Neural network representation of quantum systems

吉中譲次郎（京大理）

@第7回学習物理領域セミナー＋第59回DLAP

2024/06/13

Based on [arXiv:2403.11420]

With 橋本幸士, 広野雄士, 前田潤

今回話すこと

- NNと場の理論の関係（NNFT）

- 経路積分 ➡ パラメータの統計和

  量子系 ➡ NN

- 活性化関数ごとにパラメータの物理的意味が変わる

Contents

- Motivation: NNFT
- 量子系のNN表示
- 様々な活性化関数
- まとめ

Contents

- Motivation: NNFT
- 量子系のNN表示
- 様々な活性化関数
- まとめ

Motivation

- NNの問題点・・・・可読性が低い

➡ 理論的理解を深めることが重要

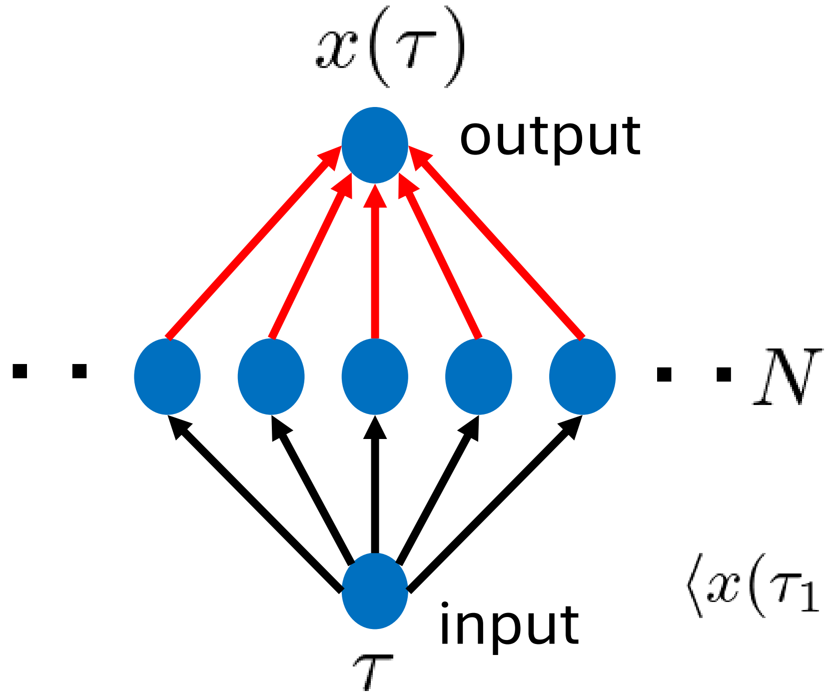
- NN≈大自由度（ニューロン）の集団的な振る舞い

➡ 場の理論の言葉で理解できる？

- NNFT：幅の広いランダムNNは場の理論と思える

Neural Network Field Theory (NNFT)

[Halverson-Maiti-Stoner 2020]
[Halverson 2021]
[Demirtas-Halverson-Maiti-Schwartz-Stoner 2023]



