

テンソル木を用いた生成モデルが データ内の隠れた関係性を抽出する

2025年1月16日

京都大学情報学研究科
原田健自

共同研究者：大久保毅（東大理）、川島直輝（東大物性研）

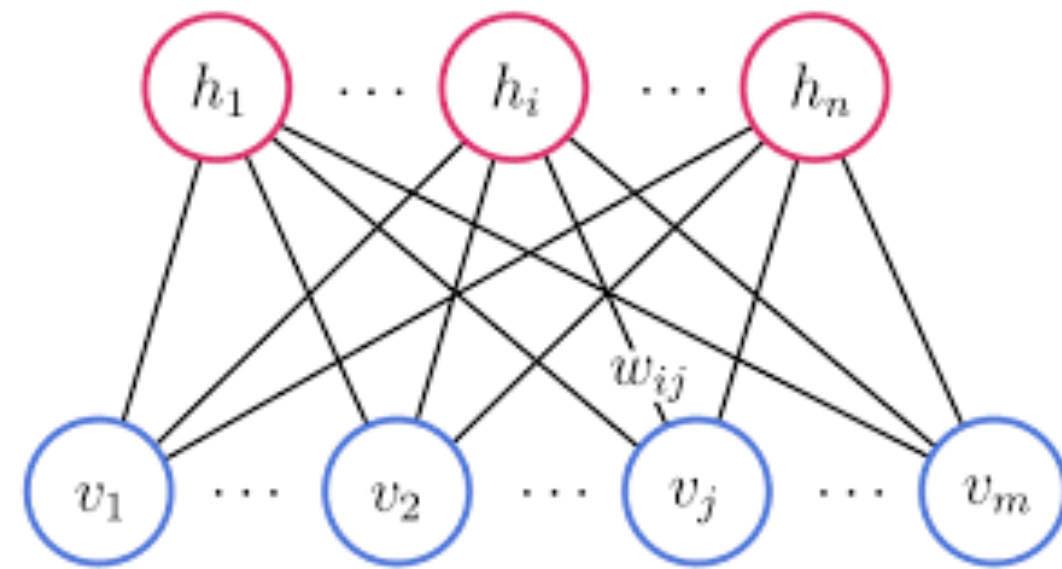


K.H., T. Okubo, N. Kawashima, *Tensor tree learns hidden relational structures in data to construct generative models*, [arXiv:2408.10669](https://arxiv.org/abs/2408.10669)

生成モデリング

データサンプルを生成する確率分布のモデルを作る学習アルゴリズム

$\{\mathbf{x}_i\}_{i \in \mathcal{M}}$ サンプル 学習 \rightarrow $P_{\theta}(\mathbf{x})$ パラメータ θ をもつ確率分布モデル



サンプリング



機械学習の基礎的なアルゴリズムで幅広い応用先がある

生成モデリングの確率分布モデル

- ボルツマンマシン・制限ボルツマンマシン

磁性体

- 変分オートエンコーダ

- 敵対的生成ネットワーク

古典物理をベースにしている

- ノーマライズフロー

拡散過程

- 拡散モデル

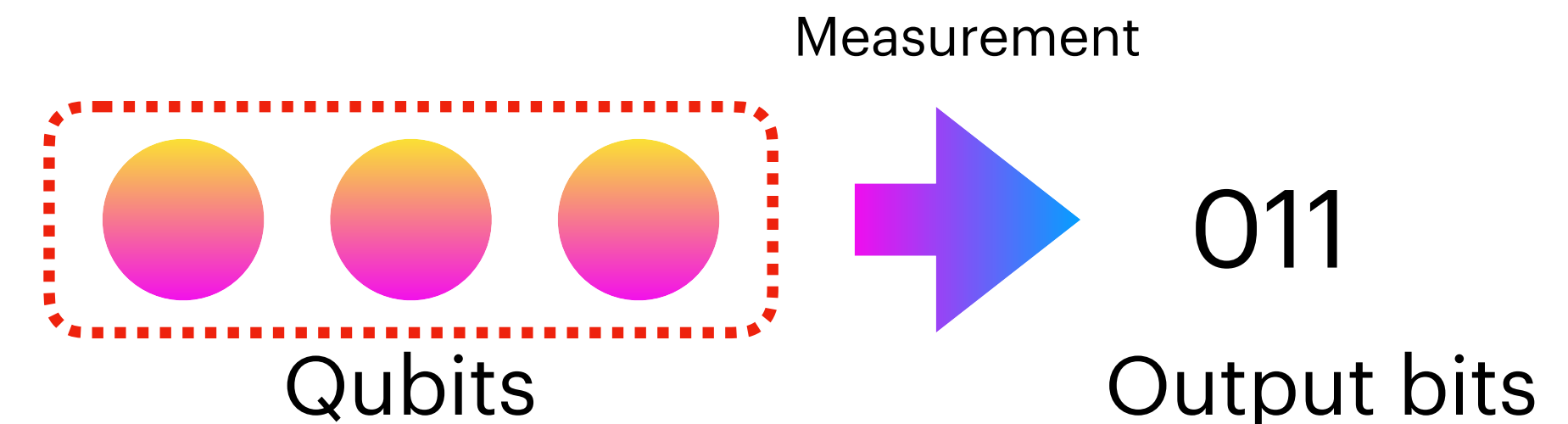
- ボルンマシン**

量子物理をベースにしている

量子状態の射影測定

$$p(\mathbf{x}) = |\psi(\mathbf{x})|^2$$

Z.-Y. Han, J. Wang, H. Fan, L. Wang, and P. Zhang,
Phys. Rev. X **8**, 031012 (2018).

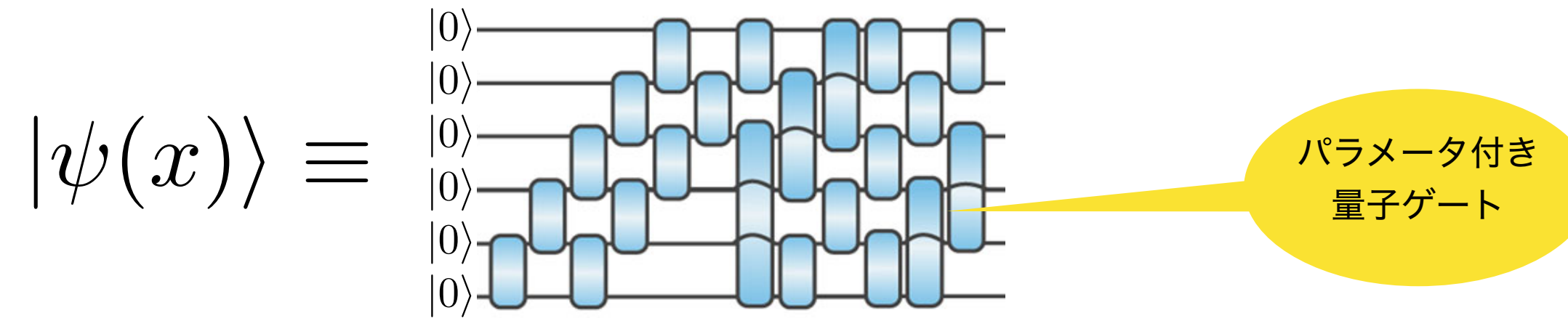


$$|\psi\rangle = \dots + c_{011}|011\rangle + \dots$$

$$P(011) = |c_{011}|^2$$

ボルンマシンの波動関数 $|\psi(x)\rangle$

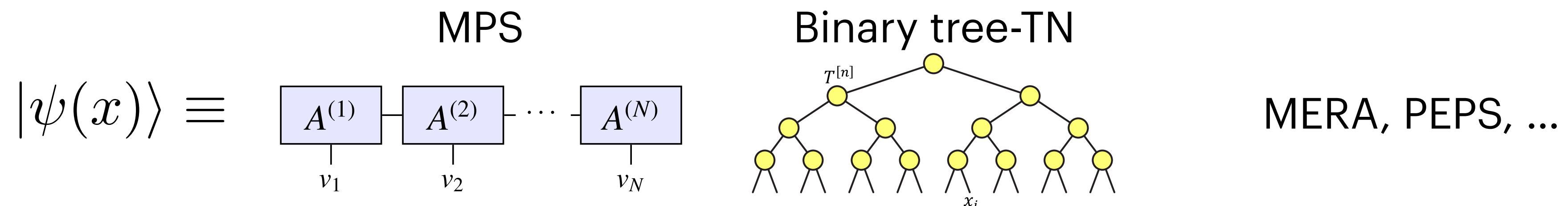
パラメータ化された量子回路



- Jin-Guo Liu and Lei Wang, "Differentiable learning of quantum circuit Born machines," *Physical Review A*, **98**, 062324(2018).
- Marcello Benedetti, *et al.*, "A generative modeling approach for benchmarking and training shallow quantum circuits," *npj Quantum Information*, **5**, 45(2019).
- Brian Coyle, *et al.*, "The Born supremacy: quantum advantage and training of an Ising Born machine," *npj Quantum Information*, **6**, 60(2020).
- Marcello Benedetti, *et al.*, "Variational Inference with a Quantum Computer," *Physical Review Applied*, **16**, 044057(2021).
- Manuel S Rudolph, *et al.*, "Synergistic pretraining of parametrized quantum circuits via tensor networks," *Nature Communications*, **14**, 8367(2023).
- Mohamed Hibat-Allah, *et al.*, "A framework for demonstrating practical quantum advantage," *Communications Physics*, **7**, 68(2024).

