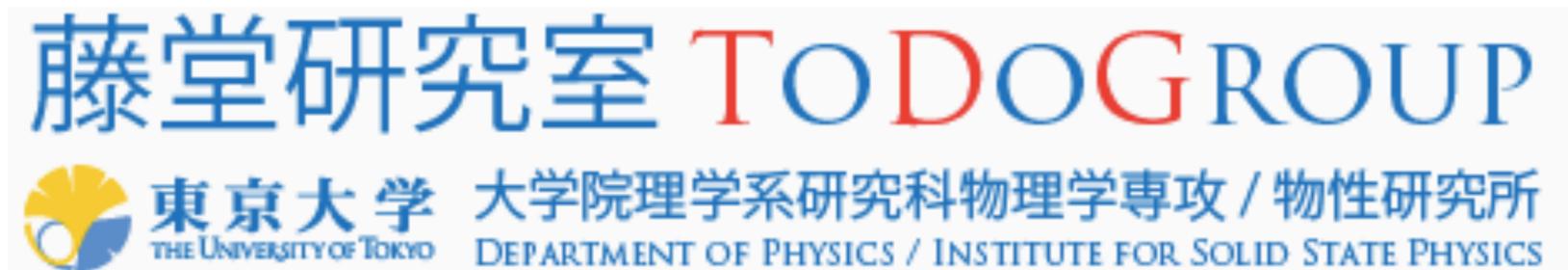


# 企業人材ニーズVS博士人材シーズ マッチングワークショップ2021

2021年 6月2日

東京大学大学院  
理学系研究科 物理学専攻  
博士課程3年  
山本 卓矢



# 自己紹介、保有スキル

物性物理の領域で計算物理の研究(研究室内では物性基礎論から量子アルゴリズムまで各々)

研究で使用している技術

- ・ プログラミング言語：Python、C++、julia(主にMacbookを用いて)
- ・ ソフトウェア：主にオープンソースのものを研究用にチューニング
- ・ 計算機：研究室所有のもの、物性研究所のスパコン(Ohtaka、enaga)
- ・ 並列処理：Open MP、MPI

