

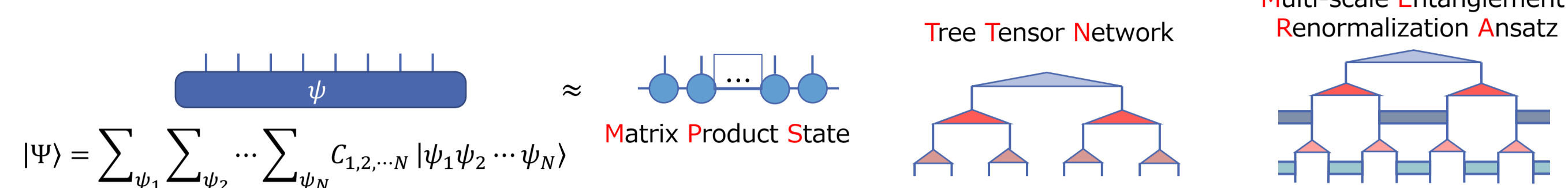
# ランダムスピンの解析における 1次元 Branching MERA 状態の有用性検証と最適化手法の高度化

渡辺 亮<sup>(1)</sup> 藤井啓佑<sup>(1,2,3)</sup> 上田 宏<sup>(2)</sup>

(1) 大阪大学大学院 基礎工学研究科 システム創成専攻 (2) 大阪大学 量子情報・量子生命研究センター  
(3) 理化学研究所 量子コンピューティング研究センター