- パラメータ：i.i.d.
- $N \to \infty$

中心極限定理

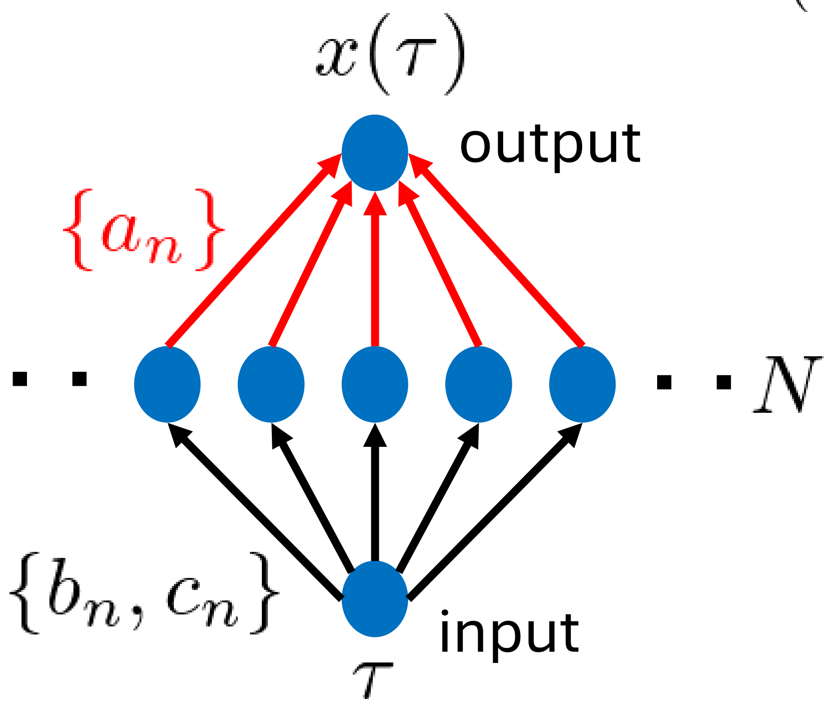
$x(\tau)$ はガウス分布に従う

$$\langle x(\tau_1)x(\tau_2)\rangle = \int \mathcal{D}x\, x(\tau_1)x(\tau_2)e^{-\int \mathrm{d}\tau x A x}$$

自由場と同じ

ガウス分布からのずれ＝相互作用

NNFT　具体例：調和振動子



$$x(\tau) = \sum_{n=1}^{N} \frac{a_n}{\sqrt{b_n^2 + k/m}} \cos(b_n \tau + c_n)$$

$$\begin{cases} a_n \sim \mathcal{N}(0, 1/N) \\ b_n \sim \mathcal{U}(-\Lambda, \Lambda) \\ c_n \sim \mathcal{U}(-\pi, \pi) \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

$$\langle x(\tau_1) x(\tau_2) \rangle = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \mathrm{d}b \frac{\cos\left(b(\tau_1 - \tau_2)\right)}{b^2 + k/m}$$

調和振動子 $L = m\dot{x}^2 + kx^2$ の2点関数と一致

NNFT　まとめ

- NNFT・・・・中心極限定理を通して
  NNと場の理論が対応

- 中心極限定理の仮定（i.i.d., $N \to \infty$ ）の破れ

⟺ 相互作用場の理論

問題点：NNと場の理論の対応が非自明

Contents

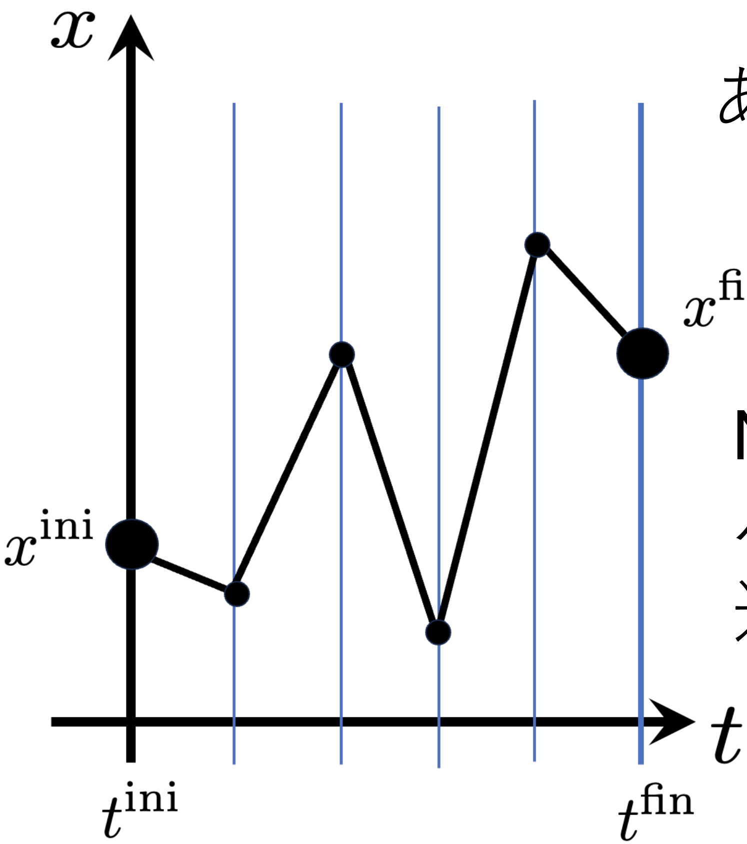
- Motivation: NNFT
- 量子系のNN表示
- 様々な活性化関数
- まとめ

