量子物理とテンソルネットワーク

東大理　量子ソフトウェア寄付講座　大久保毅

JST さきがけ「量子情報処理」領域

「テンソルネットワーク状態を活用した量子多体系基底状態計算手法の開発」

コンテンツ

- イントロダクション
    - 量子多体問題とその困難
    - テンソルネットワーク
- テンソルネットワークの応用
    - キタエフ模型とスピン液体のテンソルネットワーク表現
- 量子コンピュータへの展開とスピン液体の量子回路表現
- まとめ

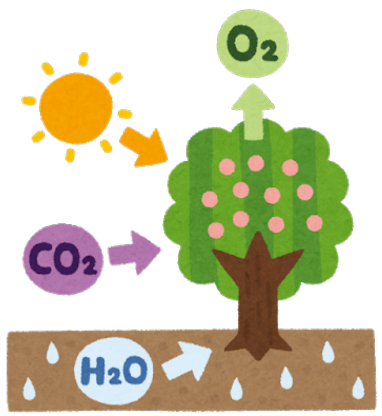
量子多体問題

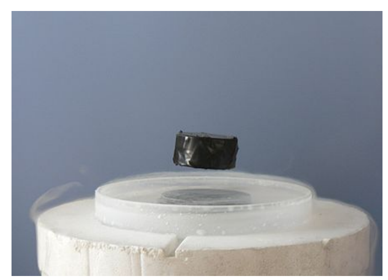
物質科学における多彩な現象

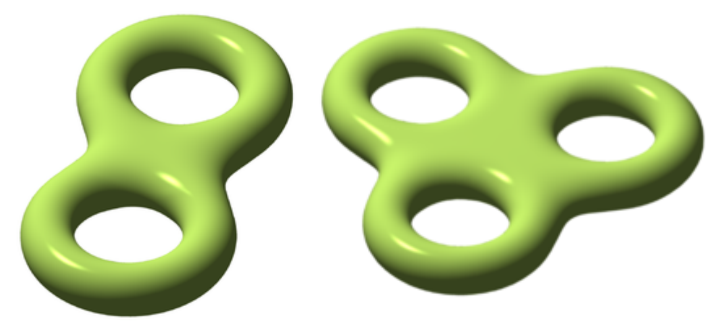
- 化学反応
- 超伝導
- トポロジカル状態
- …

多数の"粒子"が量子力学に従って"運動"

量子多体問題







wikipedia"マイスナー効果", "トーラス"より

量子力学の支配方程式＝シュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle = \mathcal{H}|\Psi\rangle$$

$\mathcal{H}$ ：ハミルトニアン

$|\Psi\rangle$ ：状態ベクトル

時間に依存しない場合

$$\mathcal{H}|\Psi\rangle = \underbrace{E}_{\text{エネルギー}}|\Psi\rangle$$

＝ 固有値問題

量子多体問題の困難

シュレディンガー方程式：$\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$

- ベクトル空間の次元は"粒子数"に対して指数関数的に大きい
- 量子多体問題〜「巨大な行列」の固有値問題

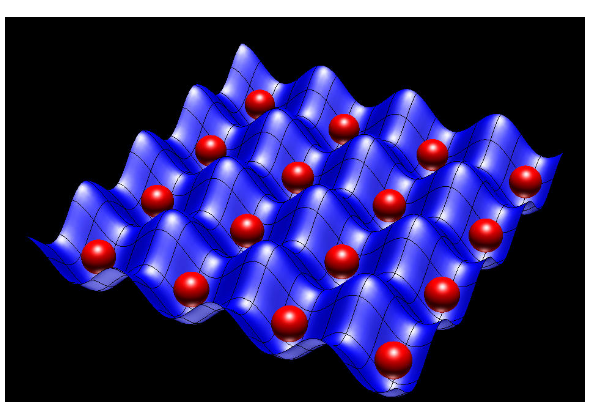
古典的な計算機でこの問題を（厳密に）解くには、
膨大なメモリと計算時間が必要

例：量子ビットの厳密シミュレーションは50 qubit程度が限界

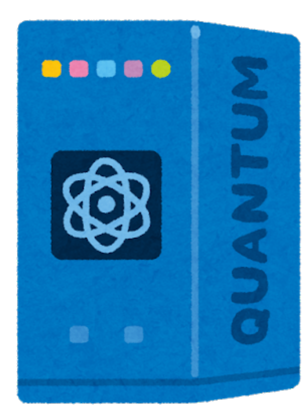
制御された量子系：

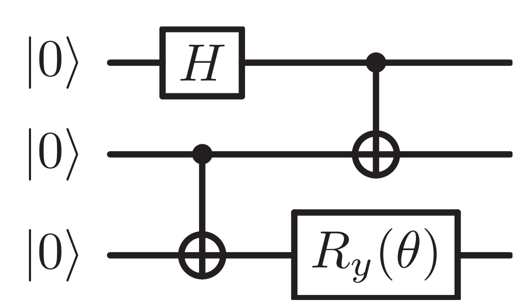
- 量子シミュレータ
- 万能量子コンピュータ

量子多体系の情報をそのまま扱え、
（理想的には）指数関数の困難はない



Optical Lattice, https://www.nist.gov より





（古典コンピュータでの）アプローチ：変分法

例：最低エネルギー状態

$$\mathcal{H}|\Psi_0\rangle = E_0|\Psi_0\rangle$$

コスト関数： $F = \dfrac{\langle\tilde{\Psi}|\mathcal{H}|\tilde{\Psi}\rangle}{\langle\tilde{\Psi}|\tilde{\Psi}\rangle}$

Fの最小値$= E_0$

その時の $|\tilde{\Psi}\rangle = |\Psi_0\rangle$

変分法

- 固有値問題の近似解を得る方法の一つ
- Fの最小値を制限された空間の範囲で探す

$|\tilde{\Psi}\rangle$ の形を仮定する＝**試行関数、変分波動関数**

- 良い試行関数→高精度の最低エネルギー
- 複雑な試行関数→コスト関数の計算量が増大

テンソルネットワークによる効率的な試行関数

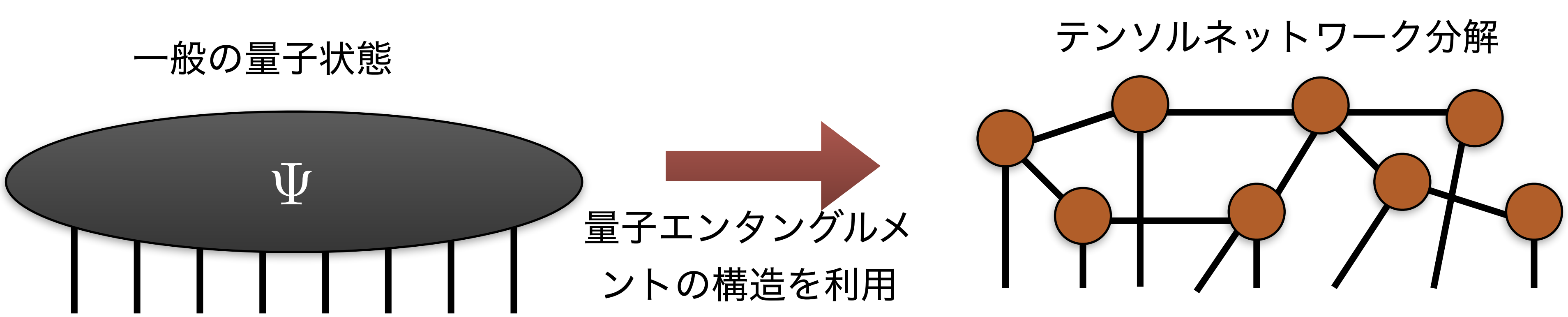
テンソルネットワークによる情報圧縮

指数関数的に大きな状態空間を全て扱うことは不可能

実効的な次元を減らしたい

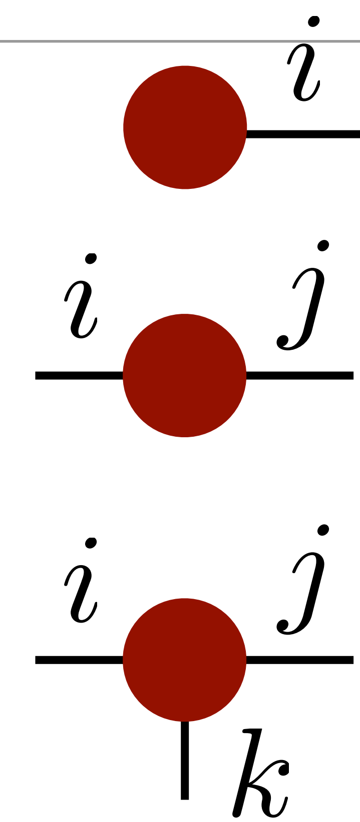
テンソルネットワーク状態：

情報のエンタングルメントに注目することで、
適切な部分空間を構成



ダイアグラムを用いたテンソル表記

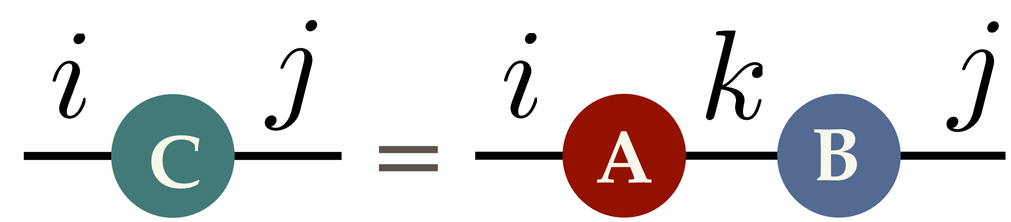
- ベクトル　$\vec{v} : v_i$
- 行列　$M : M_{i,j}$
- テンソル　$T : T_{i,j,k}$