テンソルネットワーク (テンソル分解)

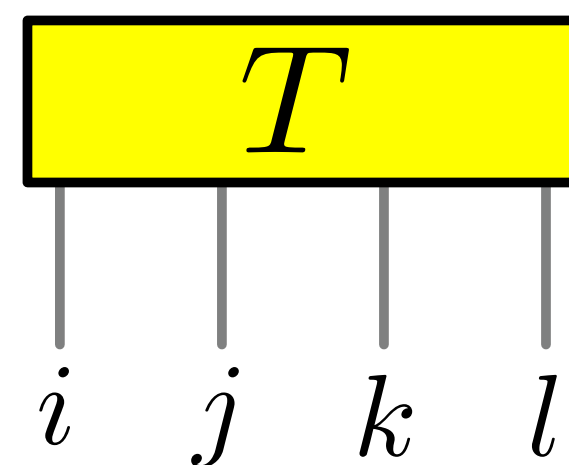
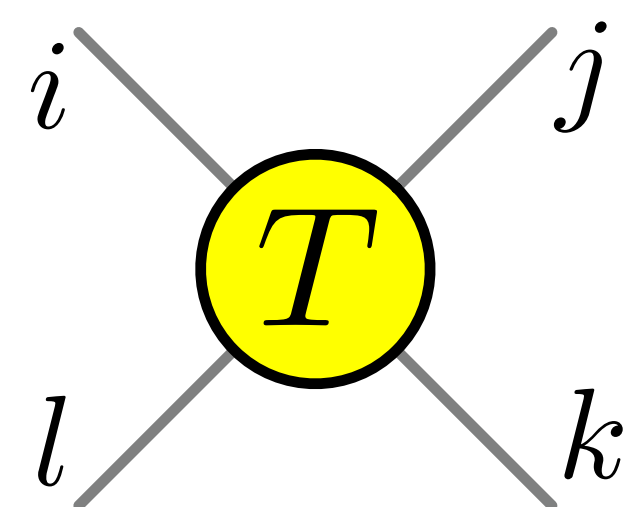
- Zhao-Yu Han, Jun Wang, Heng Fan, Lei Wang, and Pan Zhang, "Unsupervised Generative Modeling Using Matrix Product States," *Physical Review X*, **8**, 031012(2018).
- Song Cheng, Lei Wang, T. Xiang, and Pan Zhang, "Tree tensor networks for generative modeling," *Physical Review B*, **99**, 155131(2019).



テンソルとテンソル縮約演算を表すグラフィカルな表記方法

テンソル：多次元配列

例. T_{ijkl}



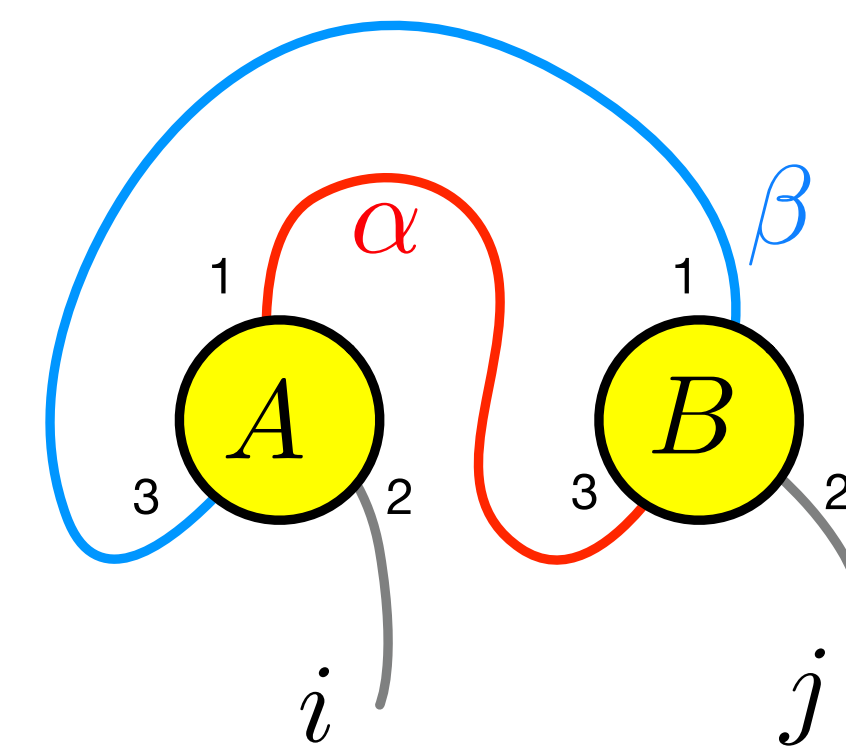
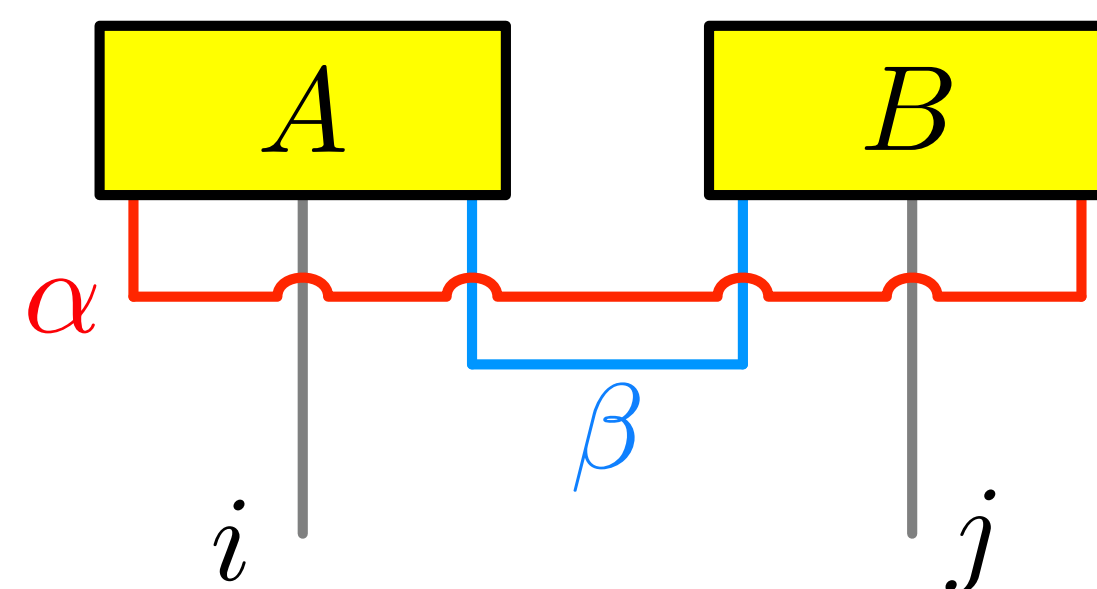
テンソルは円や四角形等
添え字は線

テンソル縮約

例.

$$C_{ij} \equiv \sum_{\alpha} \sum_{\beta} A_{\alpha i \beta} B_{\beta j \alpha}$$