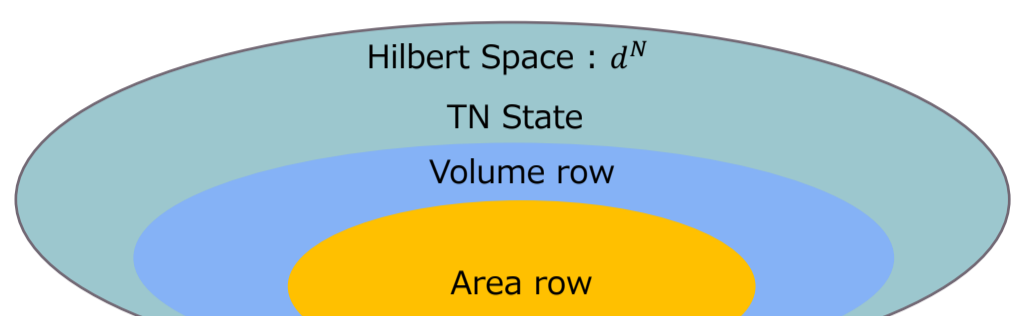
## テンソルネットワーク法による基底状態探索

量子多体系におけるテンソルネットワーク (TN) 状態



実空間一様系の基底状態

- エンタングルメント・エントロピー (EE) の面積則
- MPS: 1次元系の面積則
- MERA: 1D対数補正付面積則、2D以上は面積則



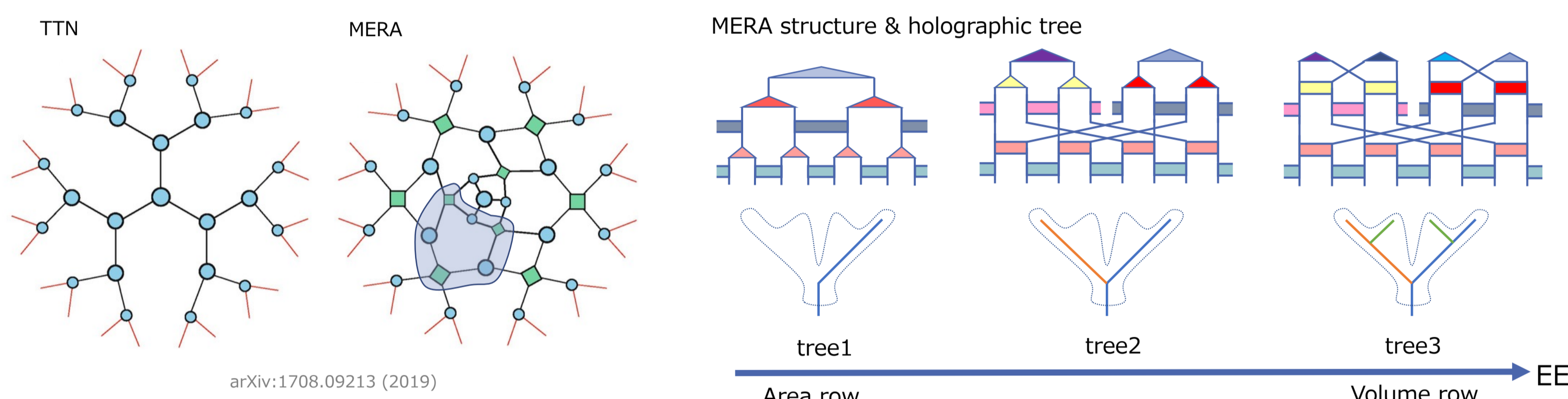
実空間非一様系の基底状態

- エンタングルメント構造が非自明: 一般にEEの面積則は満たさない
- 例) 量子化学系、長距離相互作用系、実時間発展系

実空間非一様系に対するTN状態

- 長距離相関、多体相関を効率的に取り込むことが可能な構造: ループ構造
- ループ構造を含むTN状態の代表例) MERA、Branching MERA

Branching MERA: Isometryを分岐させループ構造を付加 → 段階的な構造変化により面積則から体積則をカバー



## 目的

実空間非一様系解析におけるMERA状態のループ構造追加効果の調査

意義

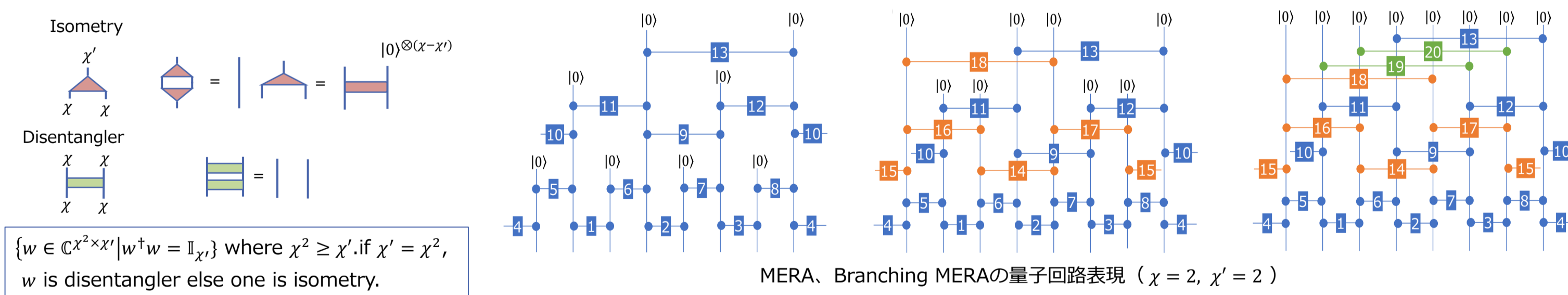
- 非一様系解析に対して適切なTN表現 (Ansatz) を系統的に与えるための指標となる
- TN法に基づく新たな量子-古典ハイブリッド計算プロトコル開発の手がかりとなる

[補足] TN法における計算上の問題点

- MERAを構成するテンソルに並進対称性制約が無い → 全テンソルの縮約計算を行うため大規模化が困難
- MERAからBranching MERAの構造変化によって縮約計算コストが増大

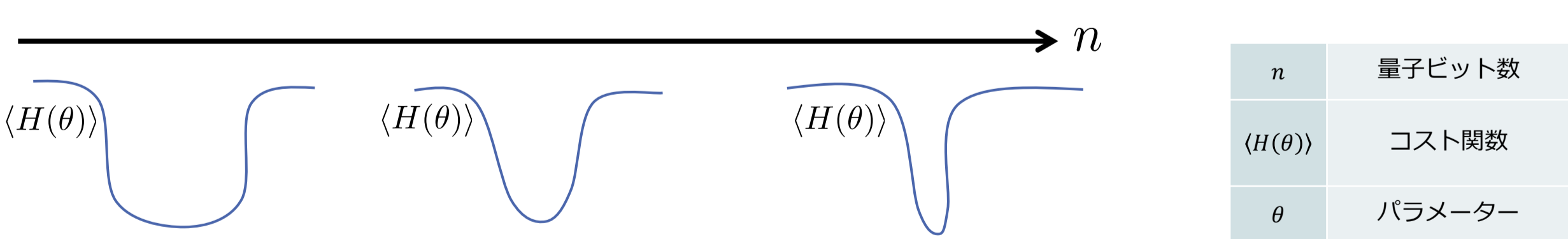
量子回路表現から量子計算機を用いて克服可能

[参考] 局所テンソルの性質



[補足] 既存の変分量子アルゴリズム (VQAs) における問題点

- VQAs: 期待値計算を含む内積計算を量子計算に託し、パラメータ最適化を古典計算によって行う変分法
- Barren plateaus (BP)
- 量子ビット数に対して指数関数的にコスト関数の勾配が消失する現象



