
HOSVD で U, V, W は求まる。

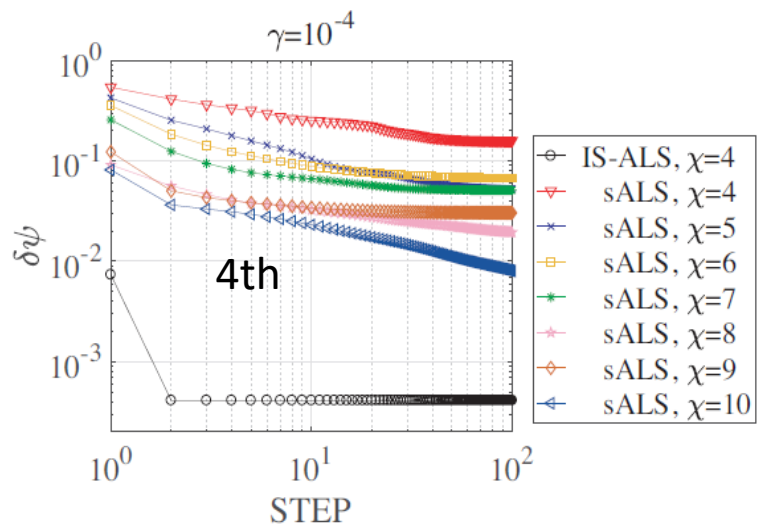
mutual orthogonality
of matrix slices of t

