Quantics tensor train に基づく多スケール時空仮説と場の量子論

品岡寛 〈埼玉大学大学院理工学研究科 shinaoka@mail.saitama-u.ac.jp〉
村上雄太 〈理研 CEMS yuta.murakami@riken.jp〉
野垣康介 〈京都大学理学研究科 nogaki.kosuke.83v@st.kyoto-u.ac.jp〉
櫻井理人 〈埼玉大学大学院理工学研究科 sakurairihito@gmail.com〉

計算物理学は, 物理研究において重要な役割を担っている. 計算物理学では, 桁違いに違う長さスケールが共存する現象を扱うことが多いが, この共存のため計算量が膨大になることがある.

長さスケールが定式化の段階で自明に分離可能な場合もあるが, 往々にして, その共存が物理現象において本質的であり, 容易に分離可能でない場合も多い. 例えば, 乱流は, 非常に複雑な流れパターンを示す現象で, さまざまな長さスケールと時間スケールが一体となって現れるため, 理論的な予測が難しいことが知られている. このような問題は様々な分野 (例えば, 宇宙ひもや乱流のシミュレーションなど) で見られ, 幅広い長さスケールを同時に扱える計算理論の研究が続けられている.

同様の問題は, 物性理論でも見受けられる. 物質が示す多彩な物性は, 理論的には多体シュレディンガー方程式を解けば定量的に予測可能なはずであるが, その計算量は粒子数に対して指数的に発散するため, 厳密に解くことは現実的には不可能である.

そのため, 元の多体量子系を近似して, 有効的なポテンシャルや相互作用を含む少数系で近似することが一般的である. 種々の摂動論や, 密度汎関数理論に基づくバンド計算もその例である.

有効的なポテンシャルや相互作用は, 多次元時空で定義された「相関関数」の１種である. 系が複雑な内部自由度を持つ場合, 長さ, 時間スケールが幅広く分布する場合には, 時空依存性の記述に対する計算・メモリ量の問題が深刻化し, 有効少数系とはいえ精密に解くことが極めて困難になる.

相関関数は, 実・虚周波数 (時間) や空間に複雑に依存する. 近年, 「虚時間」依存性の圧縮に関しては, 筆者である品岡と共同研究者によって, 温度グリーン関数の「中間表現」が開発され, 幅広いエネルギー幅を持つ系の場の量子論計算や第一原理計算への応用が進んでいる. しかし, この技術は虚時間表現の特殊性に依存しており, 実時間や空間依存性など, 一般の時空への拡張は困難であった.

そのような背景から, 一般の時空依存性の圧縮表現の探索が重要であり, その潜在的なインパクトの大きさがうかがい知れる. 近年, 情報圧縮技術としてテンソルネットワークが広く注目されている. 特に, quantics (quantized) tensor train (QTT) は, 異なる長さスケールが共存する関数の圧縮に有効である. 具体的には, 長さスケール間の相関 (エンタングルメント) の強弱に応じて, 情報を圧縮する.

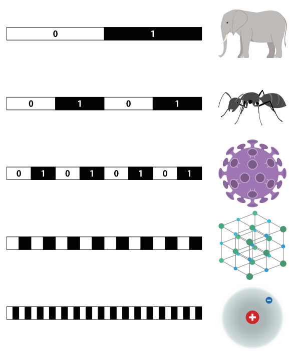
この数年, 乱流の流体力学計算など, 様々な物理分野において, QTT の応用が試みられている. 特に, 筆者らは, 場の量子論計算に現れる多くの相関関数の情報圧縮が可能であること, フーリエ変換や畳み込みがテンソルネットワークの演算として効率的に実行可能であることを示した. つまり, 原理的には, 場の量子論計算を情報圧縮したまま実行可能である.

QTT は, 最初に述べたような様々な計算物分野における問題を汎用的な枠組みで解決できる可能性を秘めている. そのため, 汎用・効率的なアルゴリズム, オープンソースソフトウェア開発が世界的に始まっている. もし, 読者が計算物理において, 桁違いに異なるスケールが共存する現象に取り組んでいるなら, 是非 QTT に興味を持って欲しい.