縮約を取る添え字を表す線同士を結ぶ



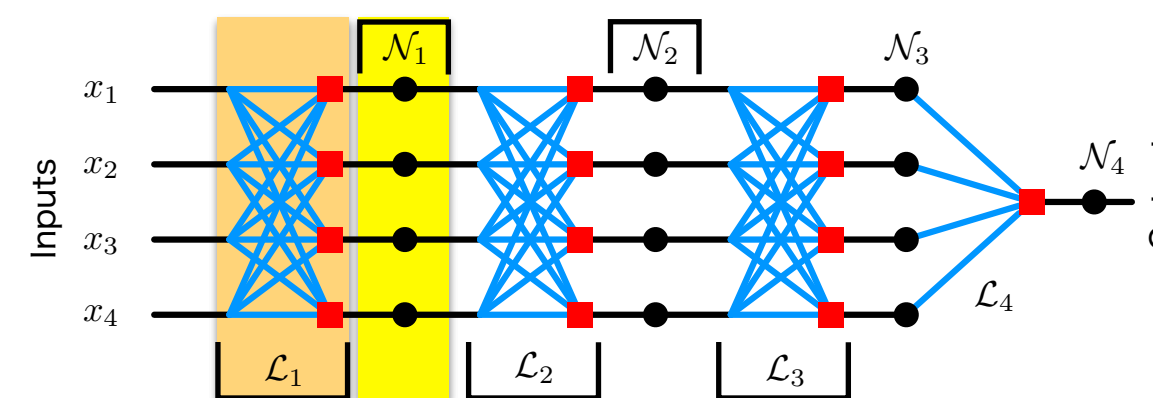
テンソルネットワーク

テンソルネットワークを用いた機械学習アルゴリズムへの応用

画像: Latorre (2005)

ニューラルネットワーク: Novikov, et al. (2015)

識別器: Stoudenmire and Schwab(2016)



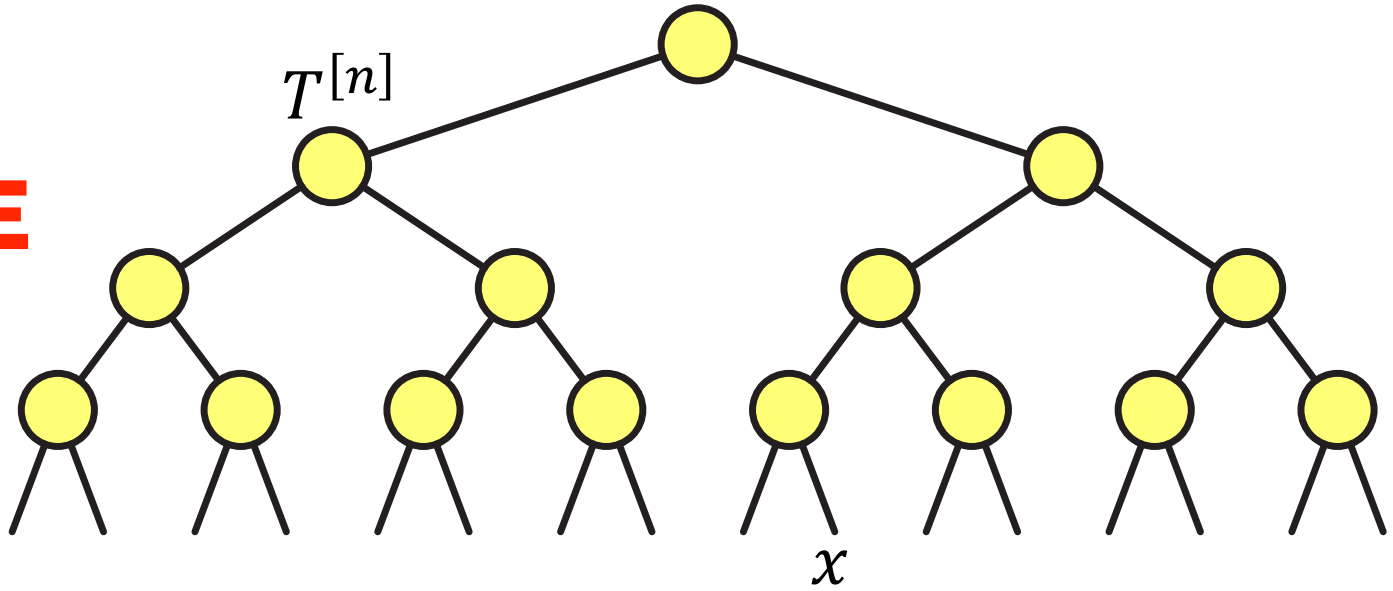
波動関数のテンソルネットワーク表現

$|\psi\rangle = \dots + c_{011}|011\rangle + \dots$ 量子振幅 C_{ijk} をテンソルとみなす

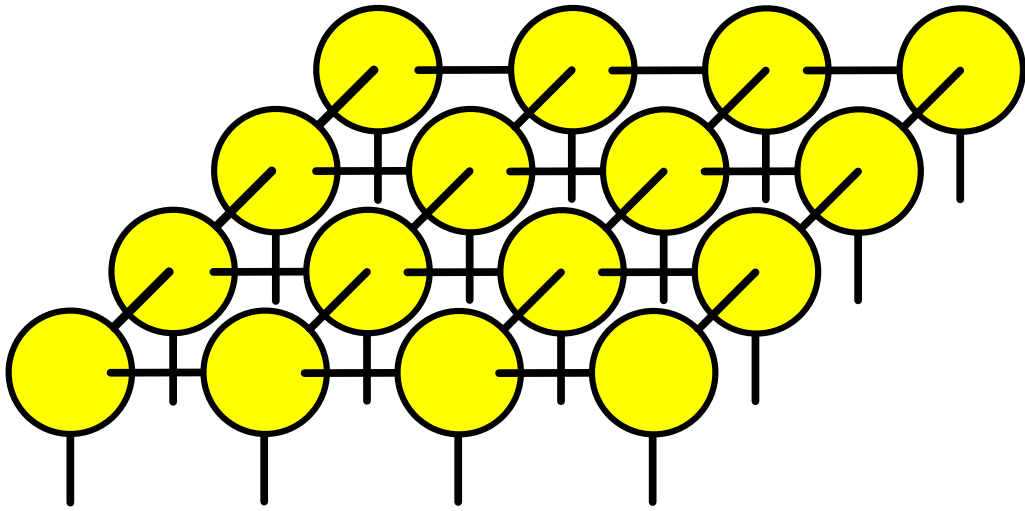
$\Psi(\mathbf{x}) =$  **MPS(Matrix Product State), TT(Tensor Train)**

エンタングルメントエントロピーのエリア則を満たす量子状態

Binary TREE



PEPS(Projected Entangled Pair States)



