一般社団法人
国際数理科学協会会報

No.131/2025.1

編集委員： 藤井淳一（委員長）

目次

＊寄稿

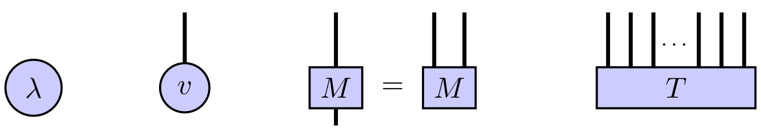
テンソルネットワークの図表現

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。

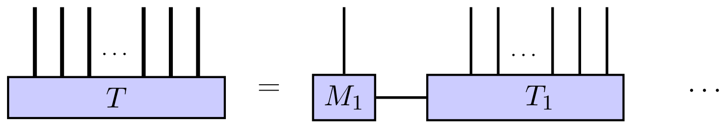
前号でも少し触れましたが、ブラックホールのHawking-Bekensteinエントロピーと同等であることが示されたエンタングルメントエントロピーを巡って、**TN**(`tensor network`)と呼ばれる構造が、計算上の便利な道具として注目されています。それらの基本構造として**MPS**(`matrix product state`)(cf.[5])や、ツリー型で、最も計算上適していると言われる**MERA**(`multi-scale entanglement renormalization ansatz`)があり舞う。その名前からわかるように、これも、グラフ的に可視化されるのが自然で、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、せっ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、その点はご容赦願います。

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

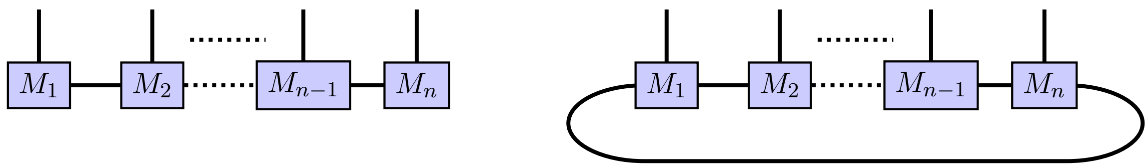


scalar　vector　matrix　tensor (product)

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：



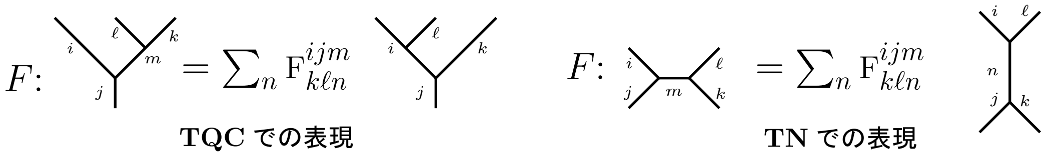
該当の多重テンソルの状態 $|\psi\rangle$ を Schmidt 分解して $|\psi\rangle = \sum_{j_1,\dots,j_n}^{n} c_{j_1,\dots,j_n}|j_1\cdots j_m\rangle$ の係数の総体は n テンソル T を表していると思えるので、例えば周期的な後者であれば、

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

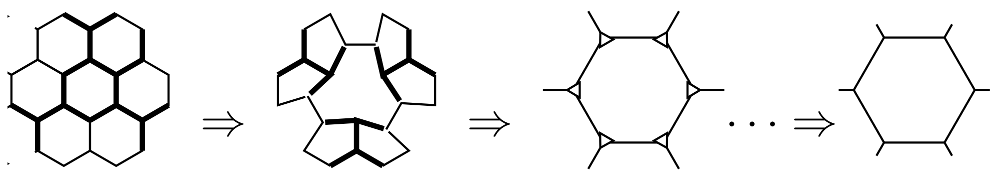
が MPS の式表現になります。このように次数の跳ね上がるテンソルを次数を抑えた「行列の積」に直して、計算させる手段で、もともとはコンピュータですぐにオーバーフローして計算しづらかったことで生まれたもののようです。

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 TQC 2) 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:



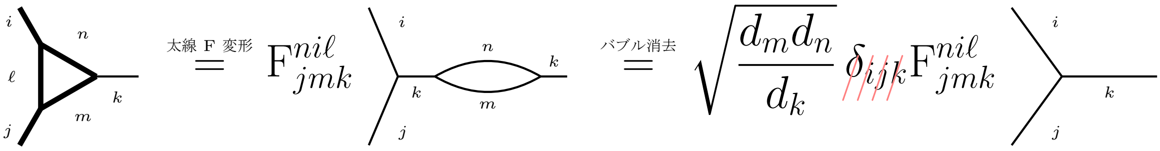
これを使うと次の変形が可能になります（一度にやると難しいので disjoint な太字部分で徐々に F 変形）：