—用語解説—

テンソルネットワーク：
高次元テンソルを複数の小さなテンソルの積として近似する手法である. 1 次元量子系に対する密度行列繰り込み群や行列積表現が有名である. データの圧縮や, 圧縮したままで各種の演算を効率的に実行することが可能になる.

Quantics (quantized) tensor train：
応用数学での tensor train とは, 物性分野では行列積表現として知られている. Quantics (quantized) tensor train では, 連続変数に対して (例えば)2 進数表示することで, 指数的に異なる長さスケールに対する離散変数を導入し, 異なる長さスケール間のエンタングルメントを分離する.



指数関数的に違う長さスケールの例 (右): 象, 蟻, ウィルス, 固体結晶, 原子. 左は, QTT で用いる 2 進数目盛りに対応する.

1. はじめに

計算物理学では, しばしば多次元の時空計算が必要となる. 例えば, 大気や乱流の流体力学, あるいは場の量子論など, これらは大きく異なる「長さスケール」を扱う. これらのスケールは, 計算対象の方程式に内在している場合もあれば, シミュレーションする系で創発する場合もあり, その存在によって計算コストが増加する.

例をあげると, 固体の電子状態を記述するシュレディンガー方程式では, 原子の配列から生じる数十電子ボルトのバンド幅と, 室温以下で生じる低温物理現象のエネルギースケールが同時に現れる. また, 非平衡系の外場応答では, レーザーパルスの高速な初期緩和と遅い緩和の二つの時間スケールが現れる.

等間隔グリッドによる離散化では, 異なるスケールを同時に扱うためには細かいグリッドが必要となり, メモリ・計算コストが増加する. そのため, 対象系特有の性質を活用した効率的な数値計算手法の開発は, 量子力学, 古典力学を問わず, 最先端の研究テーマの 1 つである.

数値流体力学における適合格子細分化法や, 虚時間形式の場の量子論に対する中間表現などの成功例もあれば, 後述する場の量子論の実時間応答関数のように, 未だに決定打に欠けるものも存在する.

本記事では, 「スケール分離」という物理系に広く共通する特性を活用して, 異なる長さスケールが共存する系に広く有効な数値計算手法を構成する方法を紹介しよう. 具体的には, 応用数学で開発された quantics (quantized) tensor train (QTT)[1–3] を使って, このような「スケール分離」, 即ちスケール間の相関の強さ, を自動的に検出し, 情報の圧縮や計算量を削減する. QTT は近年, 流体力学計算など様々な物理学の問題[4] に適用され始めている. 本記事の前半で QTT を導入した後, 後半では筆者らによる, 物性理論における場の量子論計算への応用[5] を紹介したい.

2. Quantics tensor train

2.1. 導入

QTT の概念を理解するため, 区間 $[0, 1)$ で定義された, ある連続関数 $f(x)$ の離散化を考える. 例えば, この関数が鋭いピーク構造を持つがその場所を事前に知らないとしよう [図 1(a)]. このピーク構造を正確に記述するためには, 離散化の間隔をピークの幅以下に設定することが必要となる. x 軸上に $N = 2^R$ 個の等間隔グリッドを設定した場合, R を増やし, グリッド間の間隔を $1/2^R$ に小さくする. この方法では, ピーク周辺の解像度を指数的に改善できるが, R の値に対して指数関数的にデータ量が増大する問題がある.

そこで QTT では, 変数 x を

$$x = 0.x_1x_2\cdots x_R = x_1/2 + x_2/2^2 + \cdots + x_R/2^R \tag{1}$$

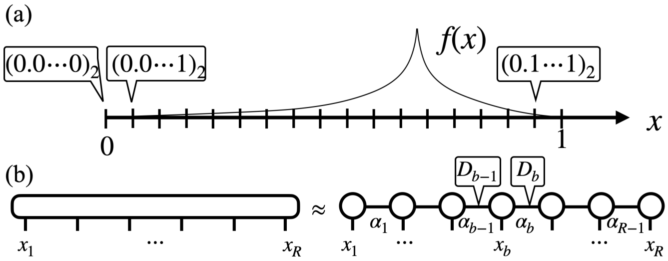


図 1 (a) ある連続関数 $f(x_1 \cdots x_R)$ の離散化. ここで変数 x は, 2 進数表示した. (b) R 階のテンソルを, 異なる長さスケールで分離し,tensor train で近似したもの.