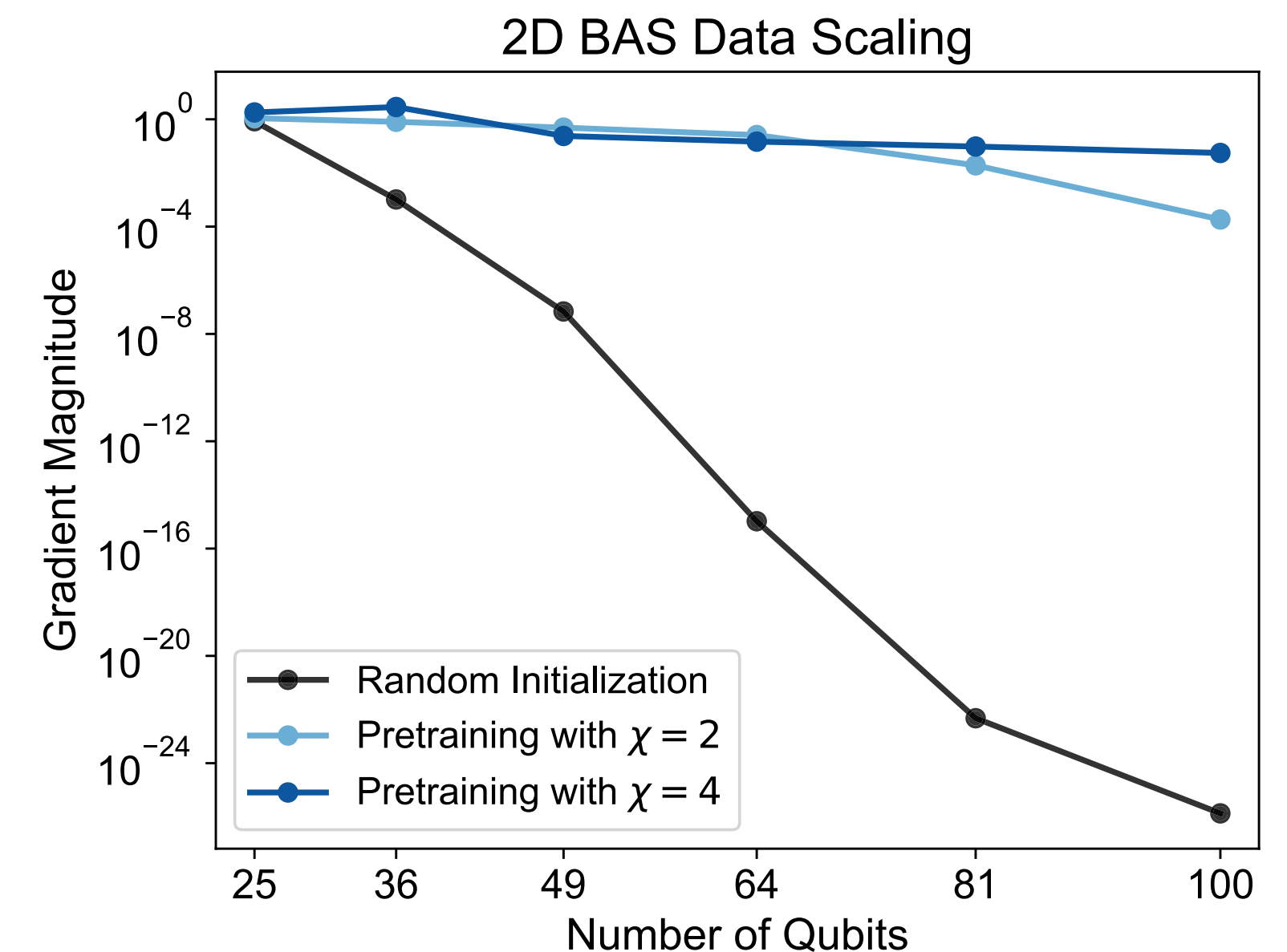
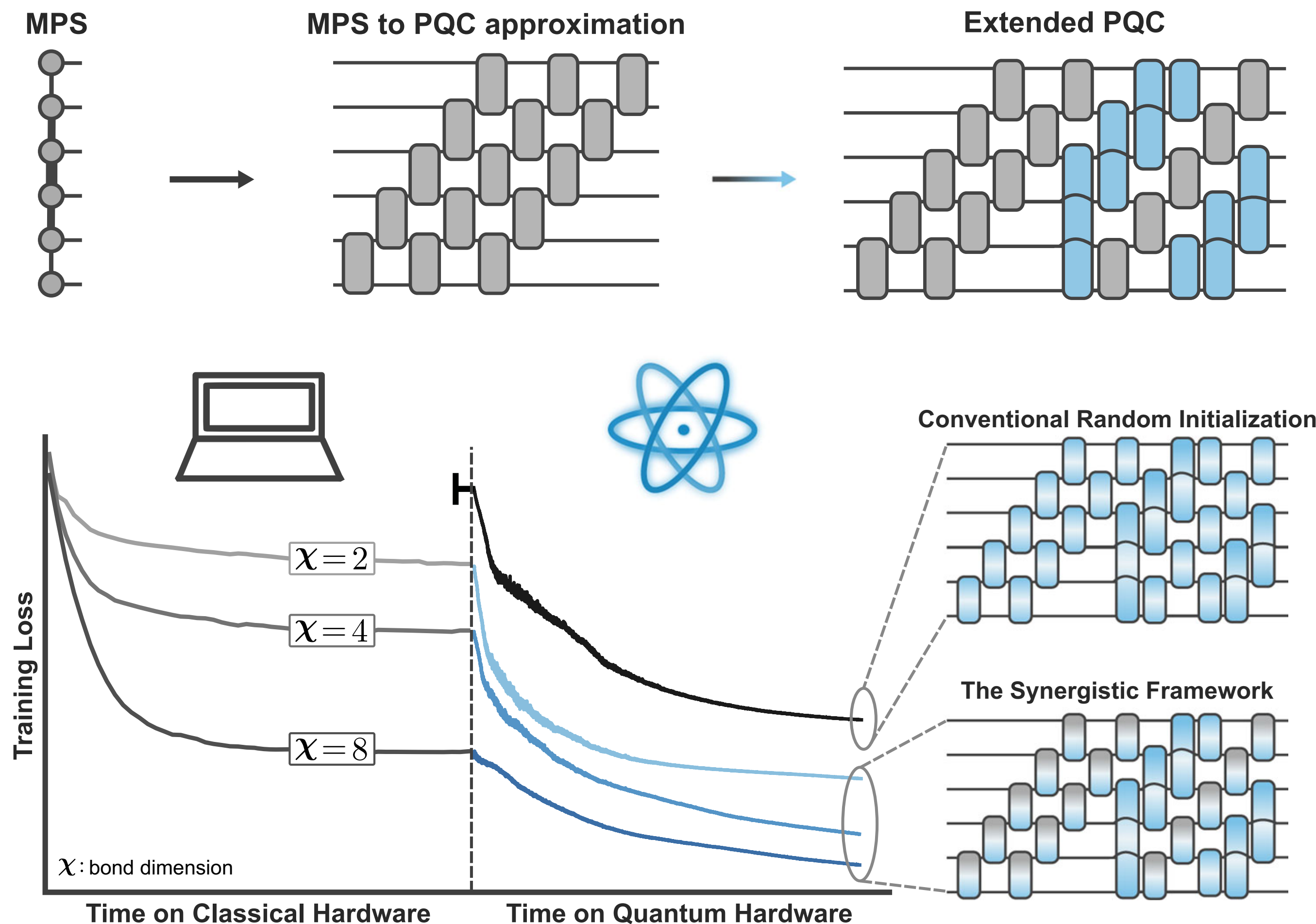
MERA
(Multiscale Entanglement Renormalization Ansatz)

テンソルネットワークで表現された波動関数はパラメータ数の大幅な削減により古典計算機でも高速に処理できる

テンソルネットワークと量子回路の組み合わせたボルンマシン

Manuel S Rudolph, et al., Nature Communications, **14**, 8367(2023).

テンソルネットワークとパラメータ化量子回路の統合アプローチ



組み合わせることで、量子回路の最適化における勾配消失問題を解決できる

ネットワーク構造と性能の関係

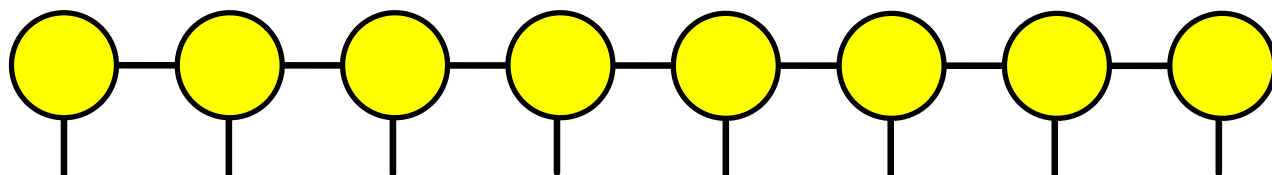
ボルンマシンの損失関数

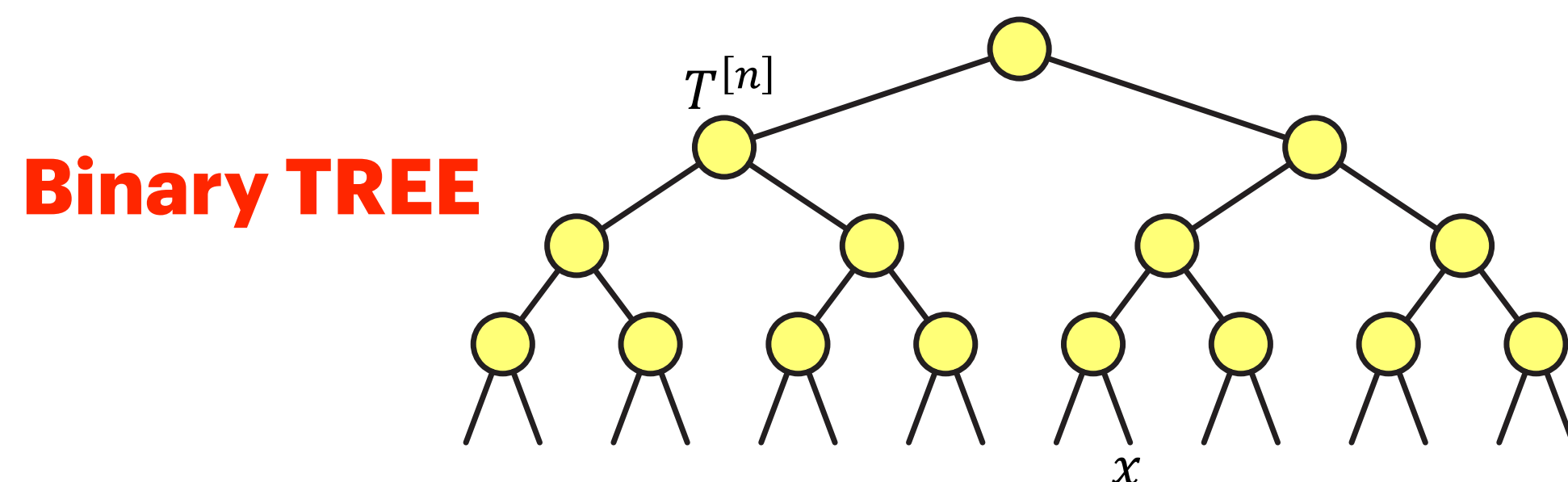
負の対数尤度 **Negative Log-likelihood (NLL)**