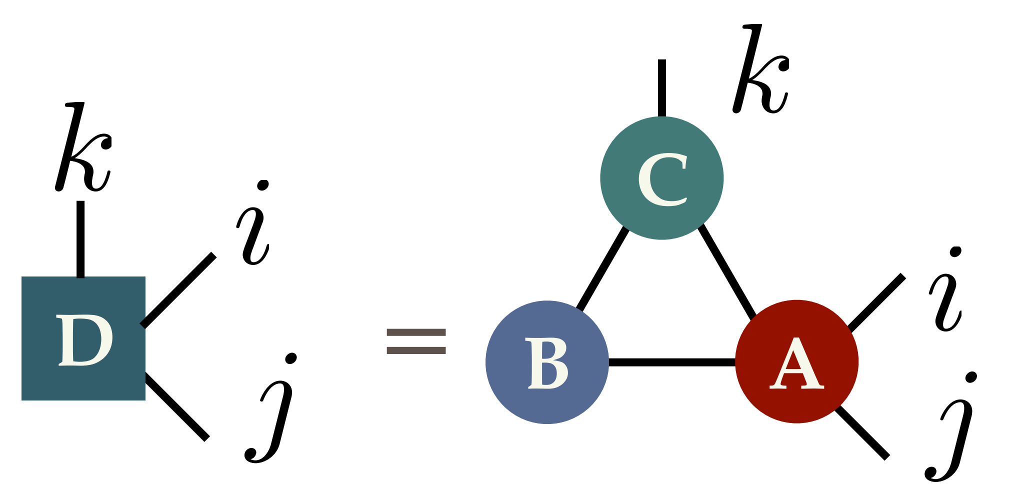
＊n階のテンソル＝n本の足

テンソルの積（縮約）の表現

$$C_{i,j} = (AB)_{i,j} = \sum_k A_{i,k} B_{k,j}$$



$$D_{i,j,k} = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} A_{i,j,\alpha,\beta} B_{\beta,\gamma} C_{\gamma,k,\alpha}$$



量子多体状態のテンソルネットワーク表現

量子多体状態： $\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1,i_2,\ldots i_N\}} \underline{\Psi_{i_1 i_2 \ldots i_N}}\, \underline{|i_1 i_2 \ldots i_N\rangle}$$

基底

量子スピン・bit： $i = \uparrow, \downarrow = |0\rangle, |1\rangle$

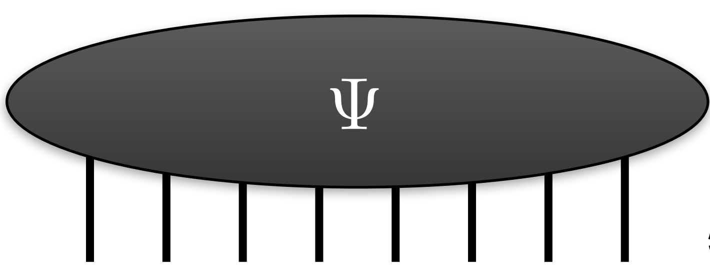
$|010100\cdots 0\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle \otimes \cdots$

量子化学：

i = 原子軌道・分子軌道の占有数

係数はテンソル

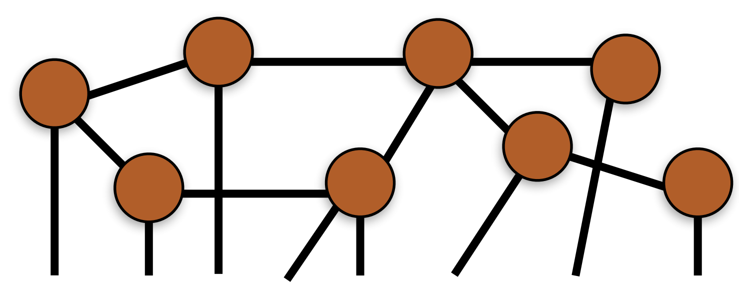
量子多体状態



~e^Nの独立要素

量子相関の
特徴を利用した近似

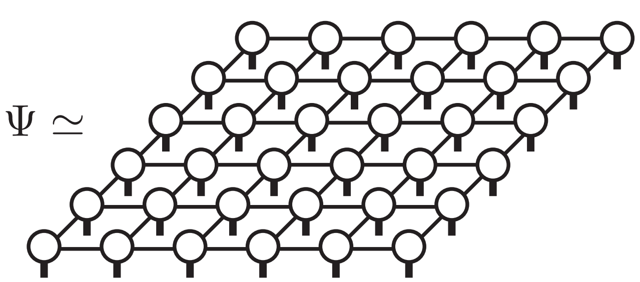
テンソルネットワーク分解



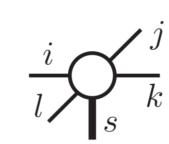
~$O(N)$の独立要素

PEPS, TPS (for 2d system)

$\Psi \simeq$



$T_{ijkl}[s] =$



良いネットワークを選ぶことで、量子多体状態を効率的に表現できる

ex. $\boxed{\text{TPS: 独立な要素数~ } ND^4}$ 　*D*: テンソルTの各足の大きさ

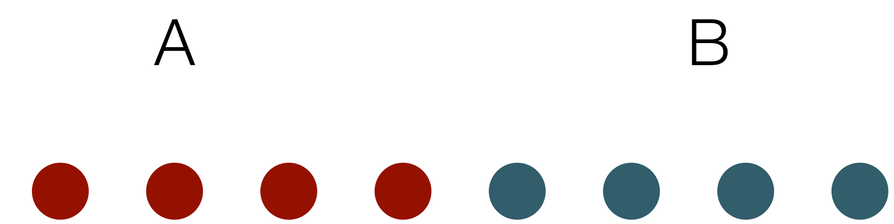
指数関数→線形

良いネットワークの選び方：
エンタングルメントエントロピーの面積則

エンタングルメントエントロピー（**EE**）：

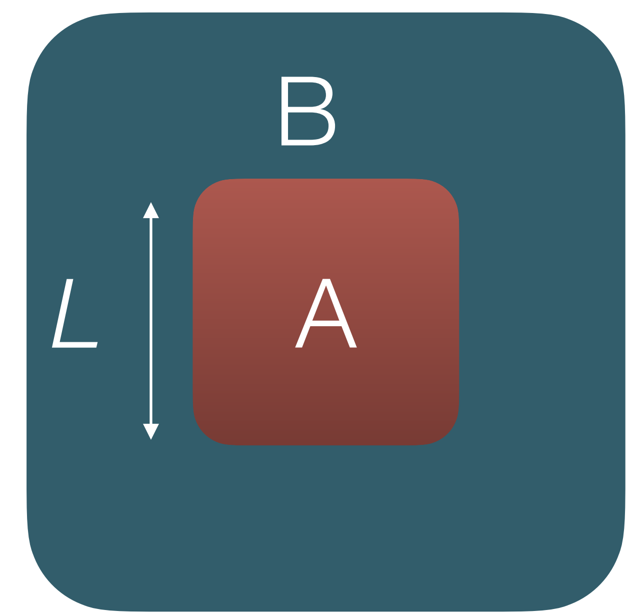
部分系の縮約密度行列:

$$\rho_A = \mathrm{Tr}_B |\Psi\rangle\langle\Psi|$$



EE= ρ_A のvon Neumann エントロピー

$$S = -\mathrm{Tr}\left(\rho_A \log \rho_A\right)$$



一般の状態ベクトル：

EE は 部分系の体積（スピン数）に比例

$$S = -\mathrm{Tr}\left(\rho_A \log \rho_A\right) \propto L^d$$

（c.f. ランダムベクトル）

基底状態ベクトル：

多くの低エネルギー状態では, EE は面積に比例

J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio, Rev. Mod. Phys, 277, **82** (2010)

$$S = -\mathrm{Tr}\left(\rho_A \log \rho_A\right) \propto L^{d-1}$$

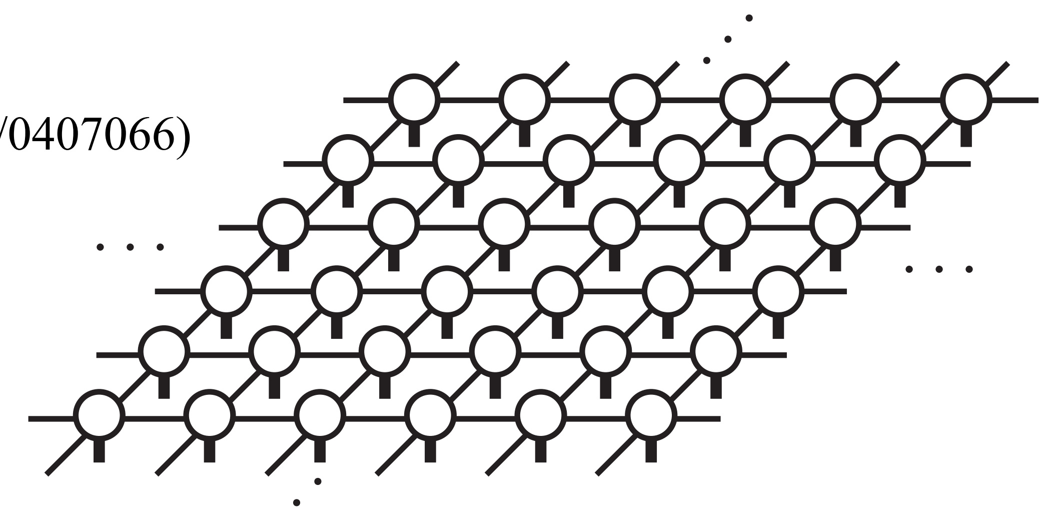
基底状態はヒルベルト空間の狭い部分空間で表現可能

テンソル積状態（TPS）：面積則を満たすTNS

TPS (Tensor Product State) (AKLT, T. Nishino, K. Okunishi, …)