と 2 進数表示をする. x_i が 2 進数の各桁を表す. x_1 が 1 番大きな長さスケール, x_R が一番細かい長さスケールに対応する. 次に, この離散化したグリッド点上での $f(x)$ を $2 \times \cdots \times 2$ の R 階のテンソルに

$$f(x) = f(0.x_1x_2\cdots x_R) = F_{x_1x_2\cdots x_R}, \tag{2}$$

と "reshape" する. QTT では, 異なる長さスケール間の相関がある程度弱いと仮定し, tensor train (1 種のテンソルネットワーク) を利用し,

$$\begin{aligned} &F_{x_1x_2\cdots x_R} \\ &\approx \sum_{\alpha_1=1}^{D_1} \cdots \sum_{\alpha_{R-1}=1}^{D_{R-1}} F^{(1)}_{x_1,1\alpha_1} \cdots F^{(b)}_{x_b,\alpha_{b-1}\alpha_b} \cdots F^{(R)}_{x_R,\alpha_{R-1}1} \\ &\equiv F^{(1)}_{x_1} \cdot (\cdots) \cdot F^{(b)}_{x_b} \cdot (\cdots) \cdot F^{(R)}_{x_R}, \end{aligned} \tag{3}$$

と近似する [図 1(b)]. ここで, 3 行目右辺の · はボンド次元[1] 方向への縮約を意味する. $F^{(b)}$ は $2 \times D_{b-1} \times D_b$ の 3 階テンソルを表し, $\alpha_1, \ldots, \alpha_{R-1}$ はボンドを表す. b 番目のボンドの次元は D_b と表記した. また, $D = \max_b D_b$ は最大のボンド次元を示す. D_b はテンソル間の相関の度合いを表す指標で, 元のテンソルのすべての要素が既知の場合, 特異値分解を利用してフロベニウスノルムの意味で最適な D_b を決定できる. $D \ll 2^{R/2}$ の場合, データ量を 2^R から $O(2D^2R)$ へ指数的に圧縮できる.

また, x_b を量子ビット, $F_{x_1x_2\cdots x_R}$ を量子ビット数 R 個の (規格化されていない) 量子多体系の波動関数の確率振幅 $|f\rangle = \sum_{x_1,x_2,\cdots x_R} F_{x_1x_2\cdots x_R} |x_1x_2\cdots x_R\rangle$ と見なすと, 式 (3) は, 多体波動関数の行列積状態 (Matrix Product State, MPS) と等価である. そのため, QTT における離散フーリエ変換と, 量子フーリエ変換は等価であり, QTT は quantum-inspired な方法とも言われる.

QTT は, 多変数関数へ拡張できる. 区間 $[0, 1)^2$ で定義された 2 変数関数 $f(x, x')$ を考えてみよう. それぞれの変数を 2 進数で表現し, $x = (x_1 \cdots x_{R'})_2$, $x' = (x'_1 \cdots x'_R)_2$ とする (簡単のため $R' = R$ とした). $x_{R'}$ と x'_R が x と x' の最も細かい長さスケールに対応する. QTT で $f(x, x')$ を表

[1] テンソル間に共通のインデックス α_b [図 1(b)] は, 仮想的なボンドやリンク, その大きさをボンド次元と呼ぶ. 詳細にはこちらを参照.[6]

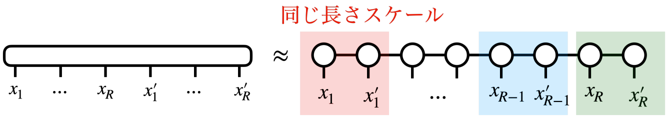


図 2: 2 変数関数の QTT 表現.

現すると, 同じ長さスケールに対応する 2 つのビットが隣り合うように tensor train の各テンソルを配置した形となる (図 2). そのような配置を取ることで, 同程度の長さスケールの範囲にエンタングルメントを局所化し, 結果として全体のボンド次元を抑えることができる.