= **KL-divergence - entropy of data**

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{|\mathcal{T}|} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{T}} \ln[p(\mathbf{x})] = -\frac{1}{|\mathcal{T}|} \sum_{\mathbf{x} \in \mathcal{T}} \ln |\Psi(\mathbf{x})|^2$$

ボルンマシンの波動関数のテンソルネットワーク表現

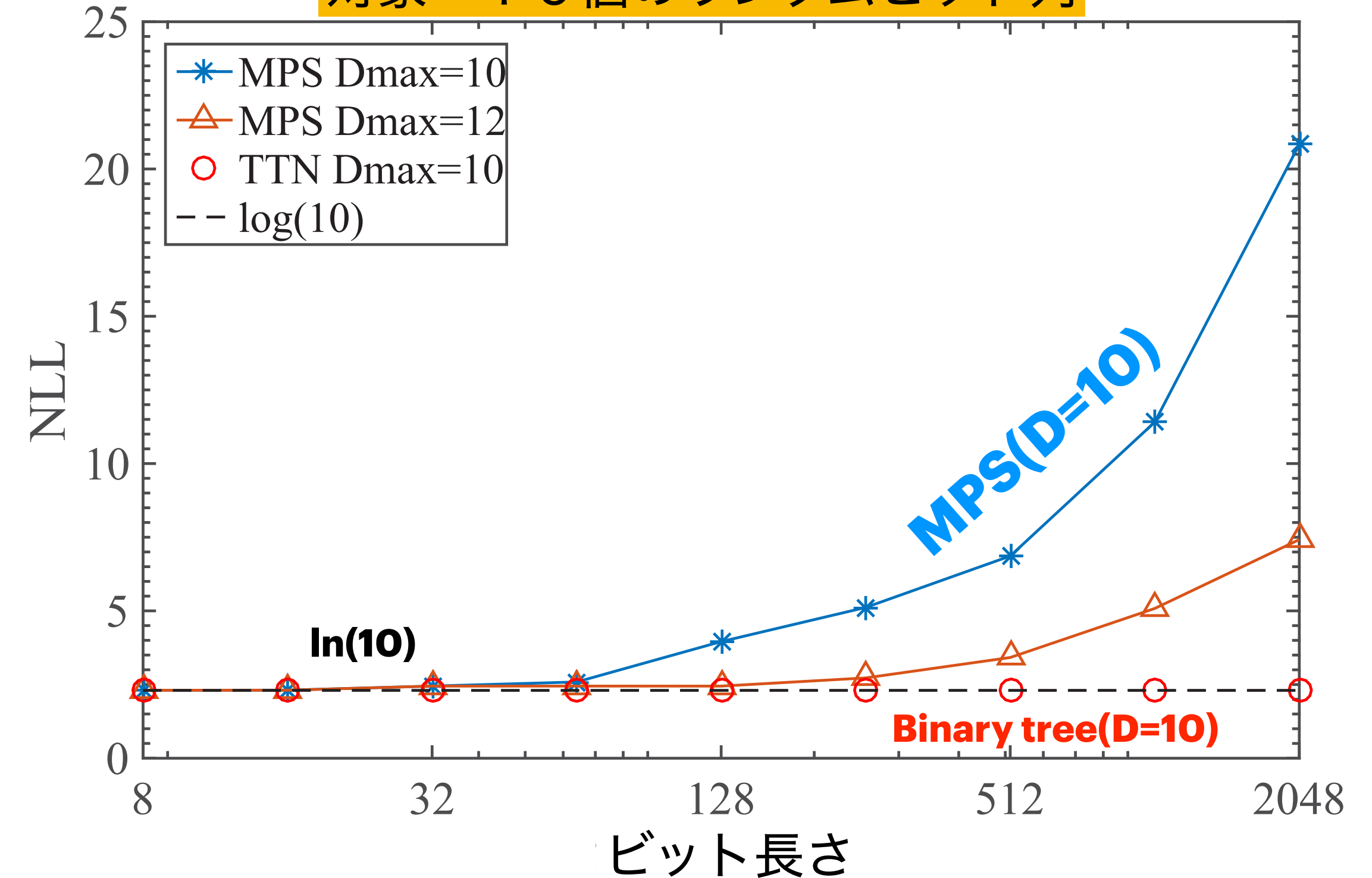
$\Psi(\mathbf{x}) =$ **MPS** 



S. Cheng, L. Wang, T. Xiang, and P. Zhang, Phys. Rev. B, **99**, 155131(2019).

ボルンマシンの負の対数尤度 (NLL) の学習結果

対象：10個のランダムビット列



バイナリー木の場合だけ、最適値に到達する

データに関する知識とテンソルネットワーク構造

S. Cheng, L. Wang, T. Xiang, and P. Zhang, Phys. Rev. B, **99**, 155131(2019).