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 $(j_2,...,j_n)$ 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。

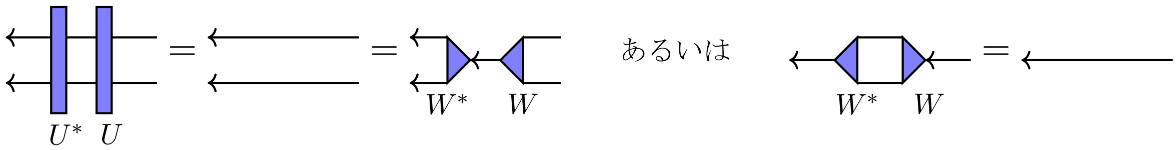
2) 例えば、[4] の F 行列の図とは枝のフリップが逆方向になっていますが、F は $F^2 = I$ となる symmetry と呼ばれる特殊なユニタリ行列なので同等です。なお、右側の図は共形場理論等でもよく使われているものです。

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）:

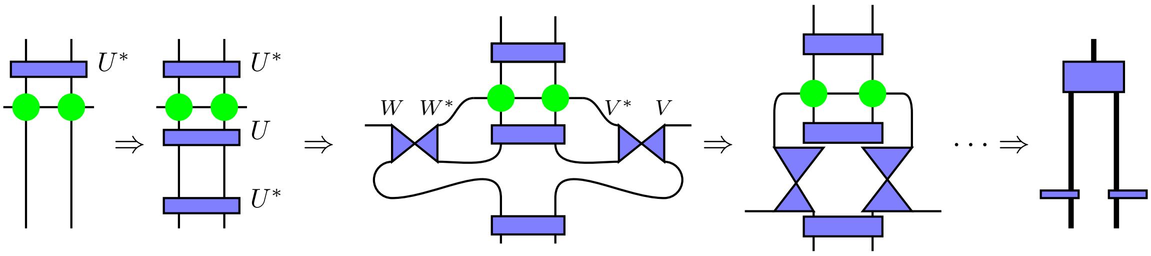


2.TN の基本変形 その 2（4-valent）

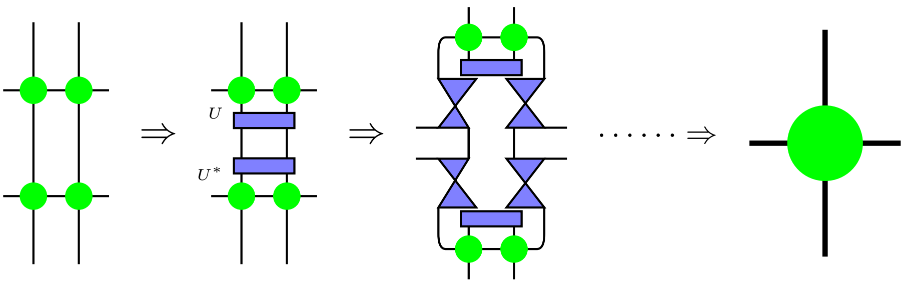
四角形の格子の場合は 4-valent なので、ユニタリ U(四角) やイソメトリ=等長作用素 W(三角) を挟む必要があります [2]:



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:



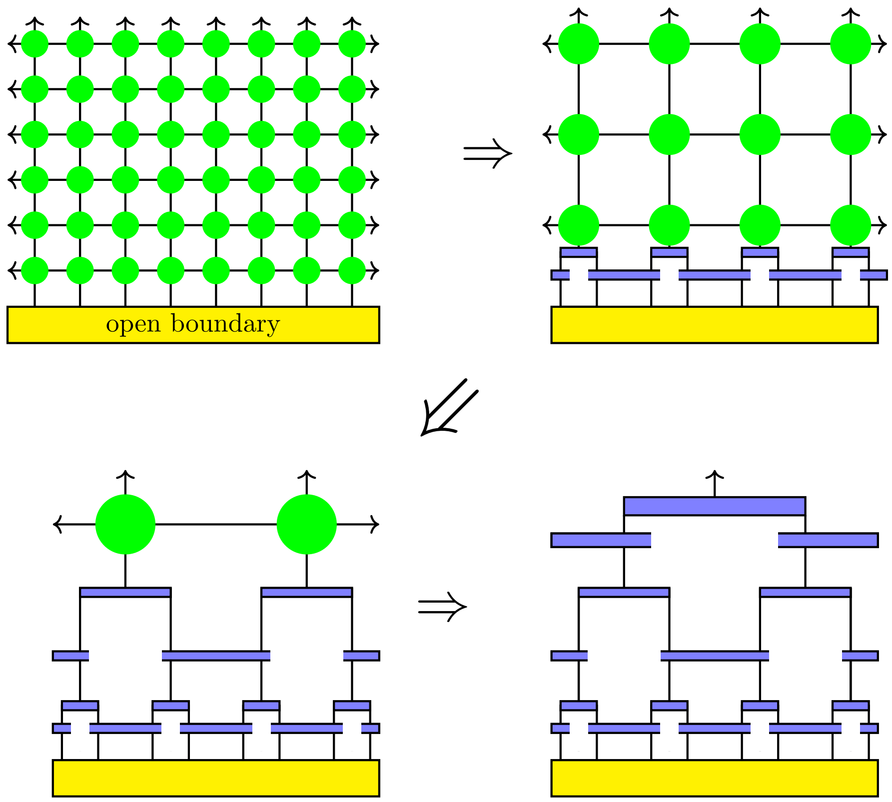
これは、一番下の部分が open boundary の場合にこうなるのですが、上が続いている場合は、上下にひっくり返した形をとって



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

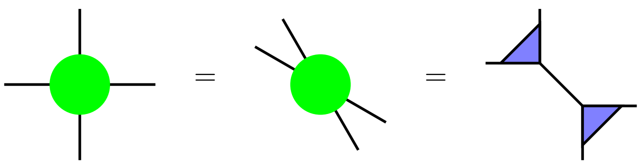


MERA形TN

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。

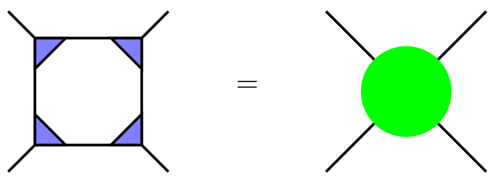
まず各部品の変形について述べておきます: [1] での特異値分解の図は -45 度の分解のみ描くと、

(1)