特に回路深さが深いランダム回路において顕著に現れる現象

機械学習などの非一様系解析に対する性質の良いAnsatzの提供は難しく、通常ランダム回路を使用  
初期パラメーターの工夫でBPを避けることができる

## Nサイト全結合型ランダムスピンの解析

ハミルトニアン

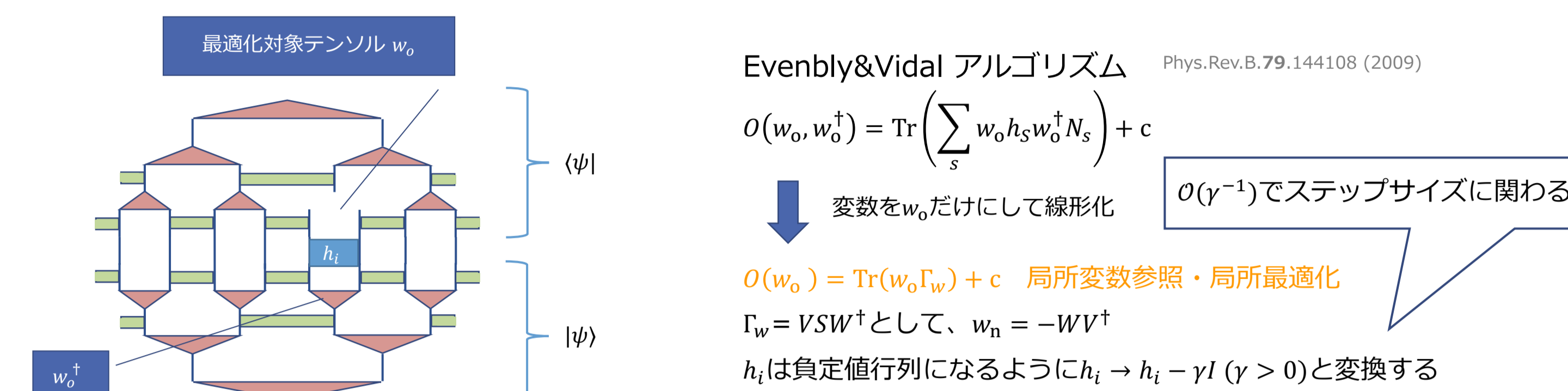
$$H_{\text{Ising}} = \sum_{i<j} J_{ij}^z \hat{z}_i \hat{z}_j + \sum_i h_i^x \hat{x}_i$$

$$H_{\text{XYZ}} = \sum_{i<j} J_{ij}^x \hat{x}_i \hat{x}_j + J_{ij}^y \hat{y}_i \hat{y}_j + J_{ij}^z \hat{z}_i \hat{z}_j$$