データに対する知識の活用

例、手書き文字画像

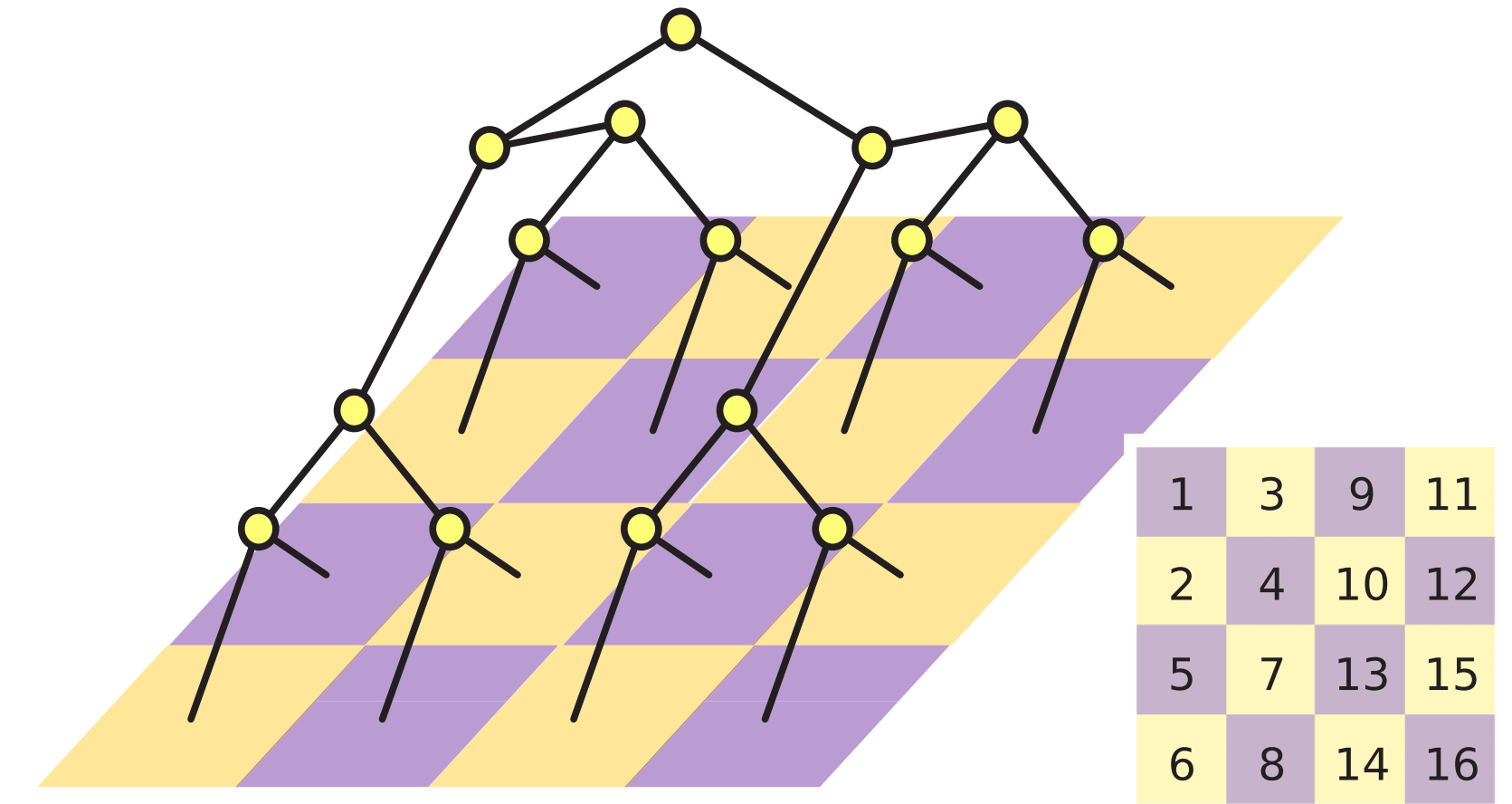


ピクセル間の幾何学的構造を反映したネットワーク構造

1	2	3	4
5	6	7	8
9	10	11	12
13	14	15	16

MPS

性能が高い

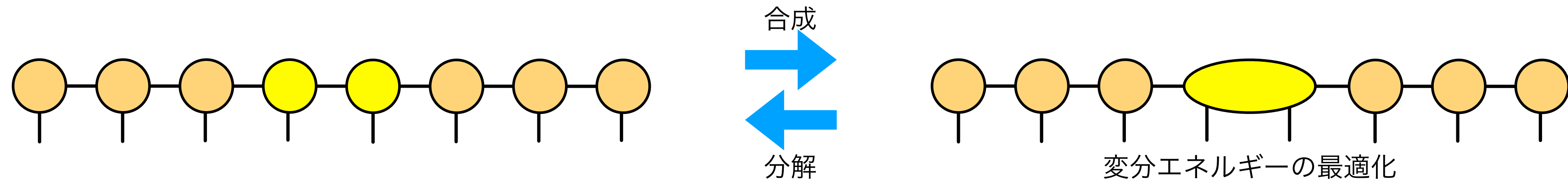


Binary tree TN with 2D structure

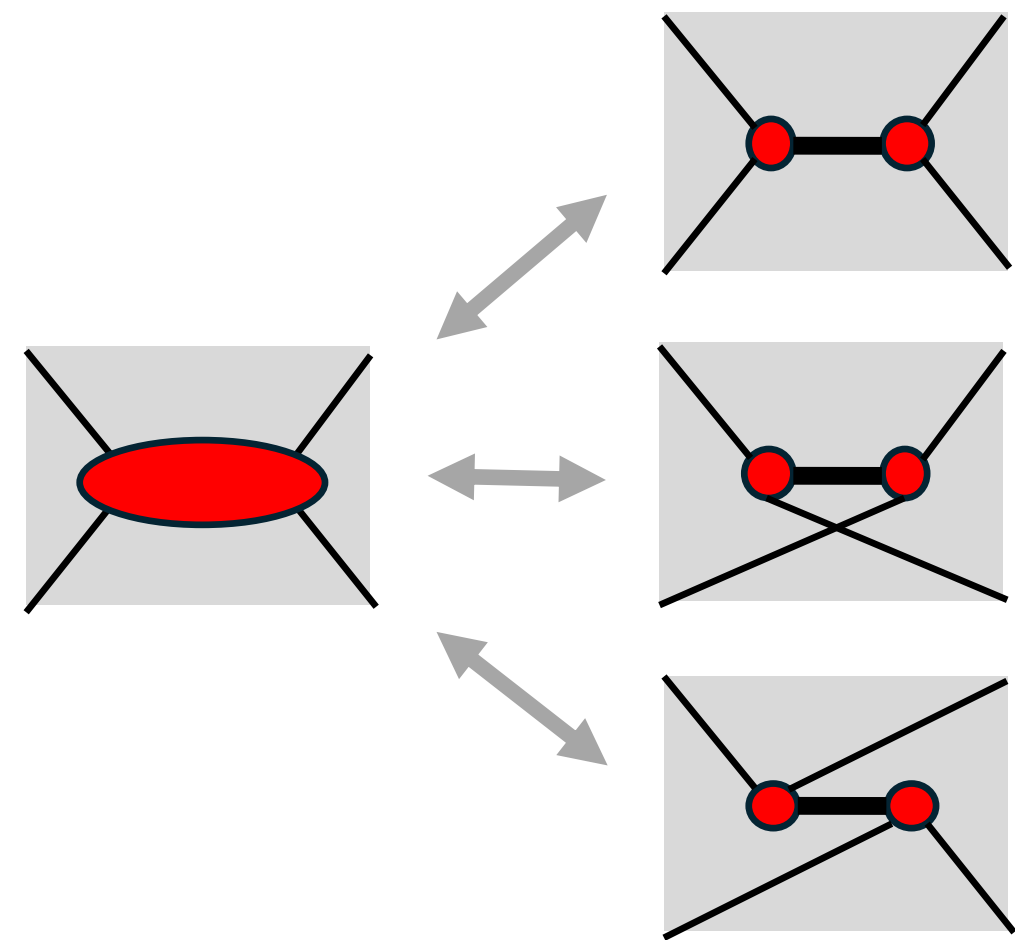
知識がないデータに対しては、どのようにネットワーク構造を作ればいいのか？

ネットワーク構造の局所的な組み替え

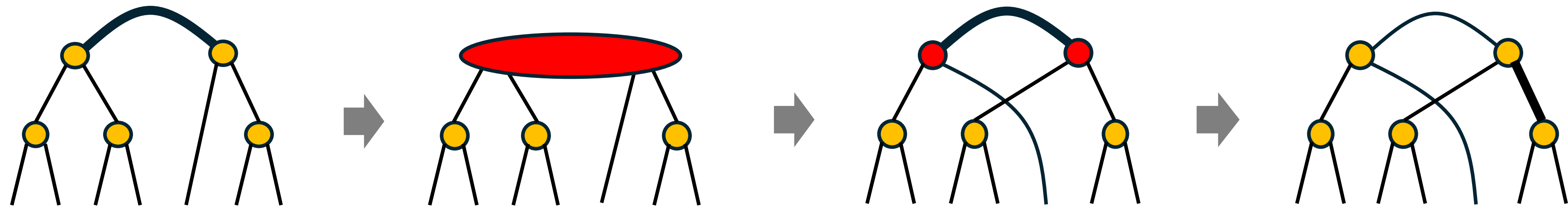
密度行列繰り込み群法の2サイト更新 (White, 1992)



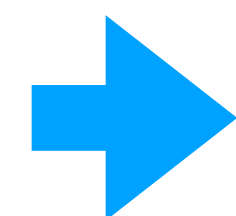
合成テンソルの分解の仕方



枝の再接続による木構造の更新アルゴリズム



一般的な木構造を持つネットワーク構造を組み替えることが可能



基底状態に対するツリーテンソルネットワーク変分法への応用

古典相互情報量とエンタングルメント

古典相互情報量(Classical Mutual Information)