2.2. 圧縮可能な例

この節では, QTT による圧縮が自明に可能な関数をいくつか見てみよう. 区間 [0,1) で定義された指数関数 $f(x)=e^{\lambda x}$ を考える. 式 (1) のように x を 2 進数表現すると,

$$f(x)=e^{\lambda 0.x_1x_2\cdots x_R}=e^{\lambda\sum_{b=1}^{R}\frac{x_b}{2^b}}=\prod_{b=1}^{R}e^{\lambda\frac{x_b}{2^b}} \tag{4}$$

となる. この式は, 式 (3) で, テンソルを $F^{(b)}_{x_b,\alpha_{b-1},\alpha_b}=\delta_{\alpha_{b-1},1}\delta_{\alpha_b,1}e^{\lambda x_b/2^b}$ とした形と一致している. つまり, ボンド次元が $D_b=1$ である直積の形である. 仮に指数関数の数値的データを $R=30$ のグリッド点上で保持した場合, 浮動小数点でのデータ数が 2^{30} となる. しかし, QTT の場合, 各桁で浮動小数点を一つ保持すれば良く, データ数は 2×30 へと「指数的」に削減される.

次に, 複数の指数関数の重ね合わせ $\sum_i^N e^{\lambda_i x}$ を考えてみよう. それぞれの指数関数に対応する $D_b=1$ の MPS の和を取れば良いが, MPS の和においてボンド次元は加算的に振る舞うため, 指数関数の重ね合わせのボンド次元は N で上から抑えられる. つまり, 桁違いに異なる λ_i が共存していても QTT は悪影響を受けない.

次に, 2 変数関数の例として, クロネッカーのデルタ $f(x,y)=\delta_{x,y}$ の QTT 表現は以下の様に与えられる.

$$f(x,y)=\delta_{x_1,y_1}\cdots\delta_{x_R,y_R}. \tag{5}$$

この関数を行列で表現した単位行列は, 特異値分解により圧縮不能な例として知られている. しかし, QTT では各桁に関するデルタ関数の積で分解可能であるため, ボンド次元は 1 になる. これは異なる長さスケール間で相関が全くない構造を持つことであると理解できる. これらの関数は, 実際の物理系で出現する典型的な構造である.

2.3. QTT における演算

QTT 表現では, フーリエ変換, 畳み込み積分 (行列積, 要素積) がテンソルネットワークの縮約として実行可能である. 以下では, フーリエ変換と行列積の演算例を紹介する. それらの演算コストは R に対してほぼ線形にしか増えないため, 実質解像度無限の計算が可能になる.

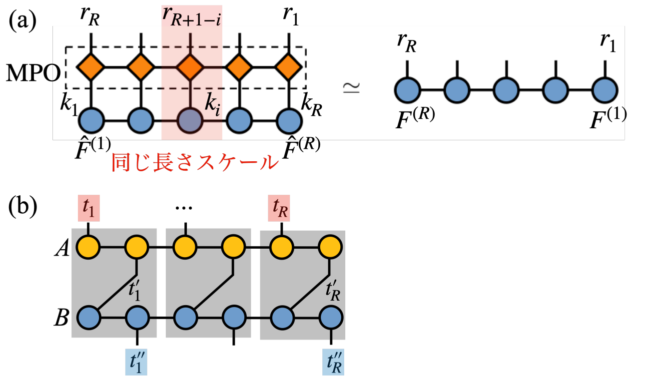


図 3 (a) QTT 表現での (量子) フーリエ変換. 破線で囲まれた部分が, フーリエ変換に対応する行列積演算子 (MPO). (b) 畳み込み積分におけるテンソルの縮約 (影部分).