基本的なアイディア

量子系（⊃場の理論）・・・・経路積分で記述できる

||

あらゆる経路 $x(t)$ の足し合わせ

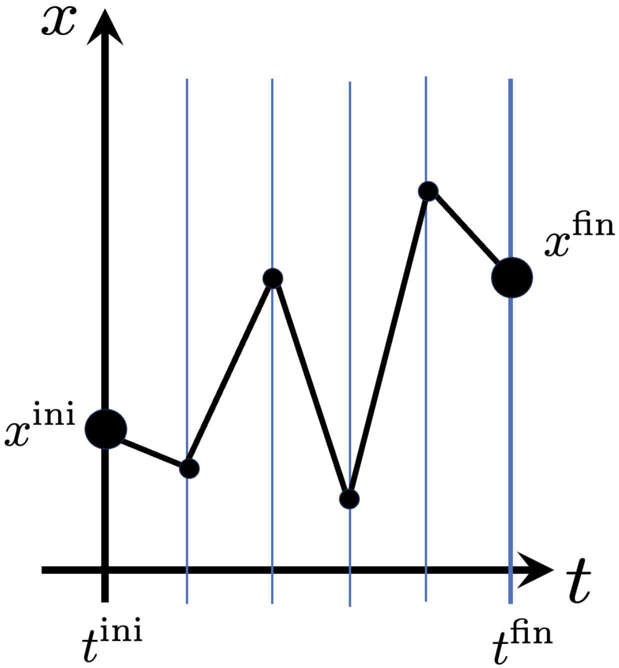


NNは任意の $x(t)$ を
パラメータ $\{w_n\}$ の関数として
近似できる

万能近似定理

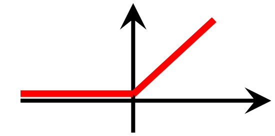
➡ 量子系はパラメータの統計和で記述できる！

経路のNN表示

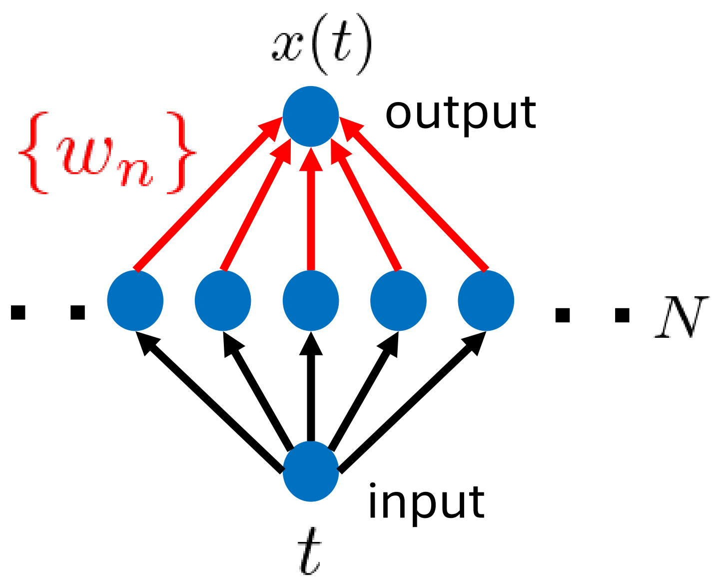


任意の経路を“ジグザグ”で近似

ReLU で書ける



$$\boxed{x(t) = \sum_{n=1}^{N} w_n \mathrm{ReLU}(t - t_{n-1}) + x^{\rm ini}}$$



- 活性化関数：ReLU
- バイアス＝時間分割 t_n

パラメータの統計和

$x(t)$の積分をw_nの積分に書き換えることができる

- 積分測度 $\prod_{n=1}^{N-1} \mathrm{d}x_n = (\Delta t)^{N-1} \prod_{n=1}^{N-1} \mathrm{d}w_n$ $\qquad x_n := x(t_n)$

