テンソルネットワークで繋ぐ異分野連携

松枝宏明 〈仙台高等専門学校総合工学科 matsueda@sendai-nct.ac.jp〉

はじめに

筆者が東北大学に入学したのが1993年（平成5年）であるから，平成の時代は，変化の激しい研究の最前線に触れ色々なことを学んだ非常に貴重な期間であった．この30年間の研究トレンドで特に影響を受けたのは，強相関電子系，密度行列くりこみ群法（Density Matrix Renormalization Group, DMRG）（1993年），[1] そしてAdS/CFT対応（Anti de Sitter space/Conformal Field Theory correspondence）（1997年）である．DMRGは特異値分解やエンタングルメントをはじめとして，情報理論的視点から物性研究を推進するきっかけとなった極めて重要な研究分野である．AdS/CFT対応は超弦理論におけるホログラフィー原理・量子古典対応・バルク境界対応の一例で，本当の意味で異分野連携が促進するきっかけとなった研究分野である．表題にあるテンソルネットワークは概念的には後二者に深い関わりがあるが，実際の適用範囲は強相関系にあり，研究領域全体にとって要となる理論である．[2]

昨今は物理に限らず様々なところで異分野連携・複合融合の必要性・重要性が叫ばれている．テンソルネットワークにおける異分野連携の基盤を成すのが情報理論であるということは如何にも現代的であるが，AIやIOTの利活用だけではなく，量子論・相対論の一歩先に存在するであろう自然の究極法則を探る問題においてさえ，自然記述に対する情報論的な問いが本質的な役割を果たしそうであるということは非常に心躍る展開である．

一方，異分野連携とは皮肉なもので，優れた研究をするためには専門外の知識・技術の獲得という難問題を必然的に突き付けられるものである．しかしながら逆にそのような状況が来ればこそ，新たな視点へのフローが生じるということなのかもしれない．情報物理学の近年の流行は，過去の関連成果を統一的に理解する効果があっただけでなく，理論物理学全体が持つ共通数理への認識を与えたことが評価されるべき本当の価値の1つと言えるのであろう．

密度行列くりこみ群と特異値分解

エンタングルメントやテンソル積状態の重要性を多くの物性研究者に明確に認識させてくれたのがDMRGによる量子多体系の研究である．DMRGは特異値分解（Singular Value Decomposition, SVD）を巧みに用いて情報を圧縮した空間でハミルトニアンの数値対角化を行う手法である．これが行列積状態（Matrix Product State, MPS）と呼ばれる最も基本的なテンソルネットワークの最適化と等価であると認識されたことが本質的であった．SVDには相関関数の情報が含まれており，従来，主成分解析の方法と認知されていたSVDにそのような統計物理的意義づけができたことが大きい．SVDは行列の2乗の対角化で単なる線形代数であるが（なのに大学の講義では習わない，残念である），MPSの統計物理的性質を支える部分が実はSVDの演算方法自体にあることが非常に面白い．

エンタングルメント・エントロピーとテンソルネットワーク

量子系の非局所相関をエンタングルメント・エントロピーで特徴づけることは最近ではすっかり定着した感がある．エンタングルメント・エントロピーは量子情報理論で発展した概念であるが，時空物理の立場からもブラックホール・エントロピーの面積測を理解するための1つの有効なモデルとして古くから研究されてきた経緯がある．

ある量子状態$|\psi\rangle$の持つエンタングルメントは以下のように定量化される．全系を部分系Aと環境$\bar{A}$に空間分割するとき，環境自由度を縮約した部分系の密度行列$\rho_A = tr_{\bar{A}}|\psi\rangle\langle\psi|$を用いてvon Neumannエントロピー$S_A = -tr_A(\rho_A \ln \rho_A)$を計算したものがエンタングルメント・エントロピーである．SVDを経由して量子状態を$|\psi\rangle = \sum_n \sqrt{\lambda_n}\,|U_n\rangle_A \otimes |V_n\rangle_{\bar{A}}$とSchmidt分解で表すと$S_A = S_{\bar{A}} = -\sum_n \lambda_n \ln \lambda_n$であることが直ちに示され，このことはエンタングルメント・エントロピーが示量的ではなく熱エントロピーと本質的に異なること，部分系と環境の境界における情報のやり取りであることを意味している．この極めて単純な公式が全ての議論の出発点である．

エンタングルメント・エントロピーは，模型の空間次元dと部分系の線形サイズLによって特徴づけられ，非臨界系では有名な面積則$S \propto (L/\epsilon)^{d-1}$，臨界系では$(L/\epsilon)^{d-1}\ln(L/\epsilon)$と対数補正がつく（$\epsilon$は紫外カットオフ）．適切な量子状態表現は，これらの法則に整合していなければならない．

これらのスケーリング特性を正しく反映した変分波動関数がテンソルネットワークである．これはサイトに局在したテンソルの積であり，見かけは局所分解であるが隠れたテンソル自由度が非局所的な量子もつれを伝える役割を果たす．「正しく反映」の意味は，Lを大きくしても次元の低いテンソルで状態が表現できることであり，表現の古典化や数値的な逐次最適化の可能性も意味する．テンソルネットワークは系の臨界性で2つのクラスに分類され，非臨界系はMPSの一般化であるPEPSクラス，臨界系はMERAク