PEPS (Projected Entangled-Pair State)

(F. Verstraete and J. Cirac, arXiv:cond-mat/0407066)

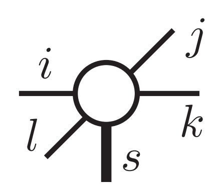


例：2次元正方格子のTPS

4+1 階のテンソルが敷き詰められたネットワーク

局所自由度：*s*

Virtual自由度：*i, j, k, l*

$T_{ijkl}[s] =$ 

各インデックスの次元＝**ボンド次元（*D*）**

変分波動関数としての精度に関係するパラメタ **（*D*→∞で厳密に）**

TPSを変分波動関数とする変分法

- 面積則を満たすため、有限Dでも精度の良い近似
  - 無限系も直接、有限のDで計算できる：iTPS
- テンソルネットワークのみを仮定した、バイアスの少ない変分波動関数
  - ボンド次元の増大により、系統的に精度を改善できる

テンソルネットワークの他の例1：量子回路

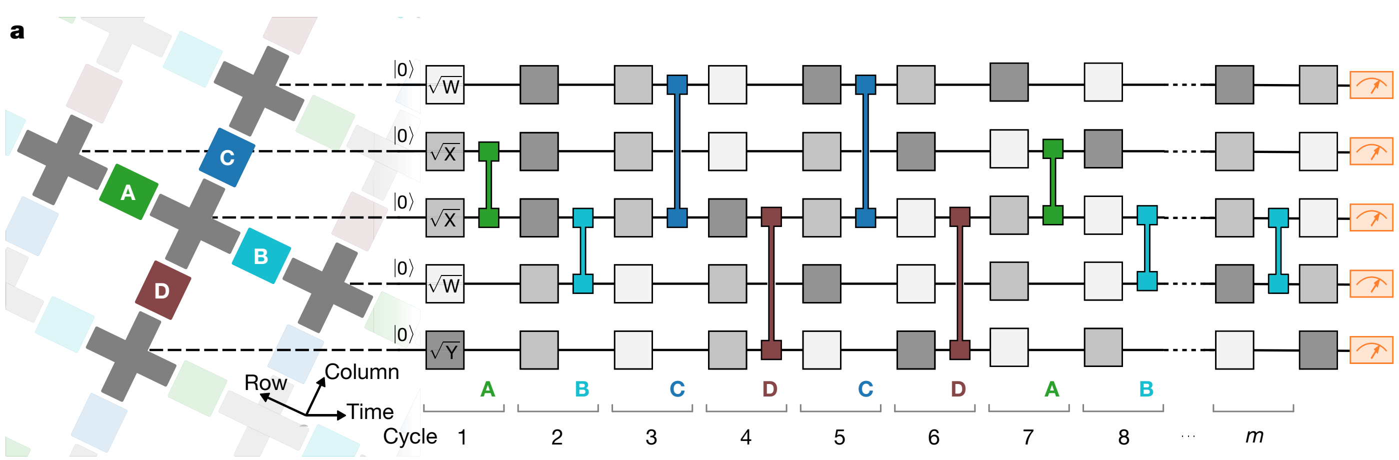
量子回路：

量子ビットに演算する**ゲート操作**の回路図

2次元のベクトル。
適当な基底、（$|0\rangle, |1\rangle$）で
表現すると2次元の複素ベクトル

適当な基底の元では、ユニタリ
行列（or "テンソル"）

googleの"量子超越" 回路　F. Arute, *et al.*, Nature 574, 505 (2019)



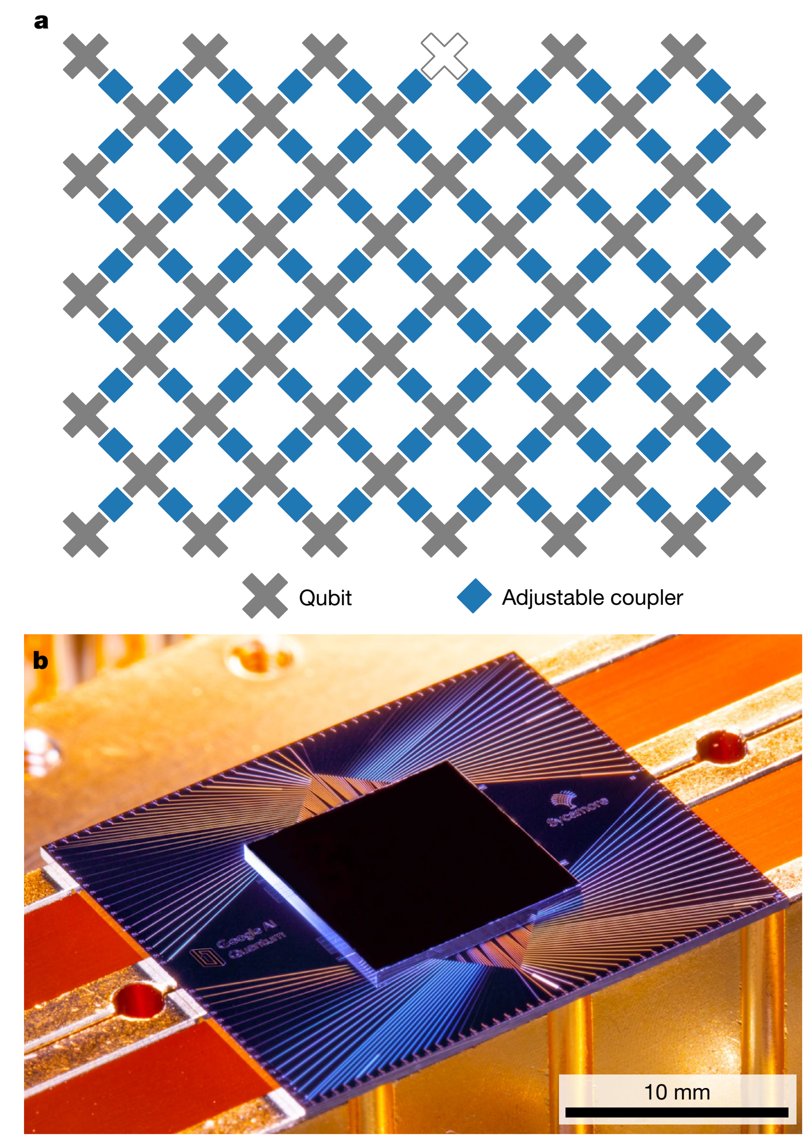
量子回路=テンソルネットワーク

量子コンピュータの古典シミュレーション
＝テンソルネットワークの縮約

cf. 永井さん

googleの"量子超越" 回路

F. Arute, *et al.*, Nature 574, 505 (2019)

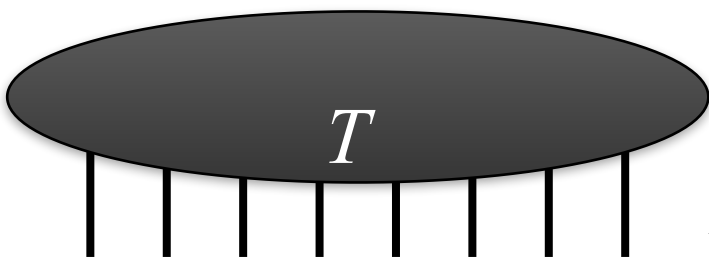


テンソルネットワークの他の例2：テンソル型データ

任意のテンソル型データ

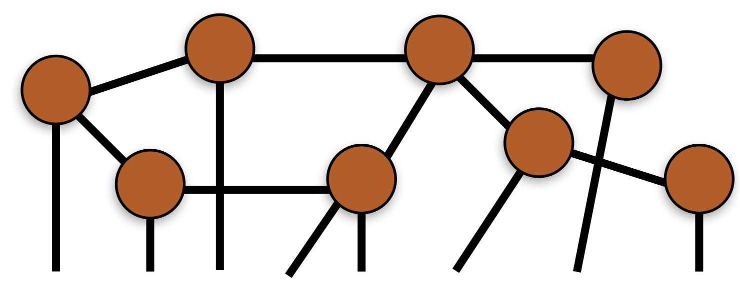
$T_{i_1,i_2,\ldots,i_N}$ ：量子多体状態と同様にして分解可能