- 作用 e^{iS}

$$S = \int \mathrm{d}t\, L[x, \dot{x}] = \Delta t \sum_{n=1}^{N} L\Big[\frac{x_n + x_{n-1}}{2}, \frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t}\Big]$$

$$= \Delta t \sum_{n=1}^{N} L\Big[x^{\mathrm{ini}} + \Delta t \sum_{k=1}^{n} (k - \frac{1}{2}) w_{n-k+1}, \sum_{k=1}^{n} w_k\Big]$$

経路積分 ➡ $(\Delta t)^{N-1} \int \prod_{n=1}^{N-1} \mathrm{d}w_n\, e^{iS[w_n]}$ NOT i.i.d.

パラメータの物理的意味

$$x(t) = \sum_{n=1}^{N} w_n \mathrm{ReLU}(t - t_{n-1}) + x^{\mathrm{ini}}$$

$$x_n := x(t_n) = x^{\mathrm{ini}} + \Delta t \sum_{k=0}^{n} k w_{n-k+1}$$

➡ 速度： $\dot{x}_n = \dfrac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t} = \sum_{k=1}^{n} w_k$

➡ w_n：加速度 $\times \Delta t$

ゲージ対称性

より一般の $x(t)$ ： $x(t) = \sum_{n=1}^{N} w_n \mathrm{ReLU}(\tilde{w}_n t + \tilde{b}_n) + b$

$$\Big\downarrow \quad \mathrm{ReLU}(\alpha x) = \alpha \mathrm{ReLU}(x)$$

$$\begin{cases} w_n \to \alpha^{-1} w_n \\ \tilde{w}_n \to \alpha \tilde{w}_n \\ \tilde{b}_n \to \alpha \tilde{b}_n \end{cases}$$ で不変　　NNのゲージ対称性

ゲージ固定： $x(t) = \sum_{n=1}^{N} w_n \mathrm{ReLU}(t + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{時間分割}}}{\tilde{b}_n}) + b$

例：自由粒子, 調和振動子

$$W_n := \sum_{k=1}^{n} w_k \qquad \prod_{n=1}^{N-1} \mathrm{d}w_n = \prod_{n-1}^{N-1} \mathrm{d}W_n$$

- 自由粒子：

$$S = \int \mathrm{d}t\, \frac{m}{2}\dot{x}^2 = \frac{m\Delta t}{2}\Big(\sum_{n=1}^{N-1} (W_n)^2 + \big(\frac{x^{\mathrm{fin}} - x^{\mathrm{ini}}}{\Delta t} - \sum_{k=1}^{N-1} W_k\big)^2 \Big)$$