2つの確率変数群の間の相関を定量化

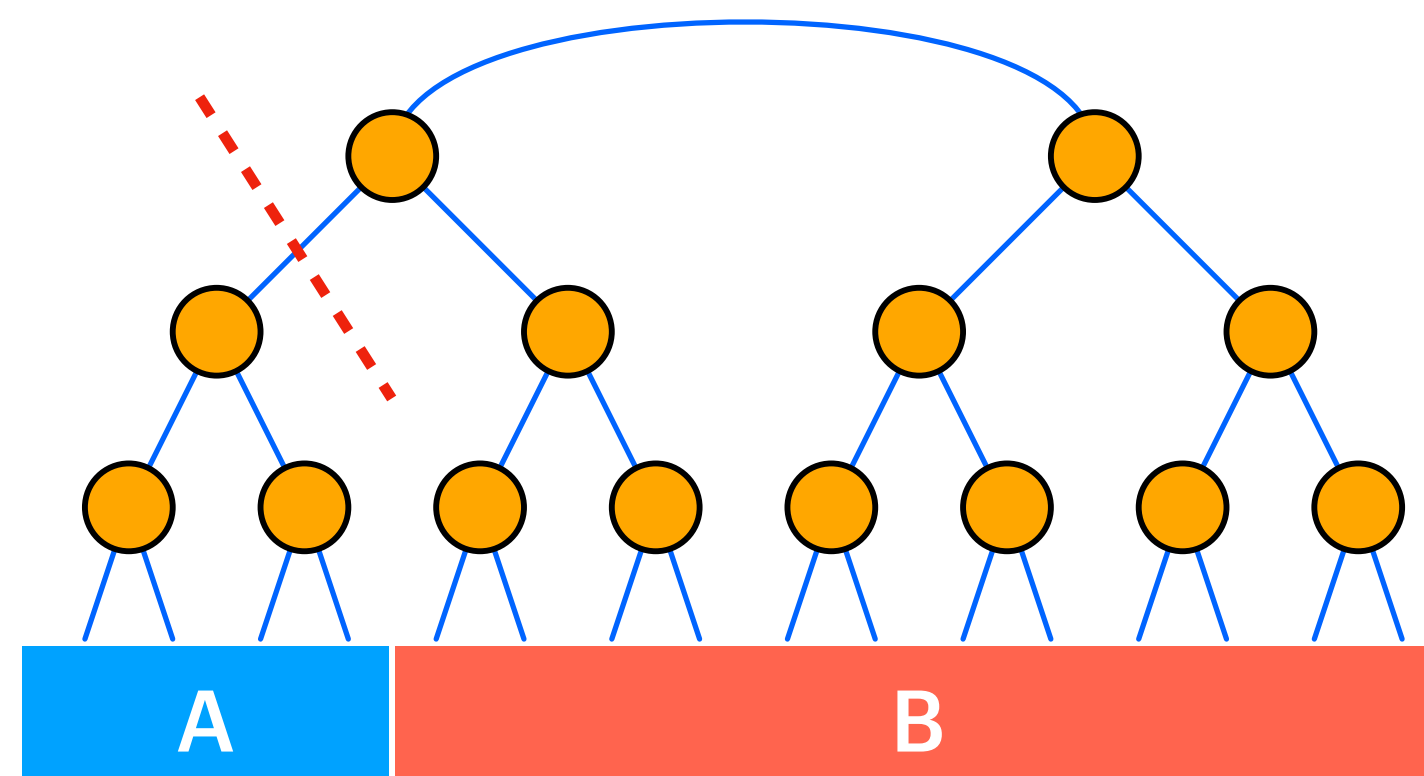
$$I(A : B) = \sum_{(a,b)} P(a,b) \ln \left[\frac{P(a,b)}{P(a)P(b)} \right] \leq \text{E.E.}$$

Entanglement entropy

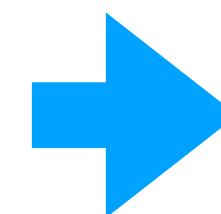
Convy, et al. Machine Learning: Science and Technology **3**, 015017 (2022).

木のボンド相互情報量(Bond MI)

ボンドを流れる情報の流れを定量化



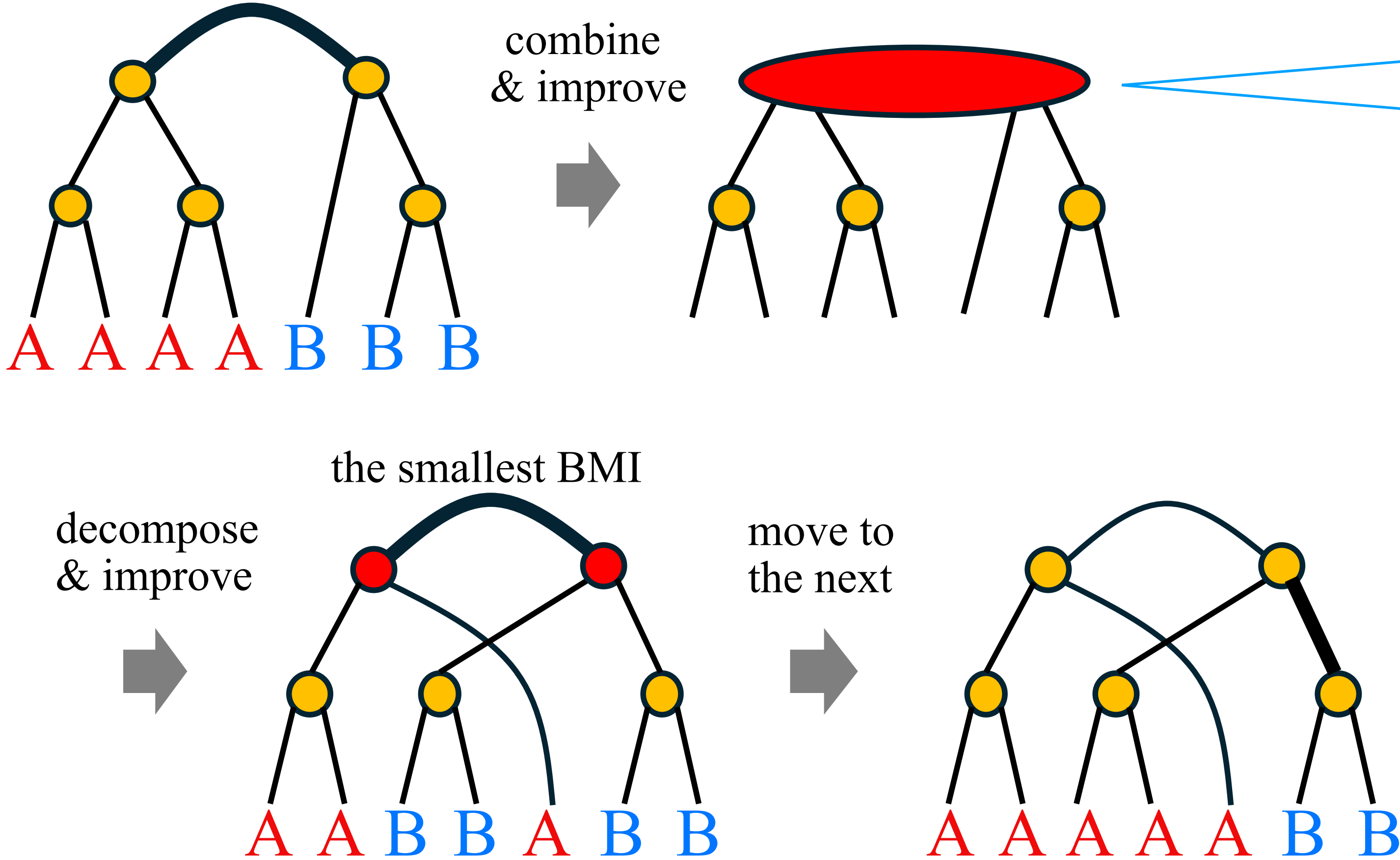
$$I(A : B) \leq \text{E.E.} \leq \ln(D) \quad \text{D:ボンド次元}$$