テンソル型データ



情報の相関構造の
特徴を利用した近似

テンソルネットワーク分解

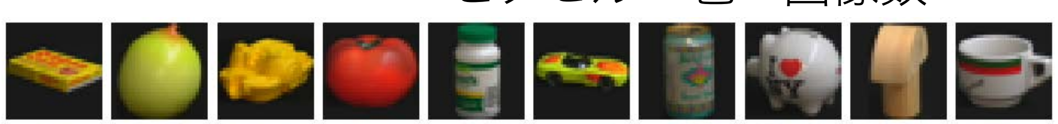


cf. 原田さん

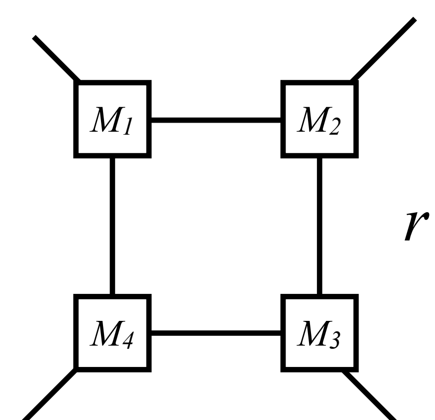
例1：画像データセット
(Q. Zhao, et al arXiv:1606.05535)

COIL-100 dataset = <u>32 x 32</u> x <u>3</u> x <u>7200</u> テンソル

ピクセル　色　画像数



テンソルリング分解

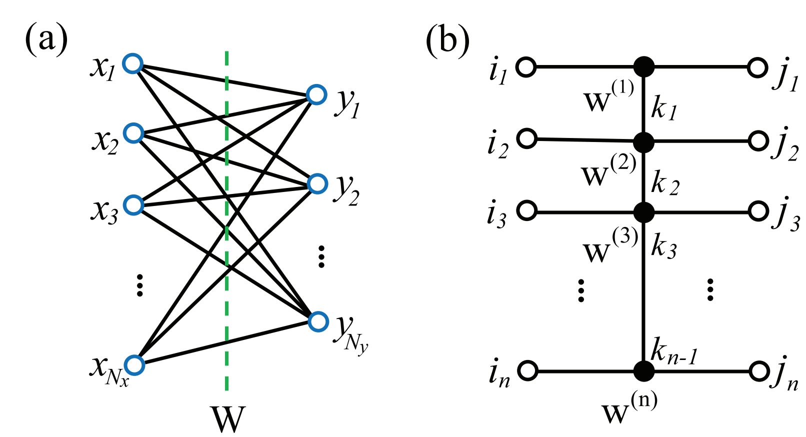


例２：ニューラルネットワークの重み行列
(Z.-F. Gao et al, Phys. Rev. Research **2**, 023300 (2020).)

x_i: input neuron (pixel)

y_i: output neuron

W_{ij}: weight matrix connecting x and y



テンソルネットワークの量子多体問題への応用

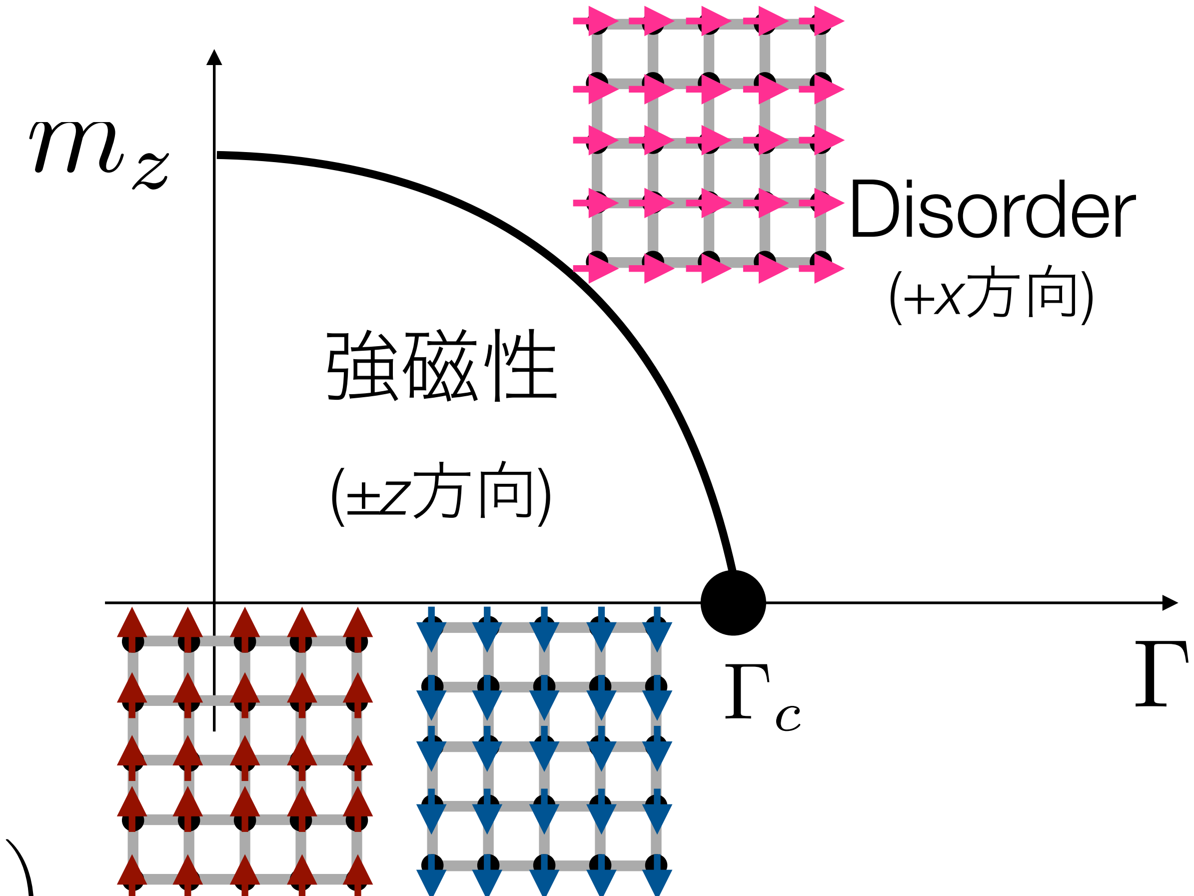
（量子）スピン模型と典型的な（基底状態）相図

例：横磁場イジングモデル

$$\mathcal{H} = -\sum_{i=1}^{L-1} S_{i,z}S_{i+1,z} - \Gamma\sum_{i=1}^{L} S_{i,x}$$

$S=\frac{1}{2}$　量子スピンの行列表示

$$S_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, S_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}, S_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$



通常、量子スピン系の基底状態は（磁気的な）長距離秩序を持つ:

・自発的対称性の破れ

・外部磁場の効果

量子スピン液体

（量子）スピン系の相互作用にフラストレーションがあると:

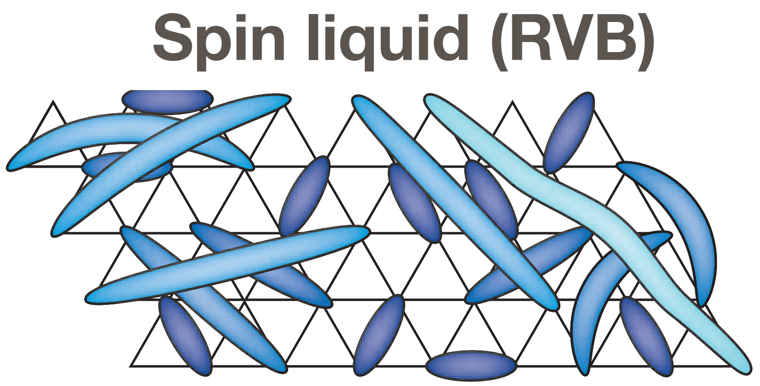
場合によっては、基底状態が長距離秩序を持たない

量子スピン液体

平均場描像に基づく、スピン液体状態が数多く存在

- Gapped spin liquid
  - Z_2 spin liquid
  - Chiral spin liquid
  - ...
- Gapless spin liquid
  - U(1) spin liquids
  -

(L. Balents, Nature (2010))



稀な例：可解模型

基底状態がスピン液体であることが分かっている最も有名な例

（ハニカム格子）キタエフ模型

ハニカム格子キタエフ模型

A. Kitaev, Annals of Physics **321**, 2 (2006)

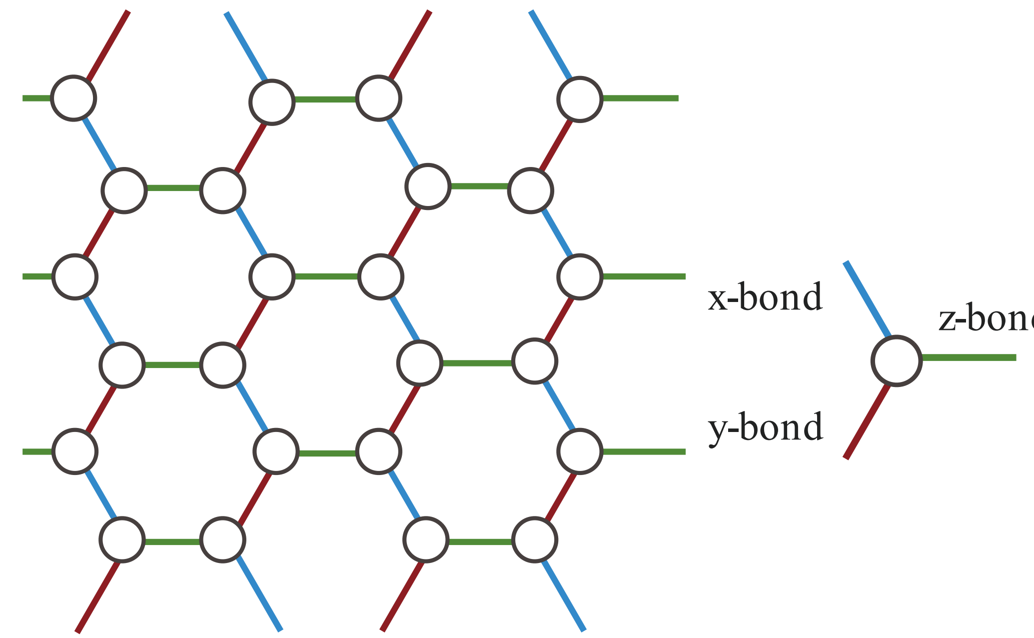
キタエフ模型

$$\mathcal{H} = -\sum_{\gamma,\langle i,j\rangle_\gamma} J_\gamma S_i^\gamma S_j^\gamma$$