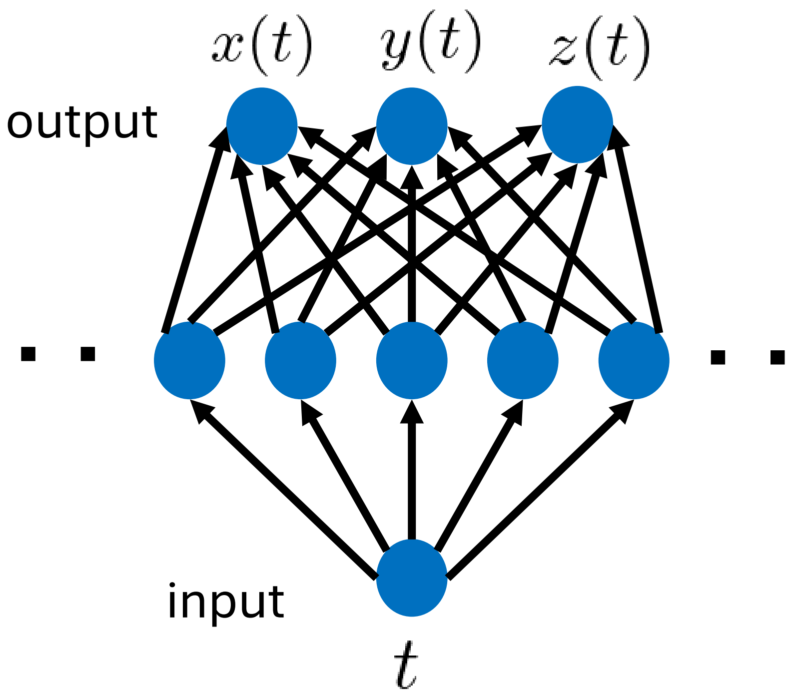
- 調和振動子：

$$S = \int \mathrm{d}t\, \big(\frac{m}{2}\dot{x}^2 - \frac{k}{2}x^2\big) = \frac{m\Delta t}{2}\Big(\sum_{n=1}^{N-1} (W_n)^2 + \big(\frac{x^{\mathrm{fin}} - x^{\mathrm{ini}}}{\Delta t} - \sum_{i=1}^{N-1} W_i\big)^2 \Big)$$

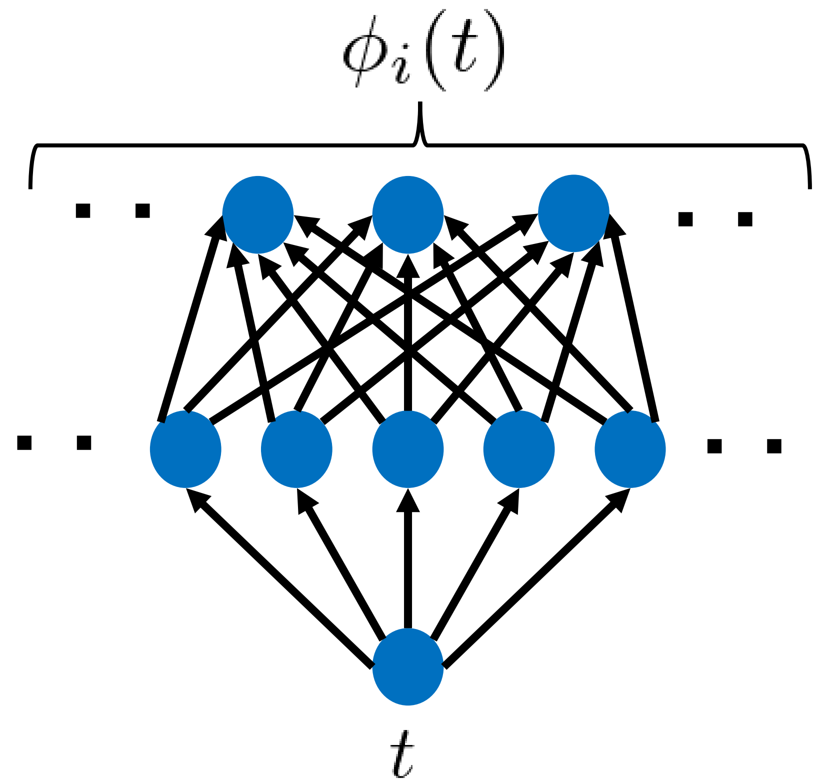
$$- \frac{k\Delta t}{2} \sum_{n=1}^{N-1} \Big(x^{\mathrm{ini}} - \frac{1}{2}\Delta t W_n + \Delta \sum_{i=1}^{n} W_i \Big)^2$$