2.3.1. フーリエ変換

関数 $\hat{f}(k)$ の離散フーリエ変換 $f(r)$ を以下のように定義する.

$$f(r)=\sum_{k=0}^{2^R-1}\exp\left(\frac{2\pi i}{2^R}kr\right)\hat{f}(k). \tag{6}$$

ここで, k, r は整数で定義した. $\hat{f}(k)$ と $f(r)$ の QTT 表示を

$$\hat{f}(k)=\hat{F}^{(1)}_{k_1}\cdot\hat{F}^{(2)}_{k_2}\cdot(\cdots)\cdot\hat{F}^{(R)}_{k_R}, \tag{7a}$$

$$f(r)=F^{(R)}_{r_R}\cdot F^{(R-1)}_{r_{R-1}}\cdot(\cdots)\cdot F^{(1)}_{r_1}, \tag{7b}$$

と定義する. ここで, $k=(k_1\cdots k_R)_2$ と $r=(r_1\cdots r_R)_2$ を 2 進数表示した. フーリエ変換の前後で, 同じ長さスケールに対応する 2 つのインデックスの左右位置が揃うように [図 3(a)], $\hat{f}(k)$ と $f(r)$ ではテンソルの順番を逆にしている.

このとき, フーリエ変換を表すテンソル $\mathrm{FT}^{r_R\cdots r_1}_{k_1\ldots k_R}$ を

$$F^{(R)}_{r_R}\cdots F^{(1)}_{r_1}=\sum_{k_1,\cdots,k_R}\mathrm{FT}^{r_R\cdots r_1}_{k_1\ldots k_R}\hat{F}^{(1)}_{k_1}\cdots\hat{F}^{(R)}_{k_R} \tag{8}$$

と定義すると, $\mathrm{FT}^{r_R\cdots r_1}_{k_1\ldots k_R}$ は, 図 3(a) に示すような行列積演算子 (Matrix product operator, MPO) として数値的に圧縮して表現できる. MPO は, Cooley-Turckey 型の高速離散フーリエ変換[5], 量子フーリエ変換アルゴリズムを使って構築できるが, ボンド次元は, R が大きくても定数で抑えられる.[8,9] そのため, フーリエ変換は, $\hat{f}(k)$ の QTT 表現に, MPO をかけて, テンソルの縮約を実行することで効率的に行える. 小さいボンド次元は, フーリエ変換がスケール毎に「ほぼ」独立していて, 違う長さスケール間 [図 3(a) の横方向] の情報伝達が少ないことを示唆している.

2.3.2. 畳み込み積分

例として, 畳み込み積分 (行列積)

$$C\left(t,t''\right)=\int \mathrm{d}t'\,A\left(t,t'\right)B\left(t',t''\right) \tag{9}$$

は, R が十分大きいとき,

$$C\left(t_1, t_1'', \cdots, t_R, t_R''\right) = 2^{-R} \times \sum_{t_1', \cdots, t_R'} A\left(t_1, t_1', \cdots, t_R, t_R'\right) B\left(t_1', t_1'', \cdots, t_R', t_R''\right) \quad (10)$$

と書ける. A と B の QTT 表現が与えられているとき, C の QTT 表現は, 図 3(b) にあるテンソルネットワークの縮約を実行することで得られる. A, B のボンド次元が D で, C が同程度のボンド次元まで再圧縮可能な場合, 計算量は $O(RD^4)$ で増大する. R に対して, 離散化エラーを指数関数的に抑えられる一方, 計算量は線形にしか増大しない. つまり, 実質的に連続極限を取ることができる.

3. 数値的な圧縮例

場の量子論に基づく数値計算では, 多次元時空で定義された相関関数 (グリーン関数) が重要な役割を果たす. 我々の論文[5] から, 相関関数の時空依存性を桁違いに圧縮する数値的な例を紹介しよう. 以下では, 従来法による数値データを特異値分解で解析した結果を示す. 今回は, 平衡系・非平衡系の 1 粒子グリーン関数のみ議論するが, 論文[5] では, 3 周波数に依存するバーテックス関数, 第一原理計算から得られた多極子感受率など, 様々な計算例を示している.

3.1. 2 次元格子模型の平衡系の応答関数

まず, 有限温度かつ平衡状態の物理系を議論しよう. 温度グリーン関数法では, 1 粒子グリーン関数 $G_{ij}(\boldsymbol{k}, i\nu_n)$, 既約 4 点バーテックス関数 $\Gamma_{ijkl}(\boldsymbol{k}, i\nu_n, \boldsymbol{k}', i\nu_n', \boldsymbol{q}, i\omega_n)$ を決定し, 観測量の期待値や外場への応答を求める. ここで, i や j などの添字はスピンや軌道, 副格子の自由度を表す.