γ: 相互作用の方向

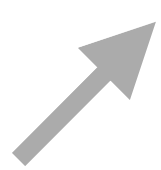
相互作用の方向に応じて、異なるスピン成分がイジング型に相互作用

ハニカム格子



この模型は「マヨラナフェルミ粒子」を用いて、自由粒子の問題に変換可能

Spin



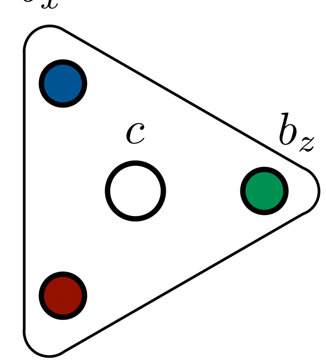
$\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$

$2S^\gamma = \sigma^\gamma = ib^\gamma c$

Majorana fermions:

$$\boxed{\begin{gathered}(b^\gamma)^\dagger = b^\gamma \\ c^\dagger = c\end{gathered}}$$

Four Majorana fermions

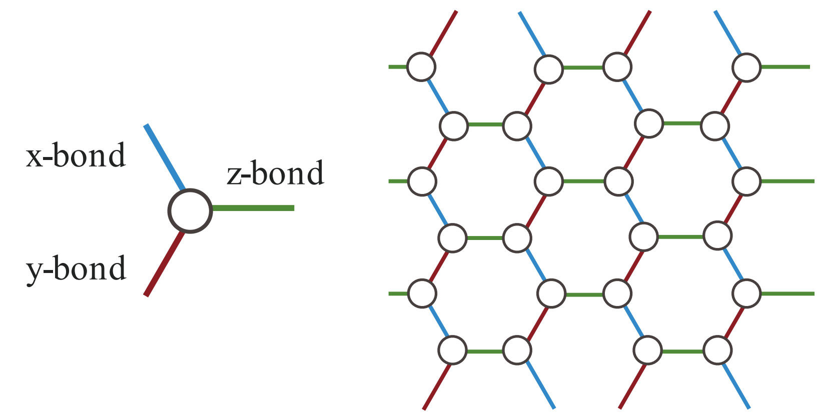


キタエフ模型の基底状態

キタエフ模型　A. Kitaev, Annals of Physics **321**, 2 (2006)

$$\mathcal{H} = -\sum_{\gamma,\langle i,j\rangle_\gamma} J_\gamma S_i^\gamma S_j^\gamma$$

γ : ボンドの方向



２つのスピン液体

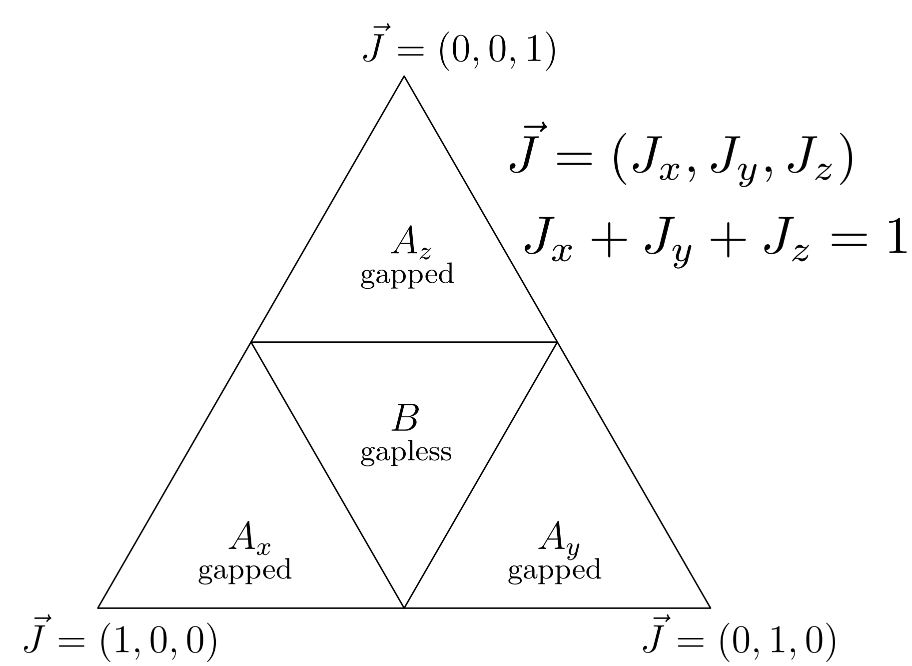
非等方領域 (A) : gapped spin liquid

- 基底状態と励起状態に有限のエネルギーギャップ
- 量子誤り訂正に使われるtoric code状態と"同じ"状態
- Toric codeには**コンパクトなTN表現が存在**

等方領域(B) : gapless spin liquid

- 励起エネルギーにエネルギーギャップがない
- 磁場の印加でトポロジカル相が実現
- **コンパクトなTN表現が未知（だった）**

基底状態相図



キタエフ物質とテンソルネットワークでの計算例

T. Okubo, K. Shinjo, Y. Yamaji et al, Phys. Rev. B **96**, 054434 (2017).

強いスピン軌道相互作用 → 実際の物質でキタエフ相互作用が実現

G.Jackeli, et al., PRL 102, 017205 (2009)

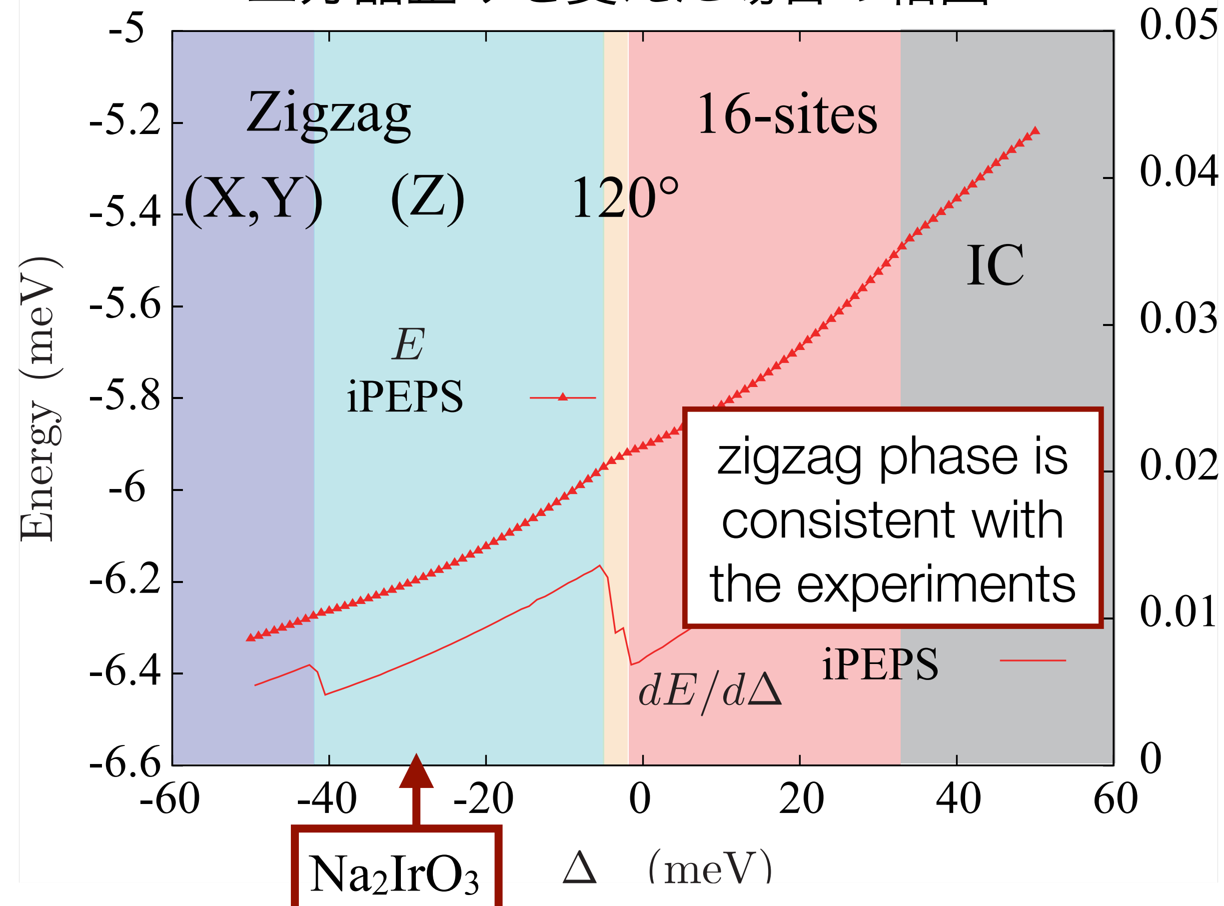
Na_2IrO_3の第一原理スピンハミルトニアン

(Y. Yamaji et al. Phys. Rev. Lett. **113**, 107201(2014))