希望する職種

データサイエンスや量子コンピューティングの開発、システムエンジニア

研究内容：テンソルネットワークを用いた数値計算、最適化

テンソルネットワーク法：近年物理界隈で用いられるようになった手法、低コストで大規模な物理系が

↑  
計算できる。物性のみならず、素粒子、機械学習の分野でも使われ始めている。

1：ネットワークの構成を低コストにする、2：いらぬ情報を削ぎ落とす、の2つからなる

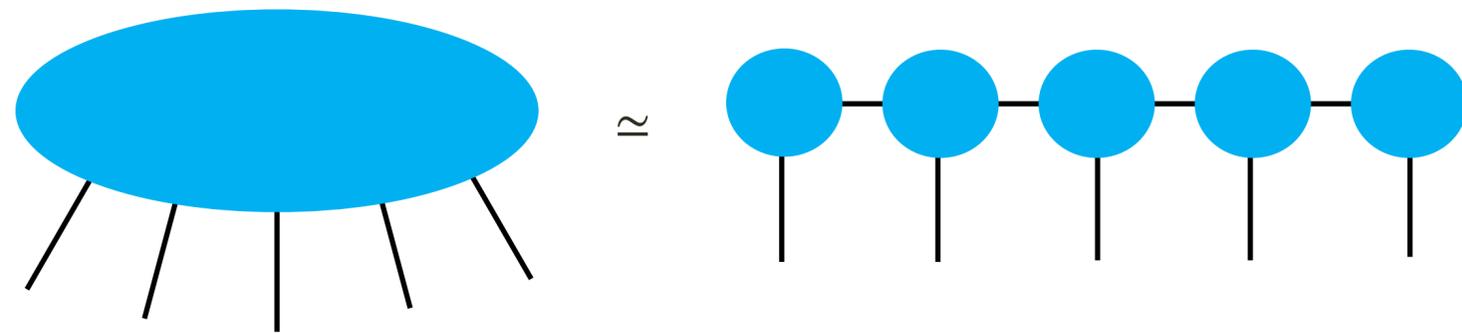


2019年5月、理学部交歓会にて  
一番左が発表者

# テンソルネットワーク法とは

手順1：ネットワークの構成を低コストにする

多くの変数を持ったテンソルを、少数の変数を持った複数のテンソルに近似する



5本の足(足1つはD次元)を持つテンソルAを  
3本(あるいは2本)の足を持つテンソルBの組に  
分解する

テンソルAの次元は $D^5$ 、5つのテンソルに近似すると $(3Dm^2+2Dm)$ 次元

$D=10$ 、 $m=10$ とすると、左：10000次元、右： $(3000+200)=3200$ 次元←1/3以上も削減！

そのままの次元を扱うとなると困難でも、**実際必要な次元(情報)は少ない！**

次元を減らすことのメリット：テンソルの演算がしやすくなる→計算時間を減らせる

全体の次元を減らせる→保存に必要なメモリが少なくて済む

# テンソルネットワーク法とは

手順2： いらぬ情報を削ぎ落とす

データ(画像など)を少ない情報で表すには？

例： 特異値分解

右図上： 約19万ピクセル、右図下： 4万6000ピクセル  
→ 4分の1に削減

粗さが目立つが、文字、色は読み取れる。

**元のデータを全て保持しなくても情報は伝わる！**

→ テンソルネットワーク法の中心的考え

求めたい精度によって、特異値を残し、  
扱いやすいサイズにすることができる！

RGBの3つの行列  
を持つ  $3 \times 211 \times 303$   
~190000ピクセル



特異値を30とる

$211 \times 30$ ,  $30 \times 303$ ,  
 $30 \times 30$ の行列が3つ  
 $3 \times 30(211 + 303 + 1)$   
~46000ピクセルに