インデックス分割によるリング近似

H.-Y. Lee and N.K. arXiv:1807.03862

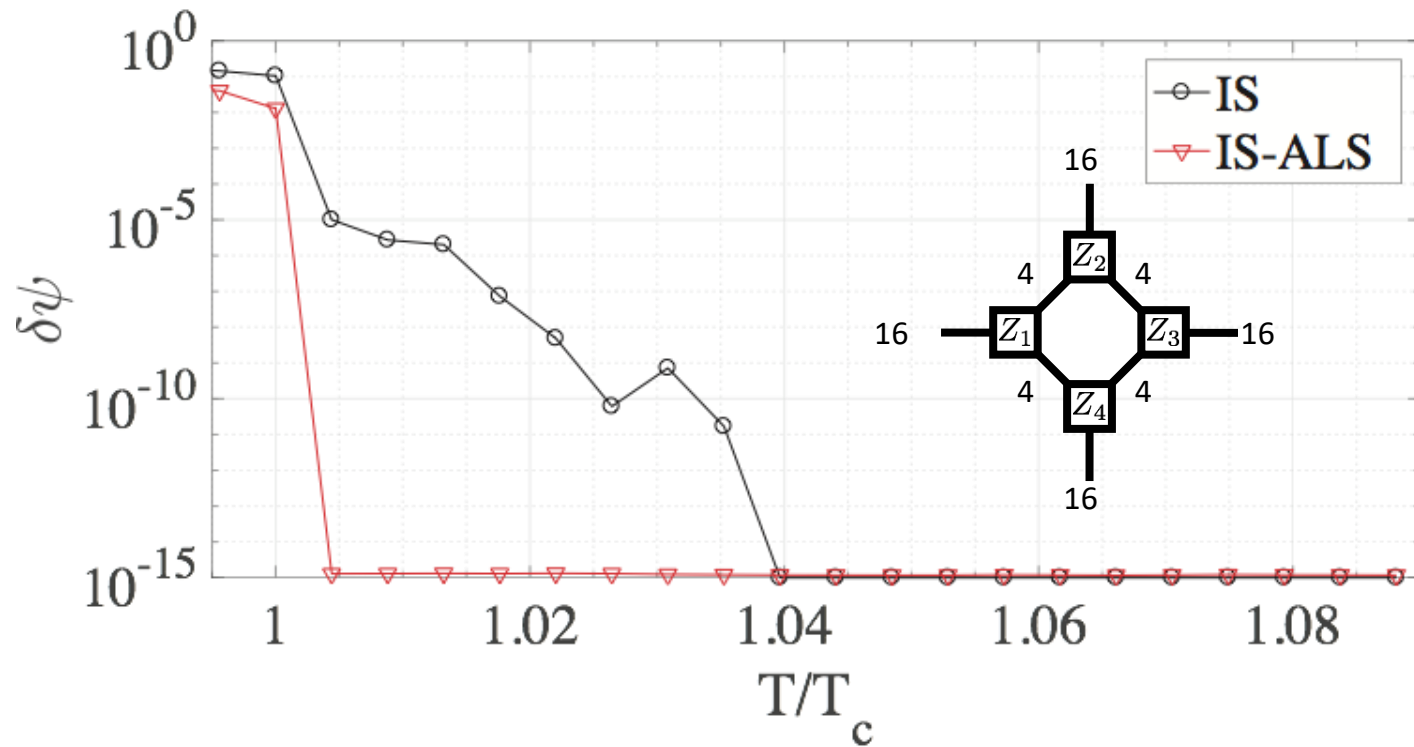


ランダムノイズがある場合

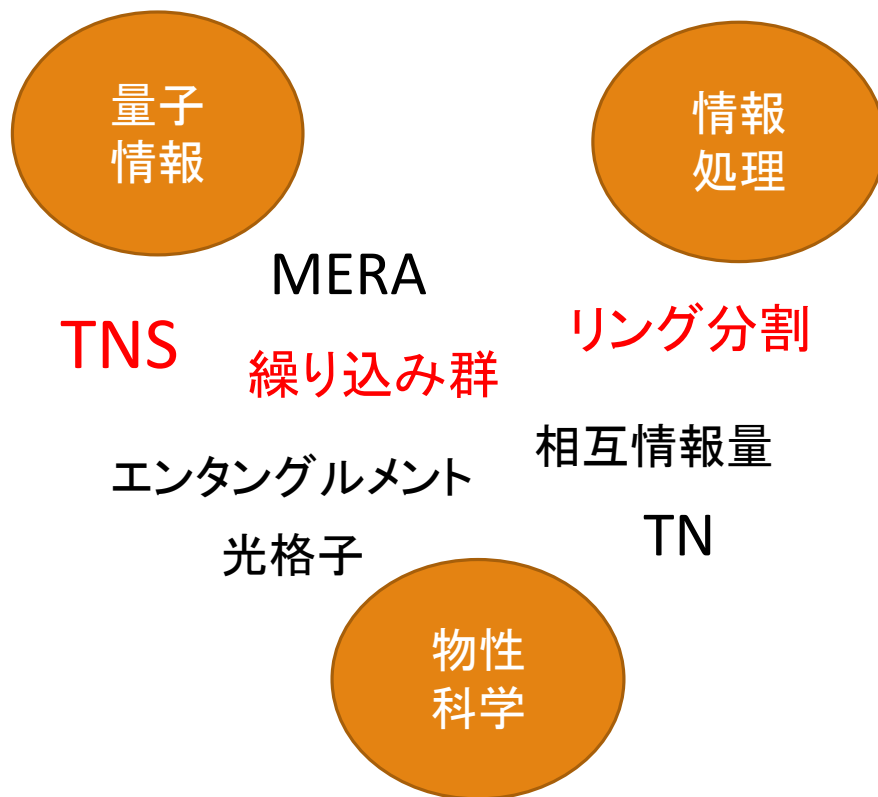


内部構造を推定することで
厄介な局所安定解を回避
多少のノイズがあっても機能する

2次元イジングモデルの場合



まとめ



■ テンソル表現による量子計算によって超大規模系や、フラストレート系も計算可能になってきた.

■ テンソル表現による実空間絡り込み群において典型的に現れるCDLはリング分解問題で障害となる.

■ HOSVDを利用したインデックス分割によって障害を取り除けるかもしれない.