Kitaev + Heisenberg + Off-diagonal interactions
+
2nd and 3rd nearest neighbor interactions

→ この物質の基底状態をiTPSを使って明らかに

三方晶歪みを変えた場合の相図



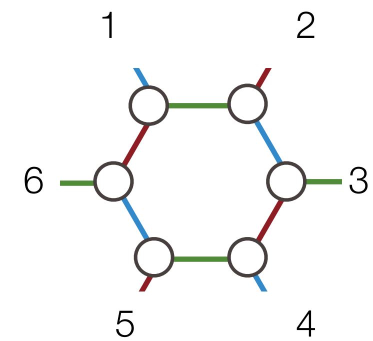
- キタエフ相互作用以外の相互作用の影響で、基底状態はスピン液体ではなく磁気秩序状態
- その場合、iTPSでの計算は、第一原理ハミルトニアンの基底状態を正しく実現できる

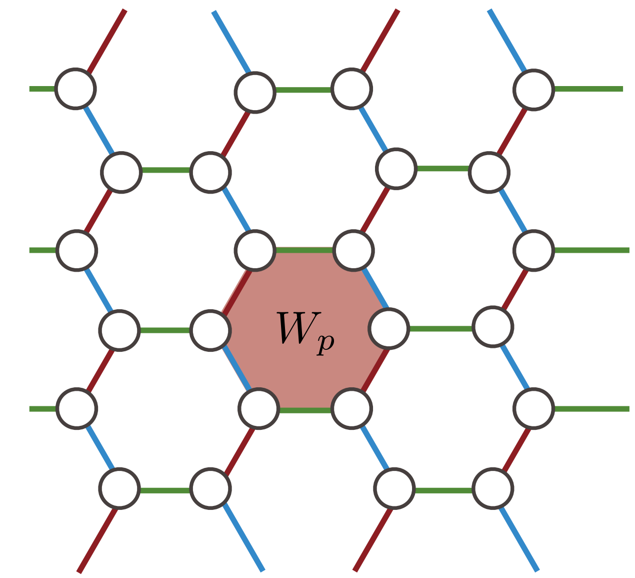
キタエフ模型の保存量とテンソルネットワーク

フラックス演算子： $W_p = \sigma_1^x \sigma_2^y \sigma_3^z \sigma_4^x \sigma_5^y \sigma_6^z$

- 固有値は±1
- ハミルトニアンと可換＝保存量
- 異なる場所のフラックスも可換

$$[\mathcal{H}, W_p] = 0, [W_p, W_{p'}] = 0$$





$\boxed{\text{⭐キタエフスピン液体は、全ての六角形でフラックスが1}}$

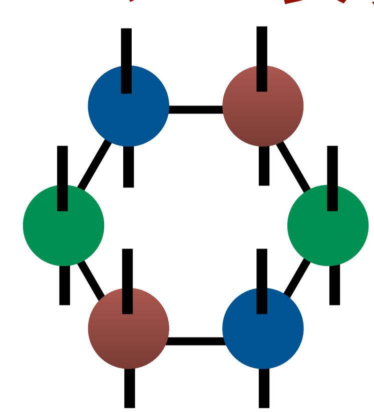
"Vortex free"

$W_i = 1$への射影演算子？：
$$\boxed{P_{i,+} = \frac{I + W_i}{2}}$$

この演算子は *D=2* のテンソルネットワークで表現できる

$$P_{i,+} = \mathrm{Tr}\ (O_1^x O_2^y O_3^z O_4^x O_5^y O_6^z)$$

$$O_i^\alpha = \frac{1}{2^{1/6}} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & \sigma_i^\alpha \end{pmatrix}$$



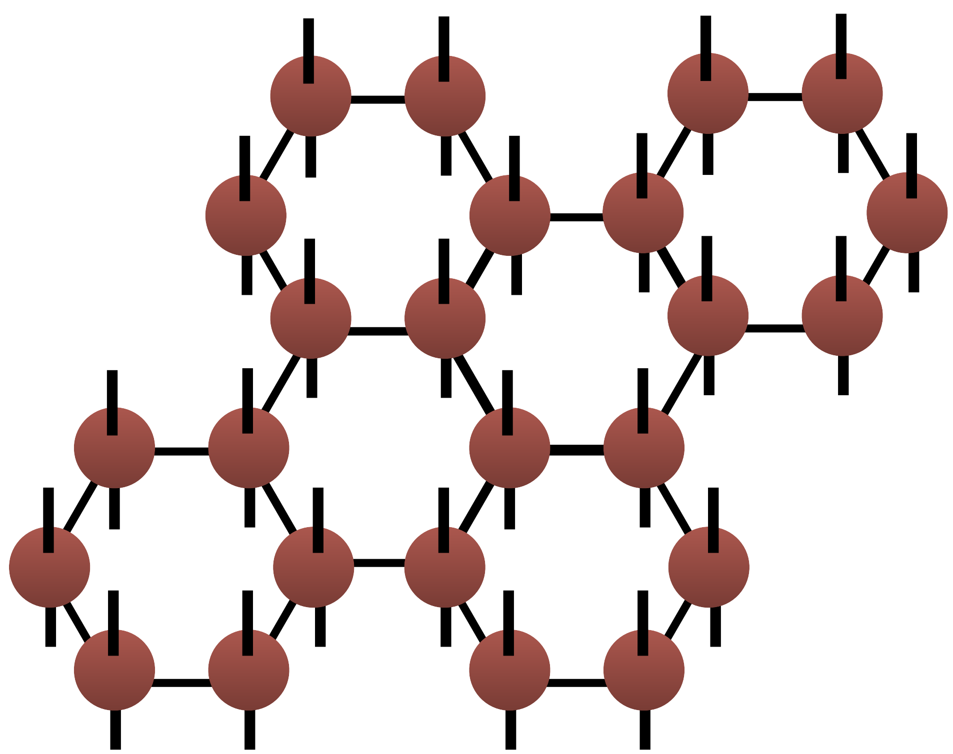
Vortex free への射影演算子

H.-Y. Lee, R. Kanako, T.O. and N. Kawashima, PRL **123**, 087203 (2019)

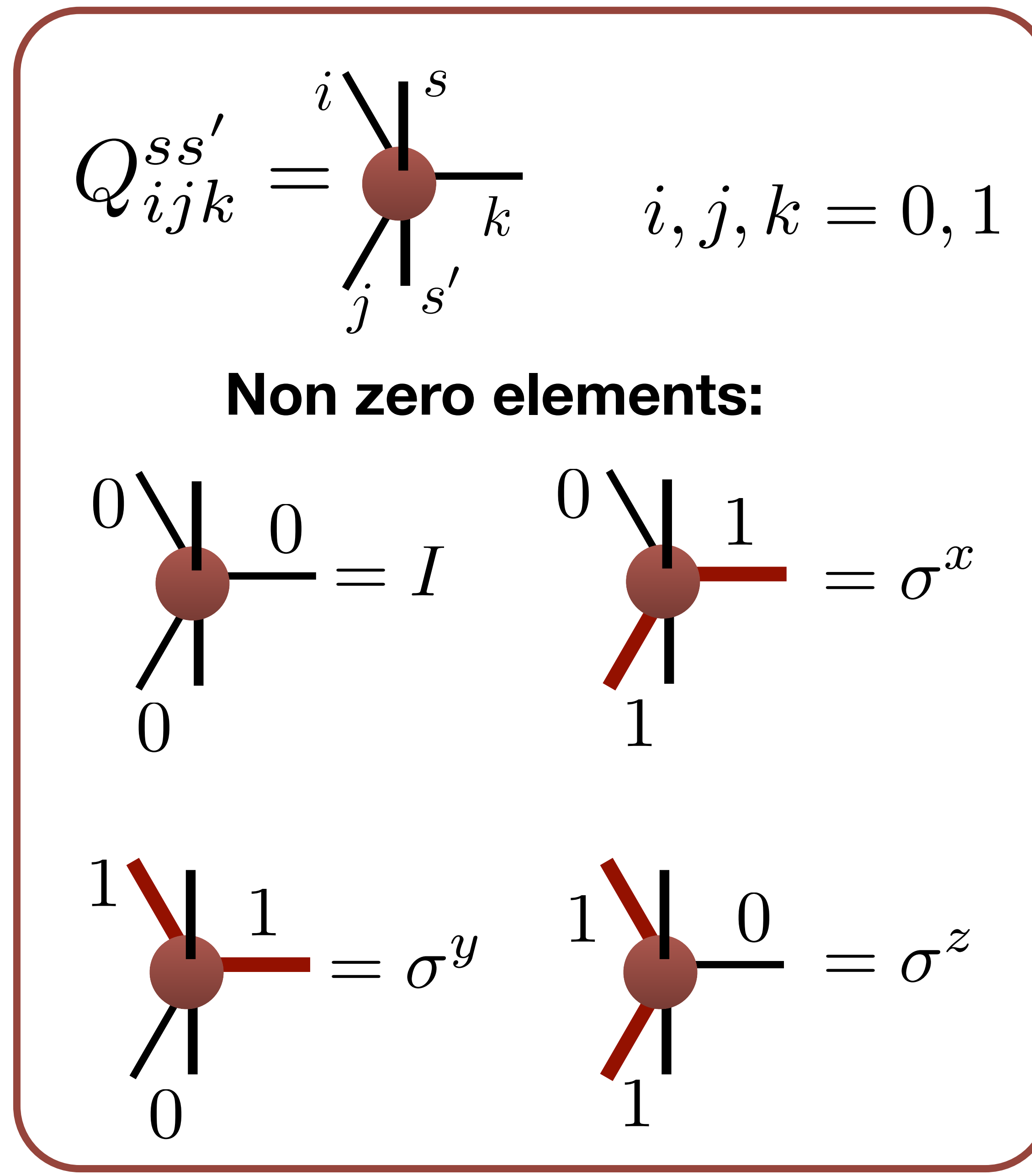
Vortex free 状態への射影演算子： $P = \prod_p \frac{I + W_p}{2}$