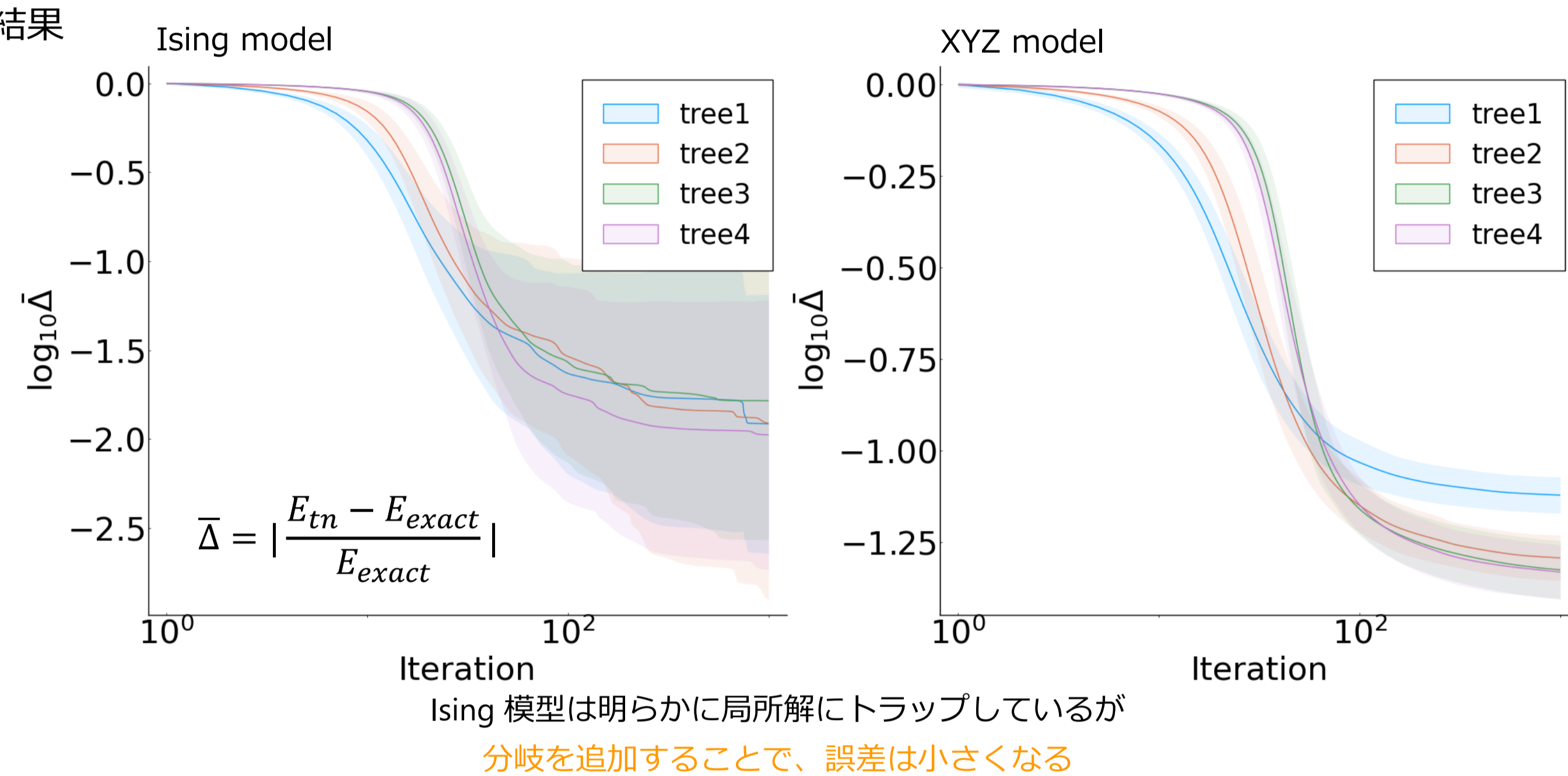
ただし、 $\hat{O}_{N+1} = \hat{O}_1$ .  $J_{ij}^x, J_{ij}^y, J_{ij}^z, h_i^x \in [-1, 1)$  一様分布サンプリング.

数値実験

- 16サイト系の解析
- MERAを構成するテンソルのボンド次元 $\chi, \chi'$ は2に固定
- 段階的な分岐の追加を行いMERAから全分岐Branching MERAまでのエネルギー誤差の変化を観察
- 100サンプリングアンサンブル
- 初期状態は各状態で固定. ハミルトニアン係数はseed = 1~100
- 各テンソルはEvenly&Vidalアルゴリズムで最適化
- MERA最適化iterationは1000回. 1回のMERA最適化過程で各テンソルは1度だけ最適化