豊富な強相関物理現象の中でも, 異方的超伝導や (電荷・スピン) 密度波等の現象は空間相関を伴うため, その解析には, グリーン関数の波数 ($\boldsymbol{k}$) 依存性を陽に取り扱う必要がある. 特に臨界領域では, 相関長の発散に伴い, 桁違いに異なる長さスケールが共存する. 従って, 従来法によって波数依存性を正確に捉えるには, 巨大な計算コストとメモリを必要とする. 特に, 既約 4 点バーテックスは時空や内部自由度それぞれに複数の依存性を持ち, より問題は深刻である.

我々は, 2 次元正方格子 Hubbard 模型に揺らぎ交換近似を適用した結果に対して, QTT による圧縮を試みた [2]. 図 4(a) には, 最低松原振動数成分 ($i\nu_{n=1}$) の 1 粒子グリーン関数を圧縮した様子を示す. 圧縮前のデータはフェルミ面付近に強いピークを示すものの, 圧縮データと元データとの誤差は非常に小さく抑えられることがわかる. ボンド次元のボンド依存性を示す図 4(b) には, プラトー構造が観察され, 1 粒子グリーン関数への QTT の有効性を示している [3].

[2] Mermin–Wagner の定理を満たす揺らぎ交換近似は, 反強磁性転移寸前の強相関金属の解析に適した手法である.

[3] この図では, 元データにあわせて $R = 10$ を採用したが, 例えばダイソン方程式を QTT 表現を使って解く場合には, R を任意に大きくし指数的に解像度を高められる.[5]

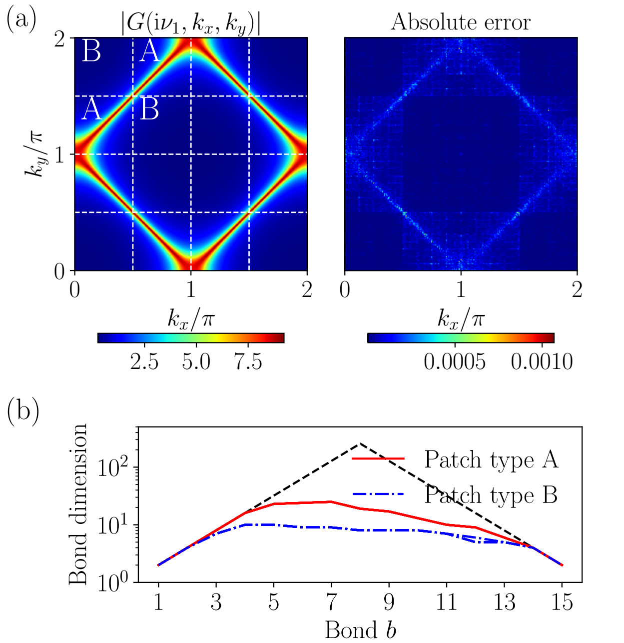


図 4　揺らぎ交換近似による 2 次元正方格子 Hubbard 模型のグリーン関数 ($T = 0.03$, $U = 1.1$). (a) 左図にオリジナルデータ, 右図に圧縮前後での誤差が示されている. 有効な桁数は 4 桁程度である. 波数空間の構造が圧縮に与える影響を観察するため, 波数空間を 16 個に分割するパッチを採用した. (b) ボンド次元のボンド依存性. パッチ A とパッチ B のそれぞれについて示されている. 黒点線は, まったく圧縮できない場合を示す. パッチ A と B について, 圧縮前後のデータサイズ比 (圧縮率) はそれぞれ 10.86 と 45.20 である.

系が反強磁性量子臨界点近傍に位置していることを反映して, 磁気感受率は波数 $\boldsymbol{q} = (\pi, \pi)$ 付近に非常に鋭敏なピーク構造を持つ. この磁気感受率データに対しても同様の高効率な圧縮が可能であることも明らかになっている.

ダイアグラムの方法を基にした数値計算では, フーリエ変換と畳み込み積分を多用する. 前章で示したように, これらの演算は MPO として高効率に実行可能であり, QTT で閉じた形での計算可能性を示唆する.