➡ "loop gas" 演算子で記述できる

$P \propto$



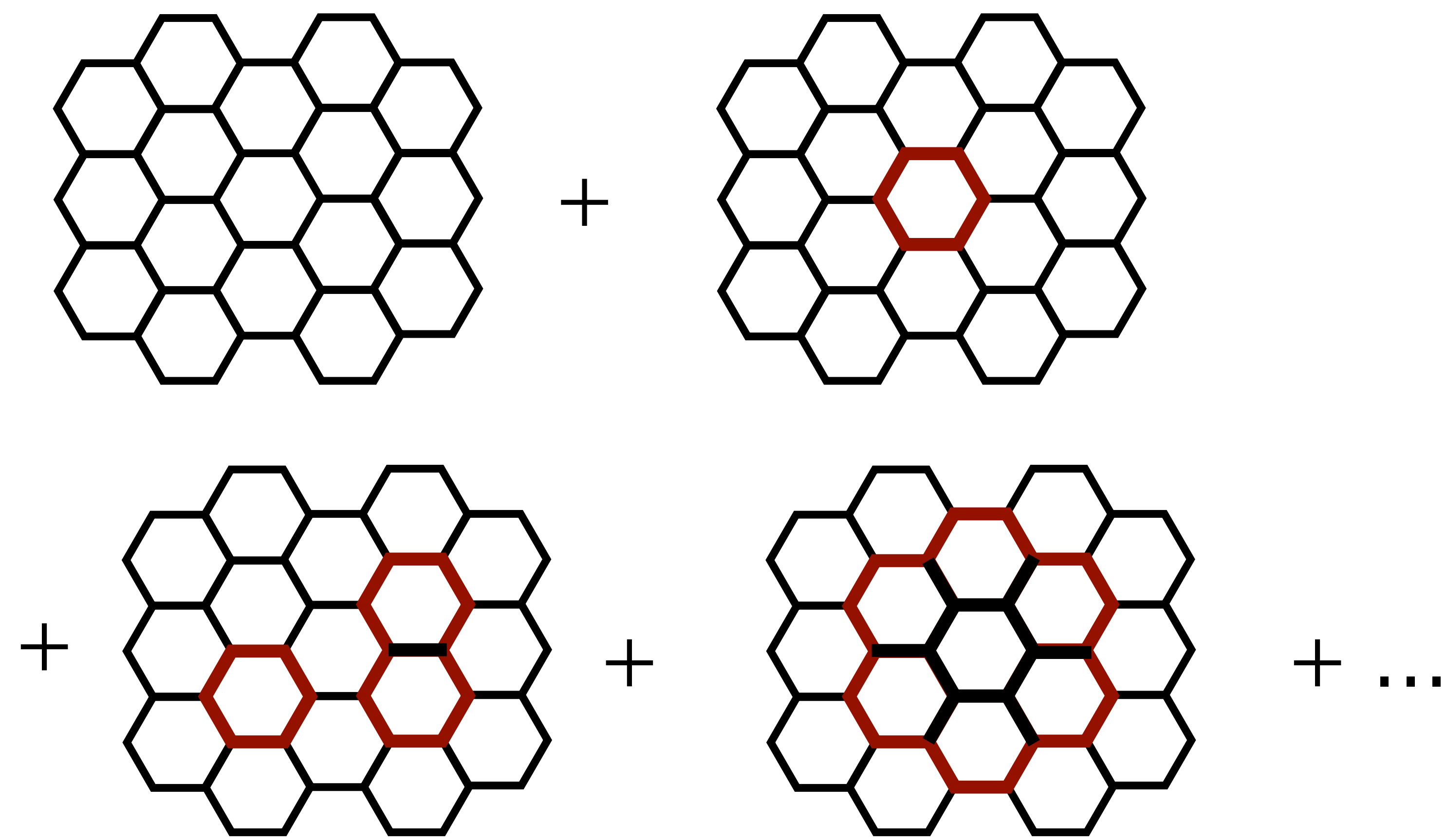
(D=2, TPO)

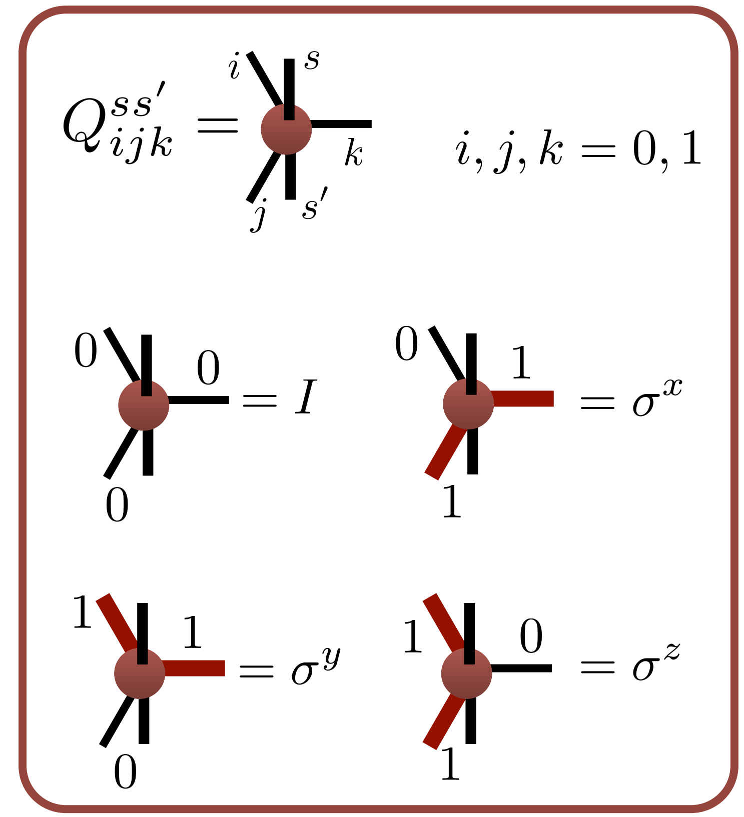


演算子のループ構造

H.-Y. Lee, R. Kanako, T.O. and N. Kawashima, PRL **123**, 087203 (2019)

$\mathrm{tTr}\prod Q =$



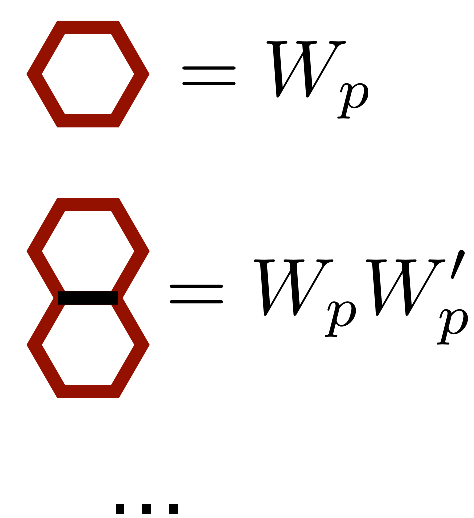


全ての閉じたループの和！

$$= \prod_p (I + W_p) \;\; = N_G P$$

$N_G = 2^{N_p}$:# of graphs

注:



Loop gas state (LGS) : ほぼキタエフスピン液体

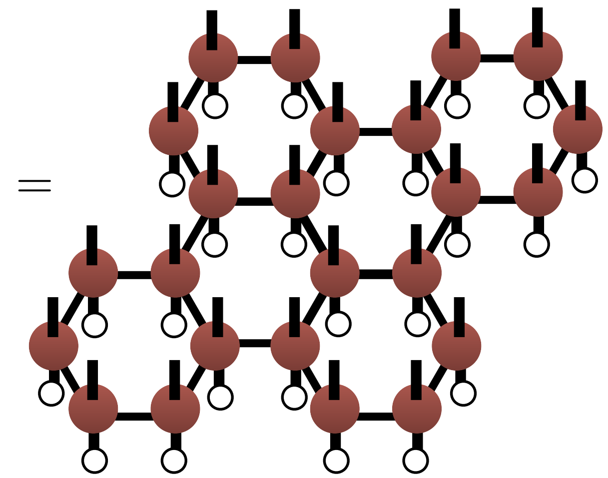
H.-Y. Lee, R. Kanako, T.O. and N. Kawashima, PRL **123**, 087203 (2019)