結果

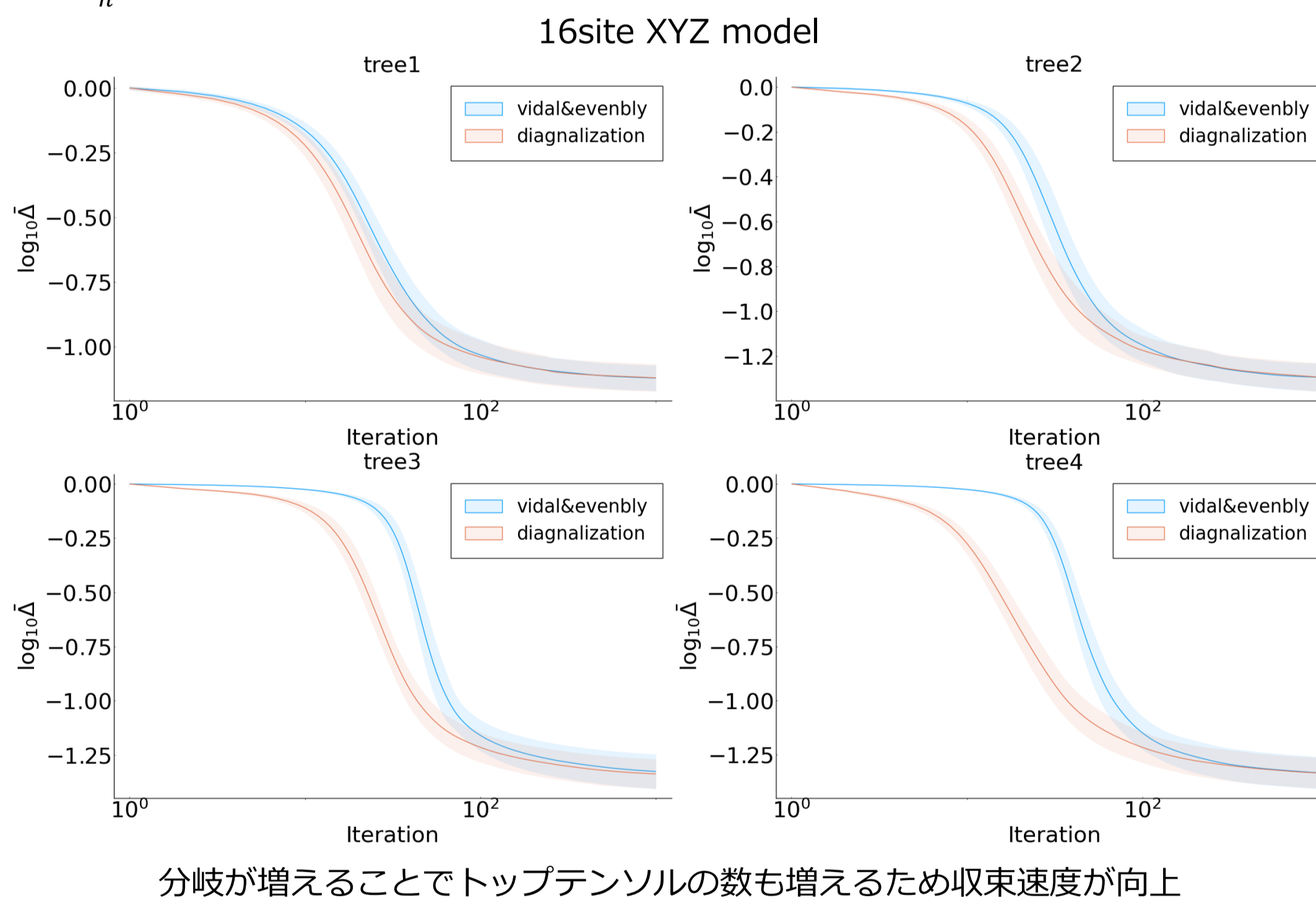
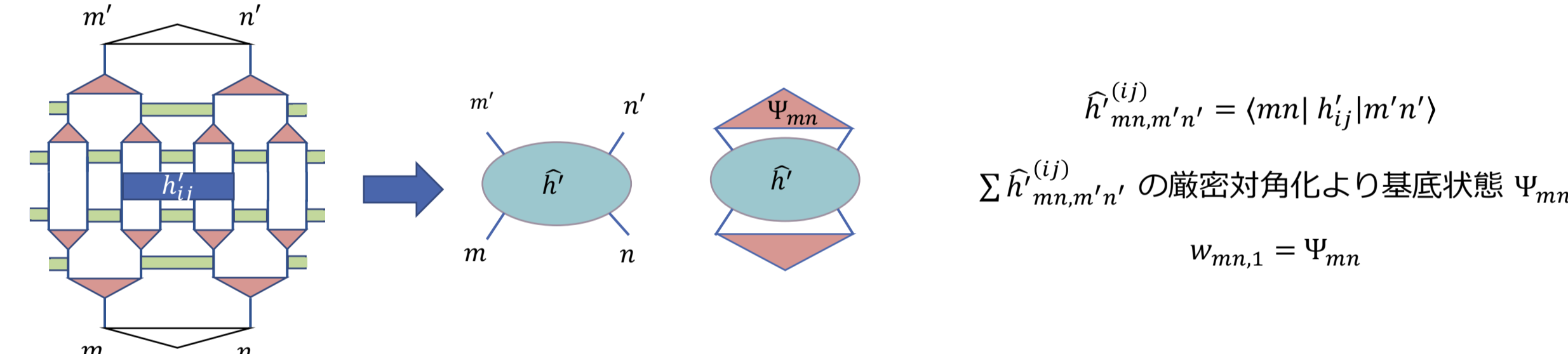