例：多次元, 場の理論

- 多次元の量子力学



- 場の理論（格子上）



量子系のNN表示　まとめ

- 万能近似定理を通して
  経路積分をパラメータの統計和に書き換える

- 中間層のサイト数 N は時間分割の間隔

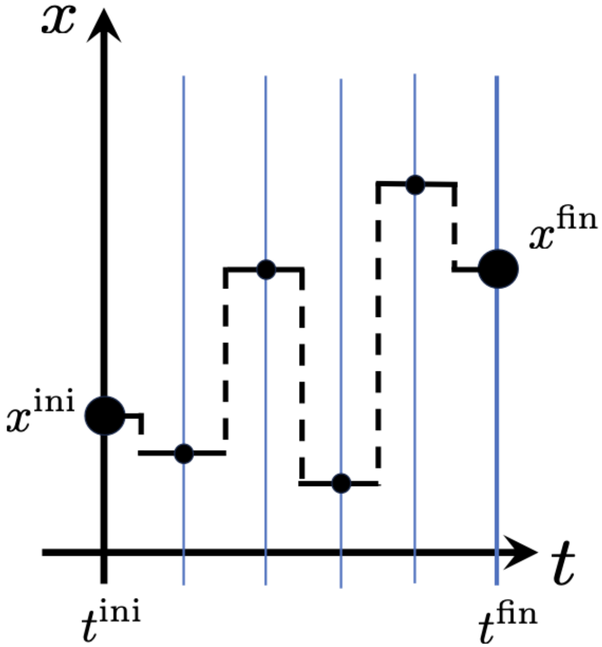
- 作用がパラメータの分布を与える　NOT i.i.d

➡ NNと場の理論の対応関係が明白

Contents

- Motivation: NNFT
- 量子系のNN表示
- 様々な活性化関数
- まとめ

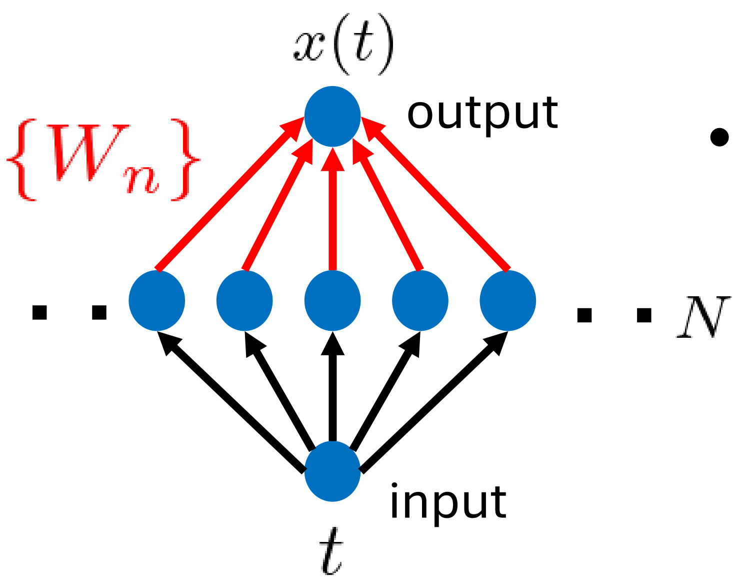
Step活性化関数



任意の経路をstep関数で近似

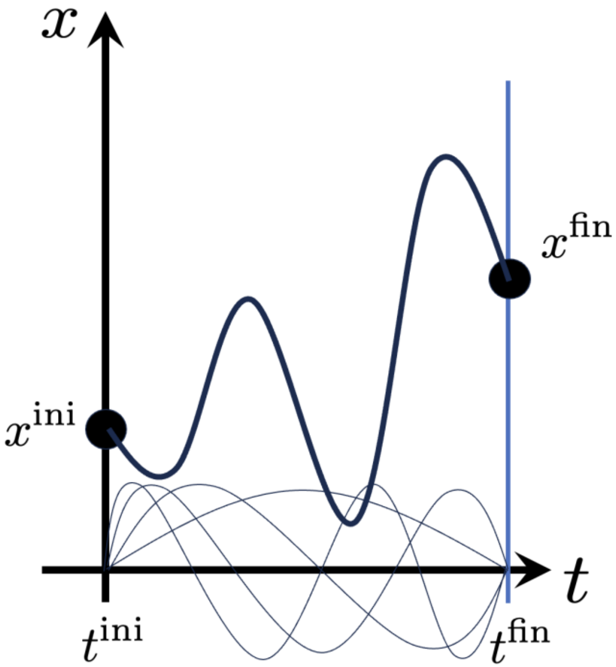
$$\boxed{x(t) = x^{\mathrm{ini}} + \Delta t \sum_{n=1}^{N} W_n \theta\left(t - t_{n-1} - \frac{1}{2}\right)}$$

$x(t_n)$ がwell-def.