3.2. 非平衡系のグリーン関数

次に, 非平衡問題を対象とする非平衡グリーン関数に着目する. ここで考える非平衡グリーン関数は, 虚時間方向 (松原経路) と実時間方向を含む L 字の Konstantinov-Perel 経路と呼ばれる時間経路 $\mathcal{C}$ 上で定義される. 以下に出てくる, 松原成分, Retarded 成分 ($G^R(t,t') = -i\theta(t-t')\langle\{\hat{c}(t), \hat{c}^\dagger(t')\}\rangle$), Lesser 成分 ($G^<$) および Left-mixing 成分 ($G^\rceil$) とは, その経路の異なる区間で定義された成分である.

非平衡グリーン関数を求めるには, 平衡系の場合と同様に $\mathcal{C}$ 上に定義されたダイソン方程式 (カダノフ-ベイム方程式) を解く必要がある. 通常の実装法[7] では, 実時間軸に N_t の等間隔な離散時間を用意して数値計算を実装する. この場合, 必要な計算メモリが $O(N_t^2)$, 計算時間が $O(N_t^3)$ でスケールする. そのため, QTT による圧縮やダイソン方程式の評価ができれば, これらの計算コストが大幅に改善され, より多くの非平衡問題に挑戦できる可能性が開かれる.

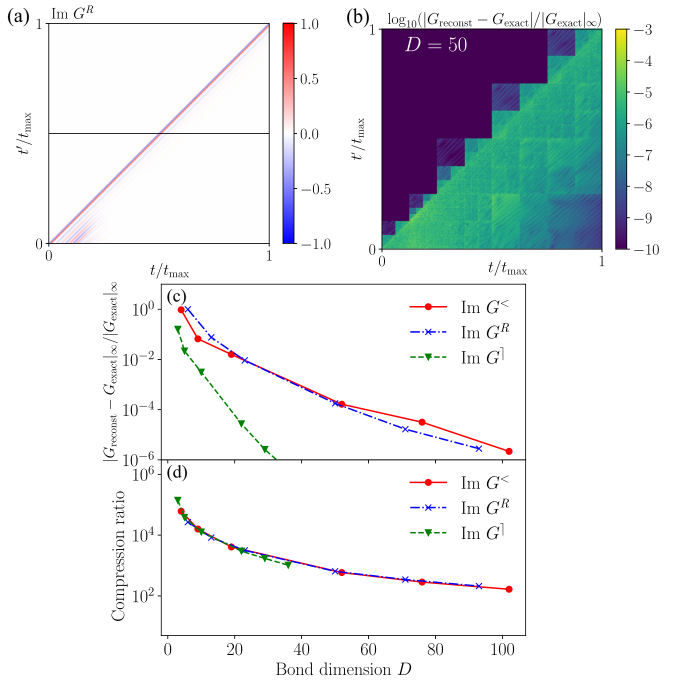


図 5　非平衡動的平均場理論により求められた Hubbard 模型の非平衡グリーン関数．(a,b)Retarded グリーン関数 $G^R(t,t')$ の元データ (a) と QTT 圧縮されたデータと元データの違い (b)．(c,d) Retarded, Lesser, Left-mixing 各成分の圧縮精度 (c) および圧縮率 (d) のボンド次元 D 依存性．ここでは元データに合わせ $R=12$ とした．これらのデータは，低温の反強磁性相が光励起で融解する場合のシミュレーションに対応する．

ここでは，単軌道ハバード模型の非平衡グリーン関数 $G(t,t')$ に注目する．具体的には，低温で実現される反強磁性相を光励起し，反強磁性秩序が融解するプロセスを見ており，時間発展のシミュレーションは非平衡グリーン関数法の一つである非平衡動的平均場理論を用いている．