## MERA最適化の改良

トップテンソルの2次形式対角化

トップテンソルに関しては二次形式対角化により直接最小固有ベクトルを導出可能

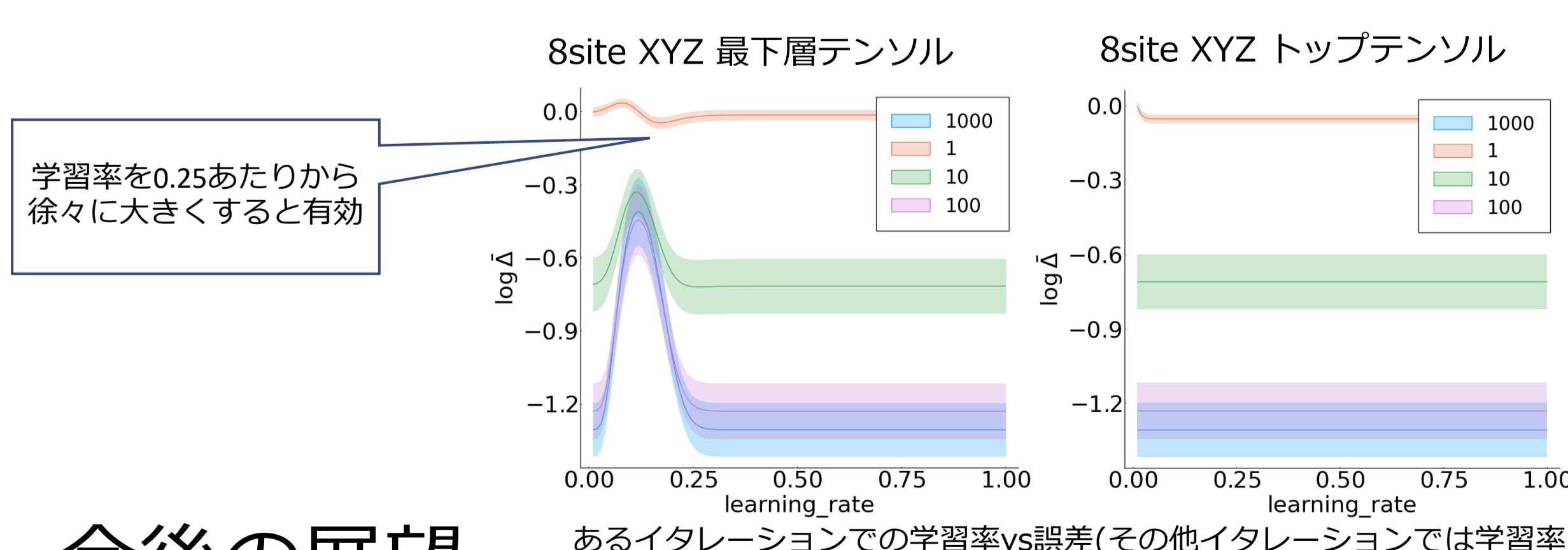
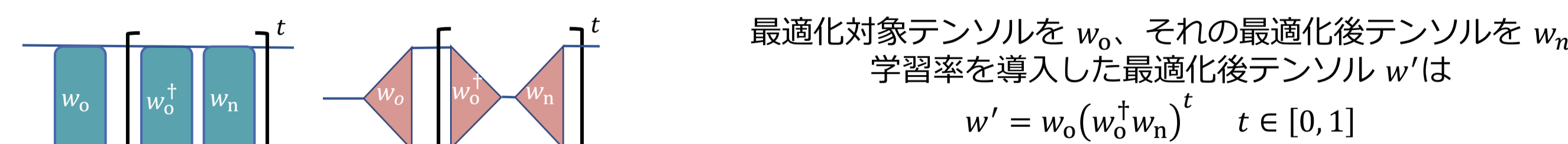
局所変数参照、局所変数空間内の (線形化しない) 大域的最適化



学習率の導入 arXiv:2209.00595 (2022)

Evenly&Vidalアルゴリズム → 局所変数参照 最良選択的アルゴリズム  
トップテンソル2次対角化

学習率の導入によって緩やかな更新を促す



## 今後の展望

MERA最適化の高度化

前処理付き最適化・多様体最適化の高速化 SciPost Phys., 10, 040. (2021)

問題に依存したTN状態を提供するための構造最適化

- 局所構造の組み換えによる最適構造探索