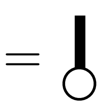
等方的なキタエフ模型に対応する単純なvortex free状態

$$|\mathrm{LGS}\rangle = \hat{Q}_{LG} \underline{\prod_i \otimes |111\rangle_i}$$

(1,1,1) 方向に揃った強磁性状態

$|\mathrm{LGS}\rangle =$



D=2, iTPS　$|111\rangle =$ 

$$\langle 111|\sigma^\gamma|111\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

対称性：

Q と |111>の対称性よりLGSは

- 格子の並進
- C_6 格子の回転（+ スピン回転）
- 反転＋時間反転

に関して対称

磁性：

Vortex free 条件により、LGS は必ず非磁性

臨界性：

波動関数の内積＝2d イジングの臨界普遍性を持つ分配関数と一致

LGSはキタエフスピン液体定性的に同じ状態！

局所励起による系統的な改善

n次のstring gas state (SGS)

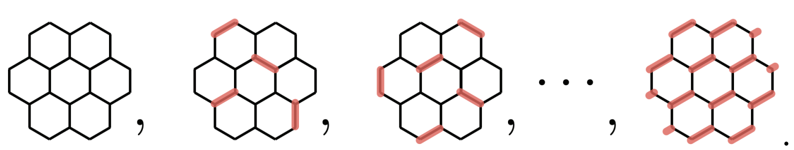
H.-Y. Lee, R. Kanako, T.O. and N. Kawashima, PRL **123**, 087203 (2019)

$$|\psi_n\rangle = \left[\prod_i^n \hat{R}_{DG}(\phi_i)\right]|\mathrm{LGS}\rangle$$

$\{\phi_i\}$: 変分パラメタ

- $|\psi_n\rangle$ は $D = 2^n$ iTPS.

$\hat{R}_{DG}$ は"局所" 励起を導入する



	$\lvert\psi_0\rangle = \lvert\mathrm{LGS}\rangle$	$\lvert\psi_1\rangle$	$\lvert\psi_2\rangle$	Exact
D	2	4	8	
# of	0	1	2	
E/J	-0.16349	-0.19643	-0.19681	-0.19682
$\Delta E/E_{ex}$	0.17	0.02	0.0007	-

たった二つの変分パラメタで、非常に精密なエネルギーを得ることができる。

- 重要な長距離のエンタングルメントは（単純な）テンソルネットワークで表現できる。
- 短距離の相関を考えることでエネルギーは大幅に改善される。

量子コンピュータによる量子多体問題への
アプローチ法へのヒント？

量子コンピュータへの展開

近未来の量子コンピュータ

数百ビットの量子コンピュータ

➡ 古典計算機では達成できない精度で、量子多体問題が解ける可能性

近い将来に実現： 誤り訂正のない（ゲート型）量子コンピュータ

NISQ: Noisy Intermediate-Scale Quantum computer

- 計算結果に（様々な）ノイズが含まれる
- 演算回数（量子ゲートの適用回数）に制限

➡ 量子多体問題への応用法の一つ：

VQE: Variational Quantum Eigen solver

(A. Peruzzo, et al, Nature Communications, vol.5, 4213 (2014).)

- 量子回路で試行関数を構成
  - ＊NISQデバイスでも可能な"深さ"の量子回路
- コスト関数（やその微分）を（項毎に）NISQデバイスで計算
  - 多数の試行でノイズ付きの期待値を得る
- 量子回路のパラメタを古典計算機での計算に従い最適化

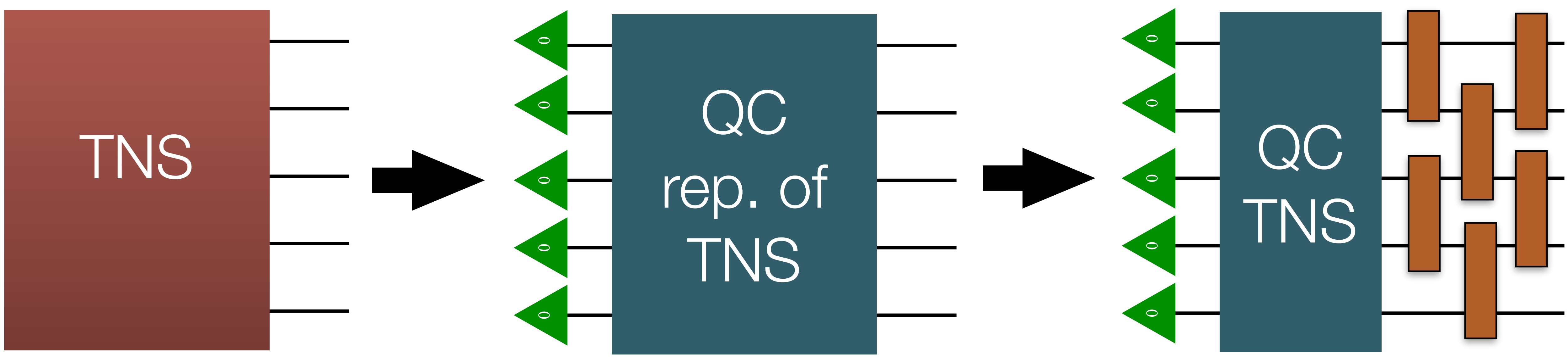
テンソルネットワークを活用したVQE

テンソルネットワークからの知見

- 重要な長距離のエンタングルメントは（単純な）テンソルネットワークで表現できる。
- 短距離の相関を考えることでエネルギーは大幅に改善される。

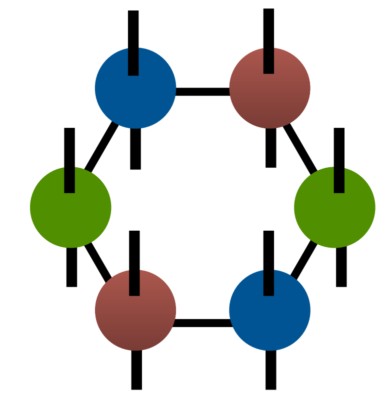
VQE用の量子回路構成の指針

1. 長距離のエンタングルメントはテンソルネットワークから量子回路に輸入
   - テンソルネットワーク状態を量子回路に変換
2. 短距離相関に相当する回路を追加し、NISQを用いたVQEで追加部を最適化
   - 短距離部分のみの最適化であれば、NISQでも最適化可能？



LGS の量子回路表現

Flux1つの射影演算子：



$$P_{i,+} = \mathrm{Tr}\ \left(O_1^x O_2^y O_3^z O_4^x O_5^y O_6^z\right)$$

$$O_i^\alpha = \frac{1}{2^{1/6}} \underline{\begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & \sigma_i^\alpha \end{pmatrix}}$$

spin と virtual leg
に作用する行列

：このテンソルは"行列"
としてみると<u>ユニタリ行列</u>

しかも、コントロール
パウリゲートそのもの

量子ゲートで構成可能！

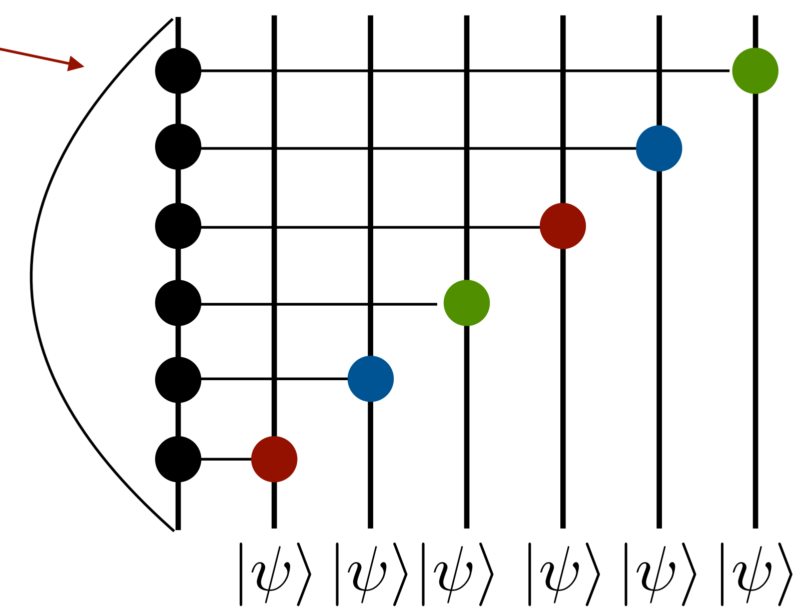
ただし、そのままでは量子回路にはならない...

"ループ" は通常の量子回路では（おそらく）表現できない

→"測定"により、このループを実現することはできる。

cf. T. A. Bespalova, and O. Kyriienko, arXiv:2109.13883

- LGSのために必要な測定の回数はO(N)になるが、NISQの規模だと許容可能？
- 測定の方法を使った場合でも、LGSを用いた方が、上記論文よりはよい性能が出せる（On going）。



まとめ

- 量子多体状態の表現として、テンソルネットワークは非常に効率的
    - 低エネルギー状態の面積則を事前知識として採用
    - 非自明なスピン液体状態もコンパクトに表現可能
- テンソルネットワークの知見を用いることで、NISQ量子コンピュータでの量子多体問題計算を実用的にできる可能性
    - 長距離のエンタングルメントは（古典的な）テンソルネットワークが担う
        - スピン液体のテンソルネットワーク状態は量子回路へ変換可能
    - 短距離の励起を量子回路で表現しNISQで最適化する