# 研究内容

フラストレーション系におけるテンソルネットワーク法の開発

問題点：相互作用が増えることによる計算コストの増大、縮退による遅い収束

フラストレーションでは通常の格子系に加え、

右図のように新たに相互作用(破線)を考えることが多い。

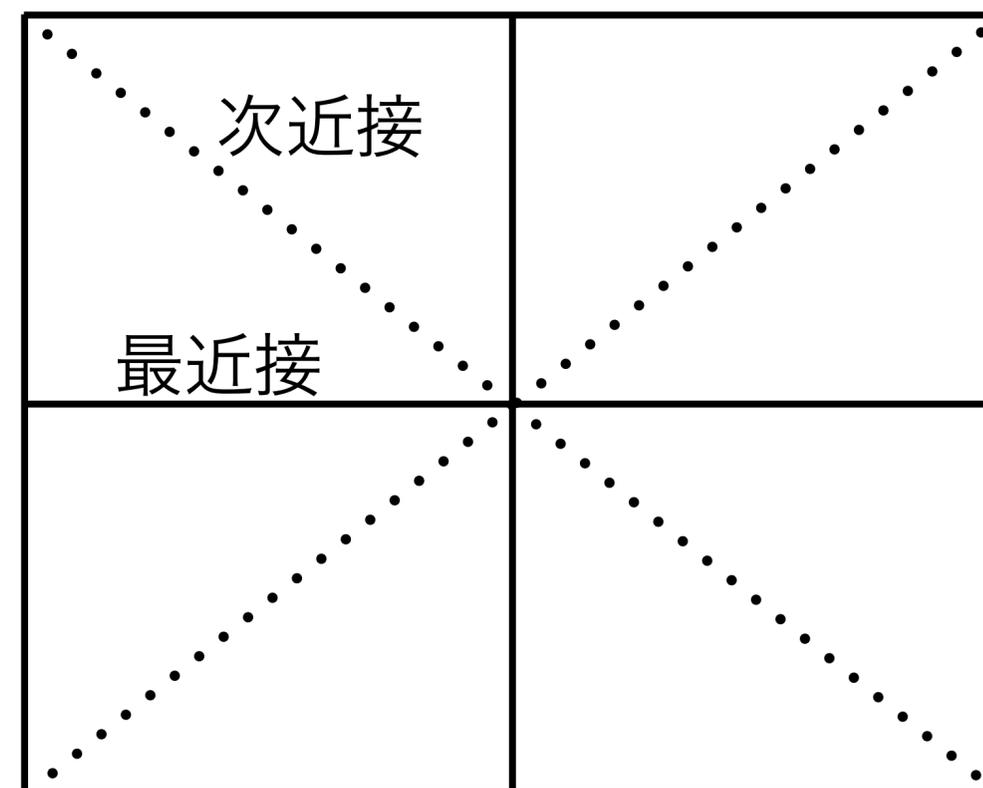
→初期テンソルをどのように定義するか、その後、

どのように近似していくかはその都度考えなければ

いけない。(本研究ではこの点を改善)