図 5 (a)(b) に，例として $G^R(t,t')$ の虚部と，QTT で圧縮されたデータと元データの違いを示した．今回のデータは $N_t=4096$ としているが，$D=50$ という比較的小さなボンド次元で元データを精度よく再現できていることがわかる．特に，$G^R(t,t')$ は $t=t'$ において，不連続になっているが，その部分も問題なく再現できている点は注目に値する (参考: 2.2 章で紹介した単位行列)．図 5 (c)(d) は，Retarded, Lesser, Left-mixing 各成分の圧縮精度および圧縮率のボンド次元 D 依存性を示している．D に対する指数的な精度の改善がここでも確認できる．また，圧縮率も $D\simeq 50$ では 10^3 程度となっていることがわかる．ちなみに，より高温の常磁性の Mott 絶縁体状態を励起した場合のデータはより効率的に圧縮されることもわかっている．

4. まとめと今後の展望

Quantics tensor train (QTT) 表現の使用により，物理学の方程式をテンソルネットワークにマップする可能性が開かれた．しかしながら，その効率的な実装方法については，発展の余地が大いに存在する．例えば，通常用いられる特異値分解は，分解対象の行列・テンソルの全要素の読み出しを必要とする．一方, Cross Interpolation (CI) では，適応的にサンプルされた要素のみから低ランク近似を構成できる．著者の 1 人である品岡らによって，QTT と CI を組み合わせることで，平衡系のダイソン方程式の解法や波数空間での和を高速化できることが発見された.[10]

今後必要とされる state-of-the-art な計算において，分散並列計算や GPU 対応のようなテクニックを活用する際に，汎用的なテンソルネットワークの計算技術を流用できる点が QTT の強みである．また，QTT はスケールを 1 次元的に分離するが，より複雑あるいは適応的な形状のテンソルネットワーク，例えば Tree Tensor Network (TTN) の適用も興味深い研究課題となっている．

さらに，QTT の使用によりフォッカープランク方程式や化学のマスター方程式といった微分方程式を解くことも可能である.[11] QTT は桁違いに異なるスケールが混在する計算機シミュレーションにおける有益な手法となるであろう．

本研究においては，Julia 言語と，サイモンズ財団フラットアイアン研究所で開発されたテンソルネットワークライブラリ ITensors.jl を使って，QTT を迅速に実装した．研究チームは引き続き Julia 言語を用いた実装を開発し，これらをオープンソースソフトウェアとして公開する予定である．

参考文献

1) I. V. Oseledets, Doklady Math. **80**, 653 (2009).
2) B. N. Khoromskij, Constr. Approx. **34**, 257 (2011).
3) B. N. Khoromskij, *Tensor Numerical Methods in Scientific Computing* (De Gruyter, Berlin, Boston, 2018).
4) N. Gourianov, M. Lubasch, S. Dolgov, Q. Y. van den Berg, H. Babaee, P. Givi, M. Kiffner, and D. Jaksch, Nat. Comput. Sci. **2**, 30 (2022).
5) H. Shinaoka, M. Wallerberger, Y. Murakami, K. Nogaki, R. Sakurai, P. Werner, A. Kauch, Phys. Rev. X, **13** 021015 (2023).
6) Román Orús, Annals of Physics, **349**, 117 (2014)
7) M. Schüler, D. Golež, Y. Murakami, N. Bittner, A. Herrmann, H. Strand, P. Werner, M. Eckstein, Comp. Phys. Comm. **257**, 107484 (2020).
8) J. Chen, E. M. Stoudenmire, and S. R. White, arXiv:2210.08468v1.
9) K. J. Woolfe, C. D Hill, L. C. L. Hollenberg, Quantum Inf. Comput. **17**, 1 (2017).
10) M. K. Ritter, Y. Núñez Fernández, M. Wallerberger, J. von Delft, H. Shinaoka, X. Waintal, arXiv:2303.11819v1.
11) B. N. Khoromskij, arXiv:1408.4053v1.

(2024 年 2 月 28 日原稿受付)

Multiscale space-time ansatz based on quantics tensor trains for quantum field theories

Hiroshi Shinaoka, Yuta Murakami, Kosuke Nogaki, and Rihito Sakurai

abstract: We propose a new compression method for correlation functions, i.e. quantics tensor train (QTT), based on length-scale separations in space and time. In QTT, a correlation function is represented as a Matrix Product State (MPS). Discrete Fourier Transformation and convolution can be performed efficiently using a Matrix Product Operator (MPO). Numerous examples, ranging from equilibrium to non-equilibrium problems, demonstrate the high efficiency of QTT.