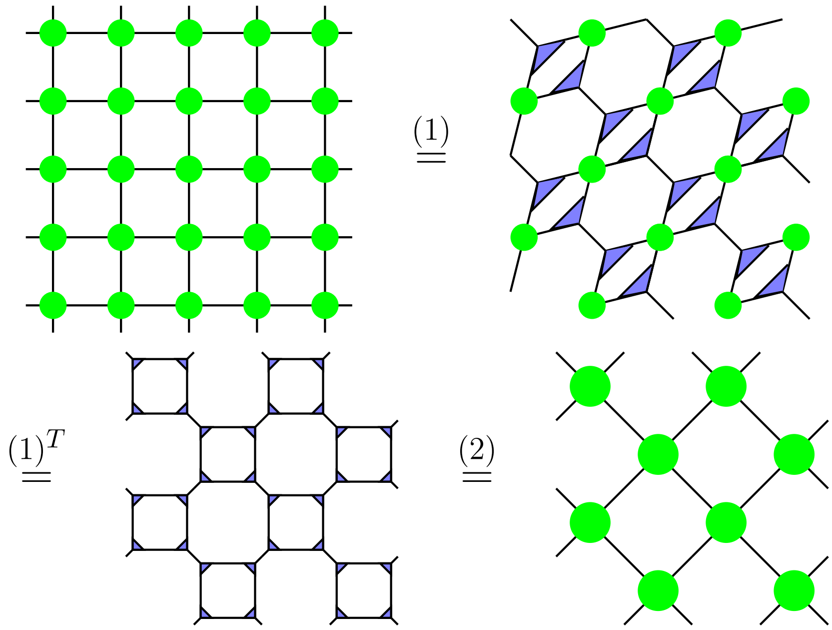


となって、逆にまとめる図は、

(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。

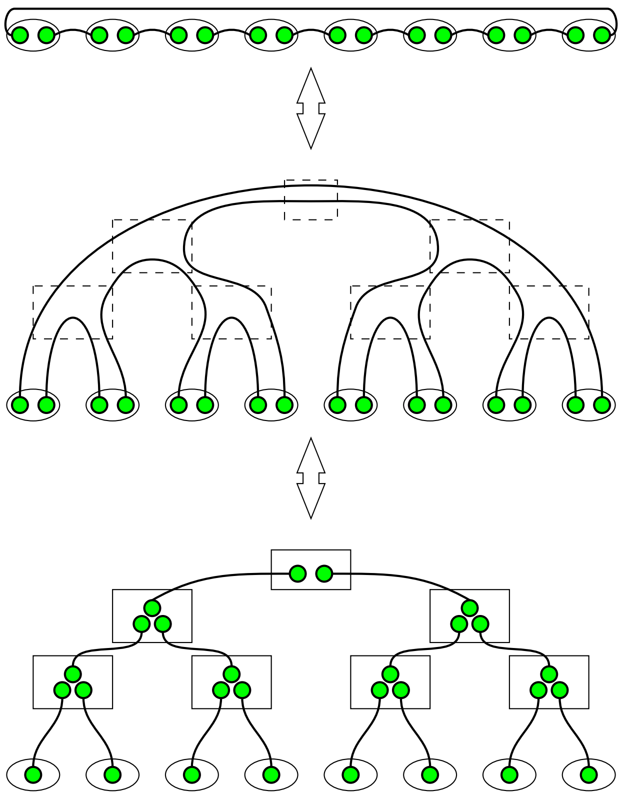


同じことを再度やれば、元から 2 倍のような図が出来上がります。

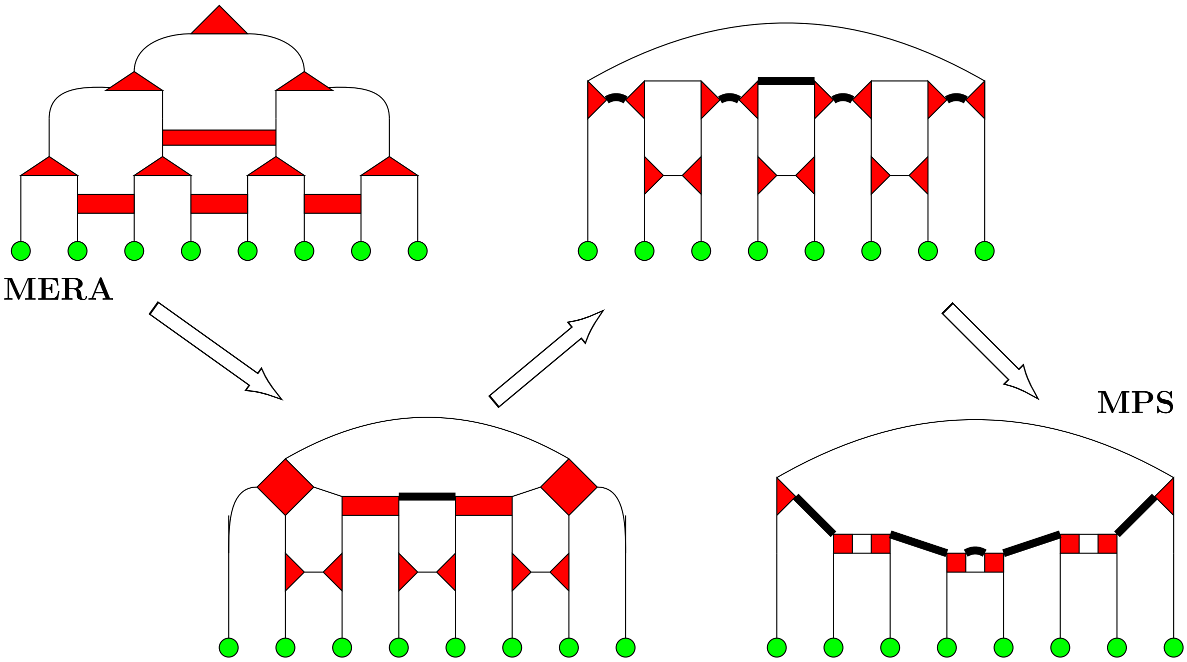
3.TN 相互間の変形

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ますので、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.Evenbly and T.E.Baker, The Basics of Tensor Network —An overview of tensors and renormalization, LN in Université de Sherbrooke, 2018.

[2] G.Evenbly and G.Vidal, Tensor network renormalization, Phys. Rev. Lett., **115**(2015), 180405.

[3] G.Evenbly 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.