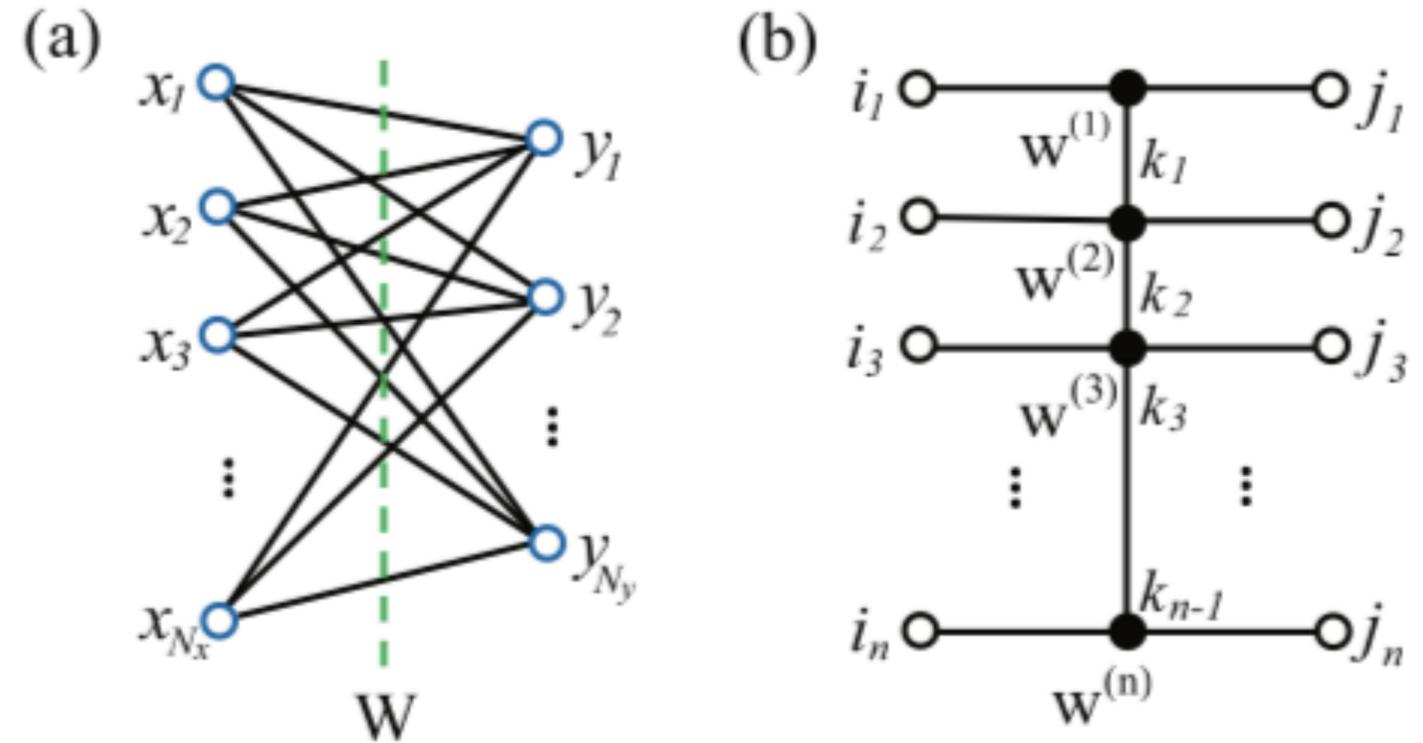
内容：**次近接でも通常のアプローチが使える手法を開発**

超伝導の発現機構と関係する量子スピン液体の計算にも関連



# 機械学習への活用例

- ・ニューラルネットワークを効率的に表現  
(右図(b)、 $n$ 個の $w$ を使って表現)
- ・入力側と出力側で表せるデータ数は同じ  
( $N_x$ 次元のデータを $n$ 個のインデックスで表現)
- ・入出力を行列的なテンソルでつなぐことで、重み $w$ を少ないパラメーターで構築ができる



((a) $N_x N_y$ 個 $\rightarrow$ (b) $i_1 j_1 D + \sum i_k j_k D^2 + i_n j_n D$ 個にできる)

$N_x=10000, N_y=625, D=10, n=4, i=1\sim 10, j=1\sim 5$ とすると

(a)625万 $\rightarrow$ (b)1万2千にまでパラメーターを減らせる

PhysRevResearch.2.023300より

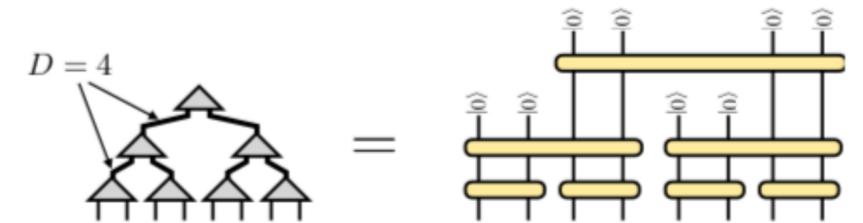
- ・ **必要なパラメーター数を減らせる**
- ・ 従来よりも少ない計算資源で高精度な予測、分類が可能

# 量子コンピューティングへの活用例

- 量子回路をテンソルネットワークとみなす
- 縮約が効率的に取れる場合は高速化が望める
- 畳み込みニューラルネットワーク (Convolutional Neural Network, CNN) を量子回路で実装した量子CNNは、手法の一つであるMERAとみなせる
- 機械学習のニューラルネットワークに量子回路を用いた、量子機械学習にも応用が期待される

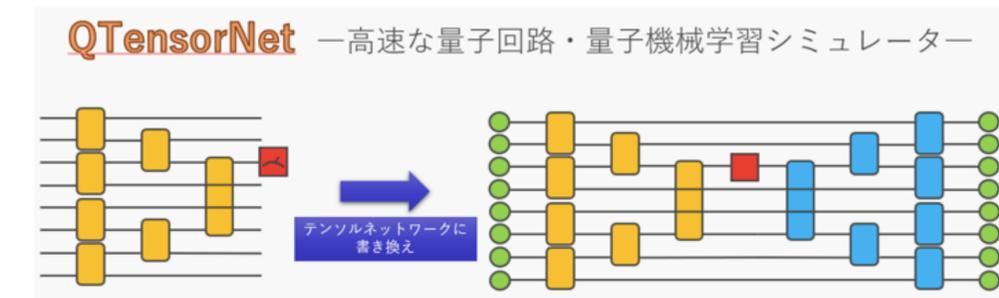
テンソルネットワークを扱えるパッケージも増え始めている。

例：pythonでのパッケージ、numpy、googleX、pytorch



量子回路をテンソルネットワーク  
に対応させる

arXiv:1803.11537より



量子回路をテンソルネットワークを用いて  
Pythonで実装した例

<http://ict-nw.i.kyoto-u.ac.jp/ict-innovation/panel/266/>より