ラスに属する．すなわち，エンタングルメント・エントロピーのスケーリング則は量子古典対応における古典サイドの幾何構造の決定に重要であると考えられている．

超弦理論・AdS/CFT対応との関わり

前節で述べたように，量子臨界系に向いたテンソルネットワークはマルチスケール・エンタングルメントくりこみ仮設（Multiscale Entanglement Renormalization Ansatz, MERA）と呼ばれる．[3] MERAでは空間d次元系の状態を$d+1$次元的テンソルネットワークで表現する．これは臨界系のくりこみ的性質と適切なエンタングルメント切断操作からなるネットワークであるが，この形状は双曲空間の測地線の離散化とみなすことができる．このことがAdS/CFT対応における笠・高柳公式と同等の物理を共有しているのではないかという提案がなされ，[4,5] むしろ素粒子物理方面の興味を引いている．超弦理論を経なくてもAdS/CFT対応の本質が理解できるということは，ホログラフィー原理が単に超弦理論から派生する概念ではなく，もう一段深い原理に根差すことを示唆するものである．これが情報論的原理によるものであることは間違いがないところである．熱場の量子論による有限温度MERAとブラックホール時空，空間一様MPSとトポロジカルな場の理論など，テンソルネットワークの知識でAdS/CFT対応に関わる研究もできるようになってきている．

量子可解模型や強相関系とのつながり

テンソルネットワークは変分理論であるため，「局所分解＋隠れた次元」というアイデアが数学的・物理的にどのような観点から基礎づけされるか調べることは極めて大事である．特に，ホログラフィー原理を物理学の基礎理論構築の要にしてみようという機運を鑑みると尚更である．サイト自由度を非可換量で表す物理的必然性の検討は超弦理論に対しても示唆的で，場の理論の発散除去以上の物理的意義があるのかを考える試金石となるだろう．

テンソルネットワークと時空物理の関わりを定量的に論ずる1つの方向は，MERAを構成するテンソルの代数構造を理解することである．MERAは反強磁性Heisenberg模型などの量子臨界系に適した変分波動関数であるが，この空間1次元模型はBethe仮設法で厳密に解くことができ，Bethe仮設自体はMERAではなくてMPSで表すことができる．このMPSは冗長表現であるので，情報の適切な縮約でMERAに変形できると思われる．そのときにYang-Baxter関係式やBethe方程式がどのような役割を果たすのかを理解することが数学的な基礎づけを与えると思われる．

一方で，一次元量子スピン系は桃源郷で，高次元に進んだら棘の道が待ち構えていると評する方は少なくない．しかしながら，可解系の理解をもう一歩深めるという保守的な態度も必要と考えられる．これは強相関電子系の複合励起スペクトルの研究からも示唆されることである．一昔前，スピン・電荷の分離・結合は次元によって本質的に異なると言われていたのが，昨今では，次元に寄らないスペクトル的性質が極めて重要であるとの認識に変わってきている．これは例えばt-J模型における非局所励起の代数的性質やホログラフィー的階層構造が基本的には空間次元によらないことによる．また，フェルミ面近傍の非局所励起は長寿命であり，非局所表現がリアルな励起として立ち現れてくるところは，物理的必然性の検討にも有用な情報を与えるものと考えられる．

テンソルネットワークの数値最適化

正直なところ，テンソルネットワークの数値最適化は悩ましい問題である．DMRGが極めて安定性の高い計算手法であったのと対照的に，空間2次元以上のテンソルネットワークの最適化は，計算機科学的には依然として難問であり，「京」コンピュータやポスト「京」においても戦略的課題となっている．汎用性の高い近似的最適化手法の開発は大事なことと思われる．ウェーブレット解析や量子回路的発想との結合による最適化の研究が参考になるであろう．

今後の展望とまとめ

今まで遠かった分野の接近は楽しみなところである．ニューラルネットワークや量子通信などのネットワーク系は今後つながりを増すかもしれない．情報幾何を用いたAdS/CFT対応の研究もようやく軌道に乗り始めている．AdS/CFT対応を情報論的に見れば，量子系の相関の情報を古典的メモリ空間に稠密にエンコードする問題である．曲がった時空間はスケールの異なる情報を1ビットで格納する機能を持つ．すなわち情報量最小エンコーディングの変分原理が鍵となる．これもテンソルネットワークの最適化とある意味で繋がることなのであろう．

この30年でテンソルネットワークは物理学への俯瞰的視点を提供したことに大きな意義がある．そして平成が終わりを告げるのも何かの縁である．これまでの研究を踏まえてまた次のステップに進む時期である．最後に，国内外の皆様との協力や継続的な議論に深く感謝申し上げます．

参考文献

1）S. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863（1992）; Phys. Rev. B **48**, 10345（1993）.
2）松枝宏明，『量子系のエンタングルメントと幾何学　ホログラフィー原理に基づく異分野横断の数理』（森北出版，2016）.
3）G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **99**, 220405（2007）.
4）S. Ryu and T. Takayanagi, Phys. Rev. Lett. **96**, 181602（2006）.
5）B. Swingle, Phys. Rev. D **86**, 056007（2012）.

（2018年9月24日原稿受付）