- ランダムウォーク的な解釈可能

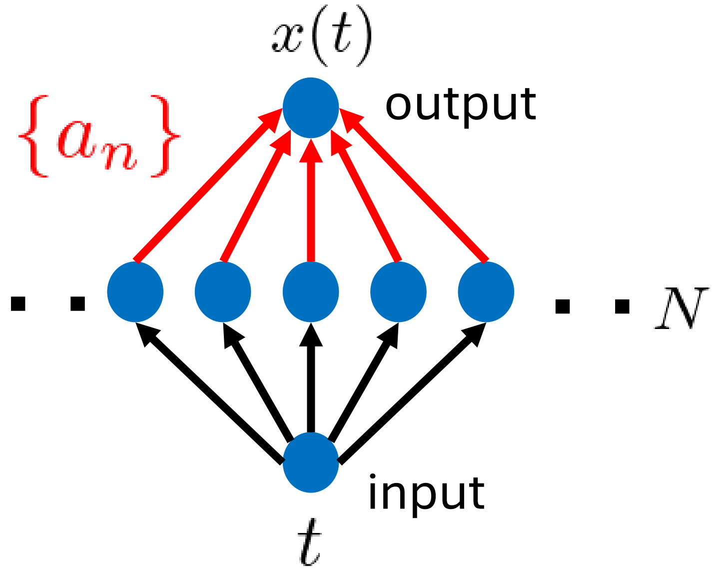
Cosine活性化関数



任意の経路をcosine関数で近似

$$\boxed{x(t) = \sum_n a_n \cos\left(\frac{n\pi}{T} t\right)}$$

Fourier変換



- NNFTとの類似

$$x(\tau) = \sum_{n=1}^{N} \frac{a_n}{\sqrt{b_n^2 + k/m}} \cos(b_n \tau + c_n)$$

NNFTとの比較（調和振動子）

- Cosine活性化関数： $x(t) = \sum_n a_n \cos\left(\frac{n\pi}{T} t\right)$

$$\langle x(t_1)x(t_2)\rangle = \int J \prod_n \mathrm{d}a_n\, x(t_1)x(t_2) \exp\left[\underline{i \sum_n a_n^2 \left(m\left(\frac{n\pi}{T}\right)^2 - k\right)} \right]$$

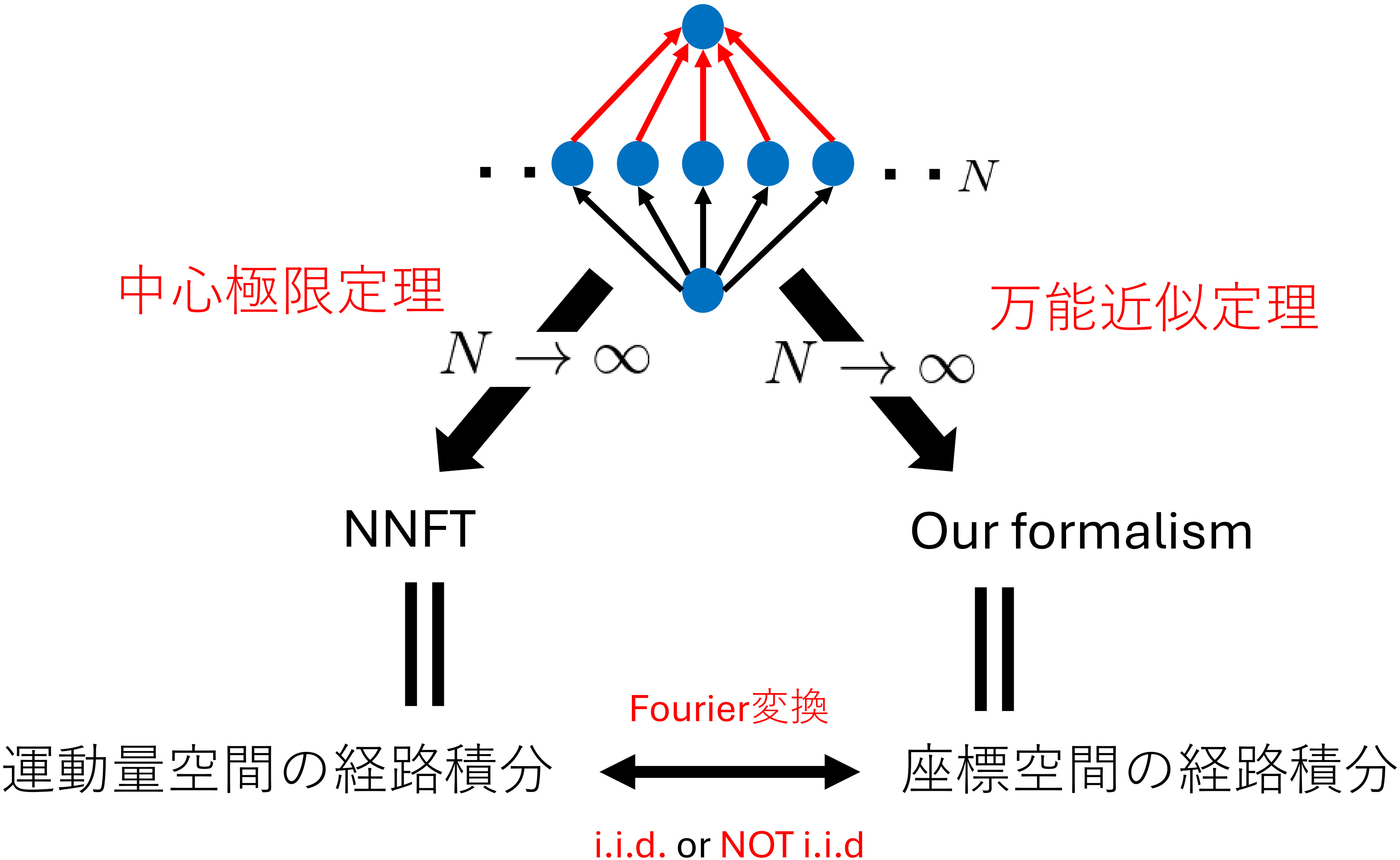
Gaussian　NOT i.i.d.

- NNFT： $x(\tau) = \sum_{n=1}^{N} \frac{a_n}{\sqrt{b_n^2 + k/m}} \cos(b_n \tau + c_n)$

$$\langle x(\tau_1)x(\tau_2)\rangle = \int x(\tau_1)x(\tau_2)P(b)P(c) \underline{\frac{N}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{N^2}{2}\sum_n a_n^2\right]}$$

Gaussian　i.i.d

NNFTとの比較



N
中心極限定理
万能近似定理
$N \to \infty$
$N \to \infty$
NNFT
Our formalism
運動量空間の経路積分
Fourier変換
座標空間の経路積分
i.i.d. or NOT i.i.d

パラメータの物理的意味

$$x(t) = \sum_n a_n \sigma(b_n t + c_n)$$

ReLU: $x(t) = \sum_{n=1}^{N} w_n \mathrm{ReLU}(t - t_{n-1})$

Step: $x(t) = \Delta t \sum_{n=1}^{N} W_n \theta(t - t_{n-1} - \frac{1}{2})$

Cosine: $x(t) = \sum_n a_n \cos(\frac{n\pi}{T} t)$

Activation	Meaning of network parameters		
	a	b	c
ReLU	Acceleration	Fixed	Time divisions (fixed)
Step	Velocity	Fixed	Time divisions (fixed)
Cosine	Fourier Coefficient	Frequency (fixed)	Fixed

Contents

- Motivation: NNFT
- 量子系のNN表示
- 様々な活性化関数
- まとめ

まとめ

- 経路積分をパラメータの統計和に書き換えることで量子系とNNの間の写像を構成

- 活性化関数ごとにパラメータの物理的意味が変わる

- 従来のNNFTは今回の形式のFourier変換だと思える