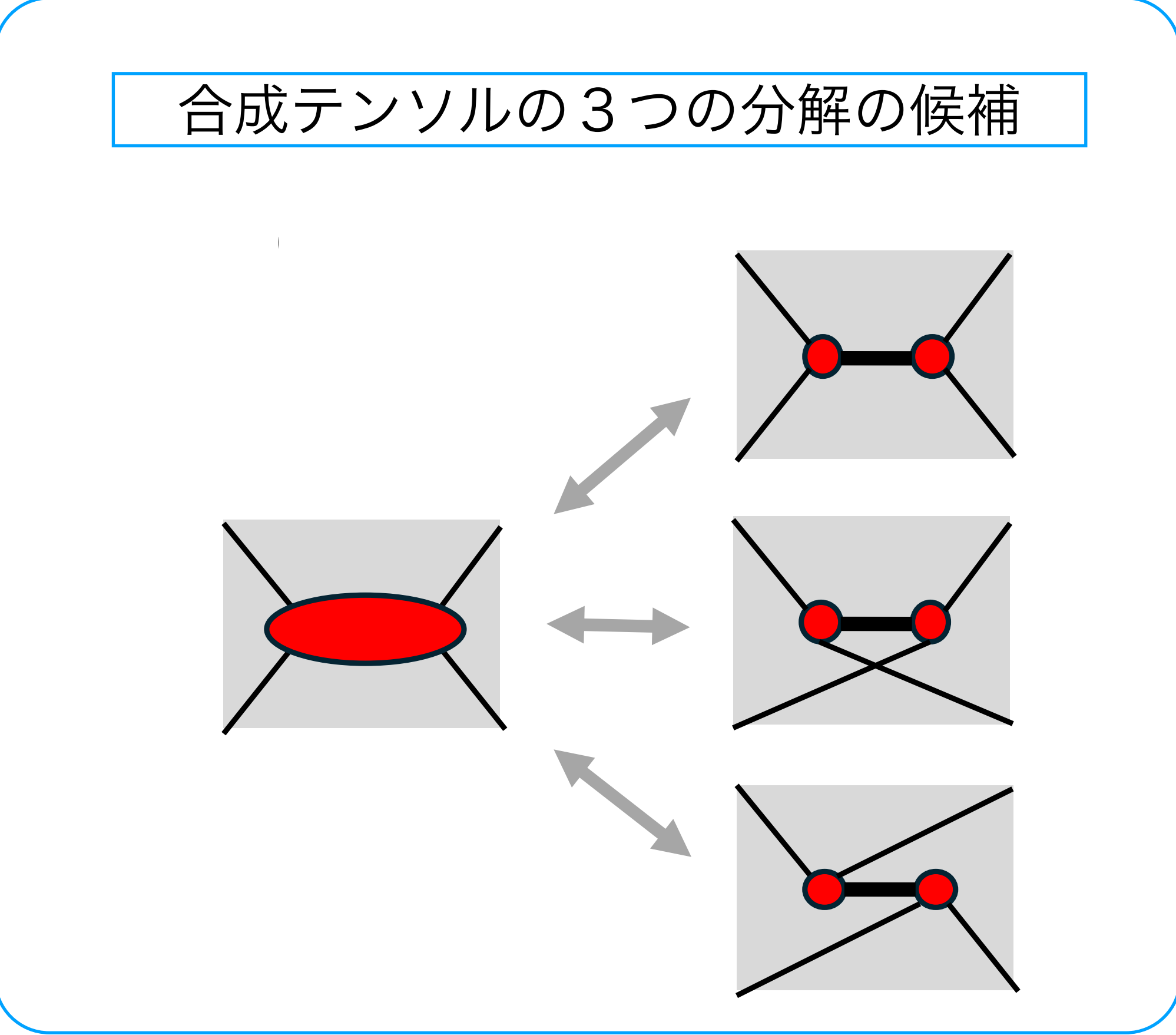
合成テンソルの分解時に最小のBMIを持つ分解を選択する方が良い

適応的テンソル木(Adaptive Tensor Tree)による生成モデル

アルゴリズム



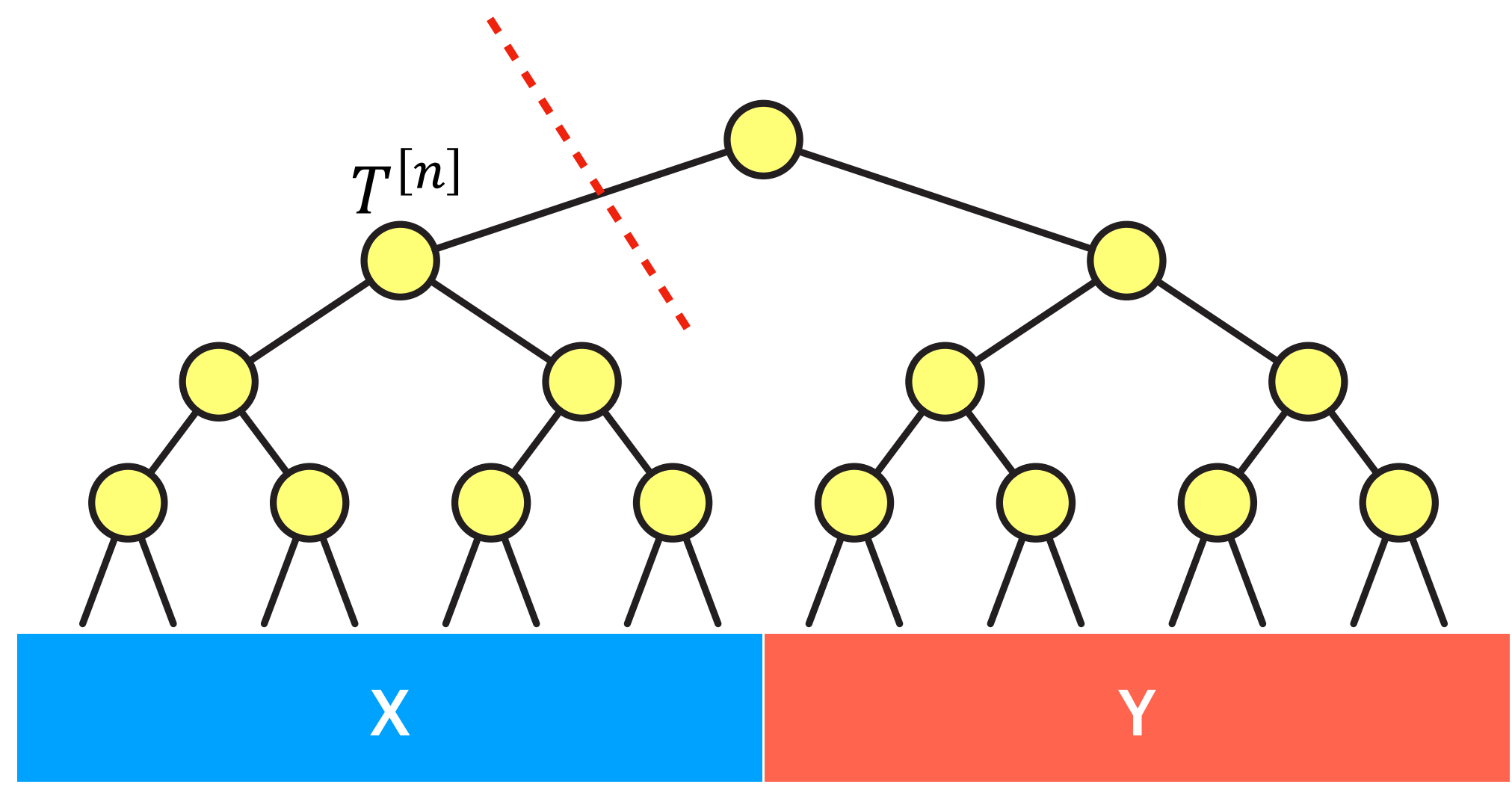
合成テンソルの3つの分解の候補



古典相互情報量の統計的評価

$$\text{MI} = \sum_{X,Y} P(X,Y) \ln \left[\frac{P(X,Y)}{P(X)P(Y)} \right] \quad \rightarrow \quad \text{MI} \approx \frac{1}{M} \sum_{\substack{(X_i, Y_i) \in \mathcal{T} \\ 1 \leq i \leq M}} \ln \left[\frac{P(X_i, Y_i)}{P(X_i)P(Y_i)} \right]$$

データサンプルによる平均

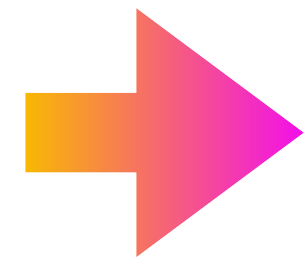


木構造をもつテンソルネットワークには
カノニカルフォームがある

ツリーテンソルネットワークの場合、サンプルに対する結合確率や
周辺化された分布の確率の値の計算ができる

適応的テンソル木アルゴリズムの適用例

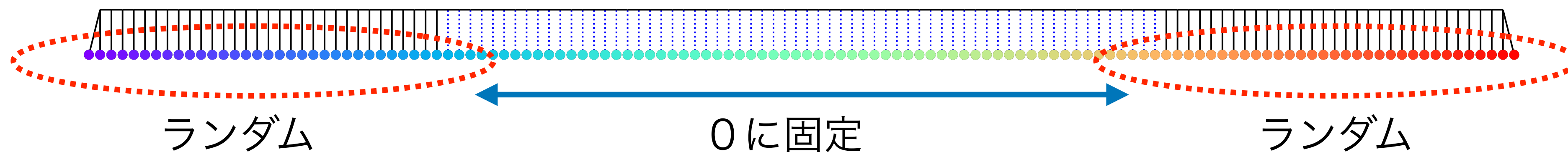
- 長距離の相関のあるランダムビット列
- 手描き文字画像 (QMNIIST)
- ベイジアンネットワーク
- S&P500インデックスにおける株価の変動



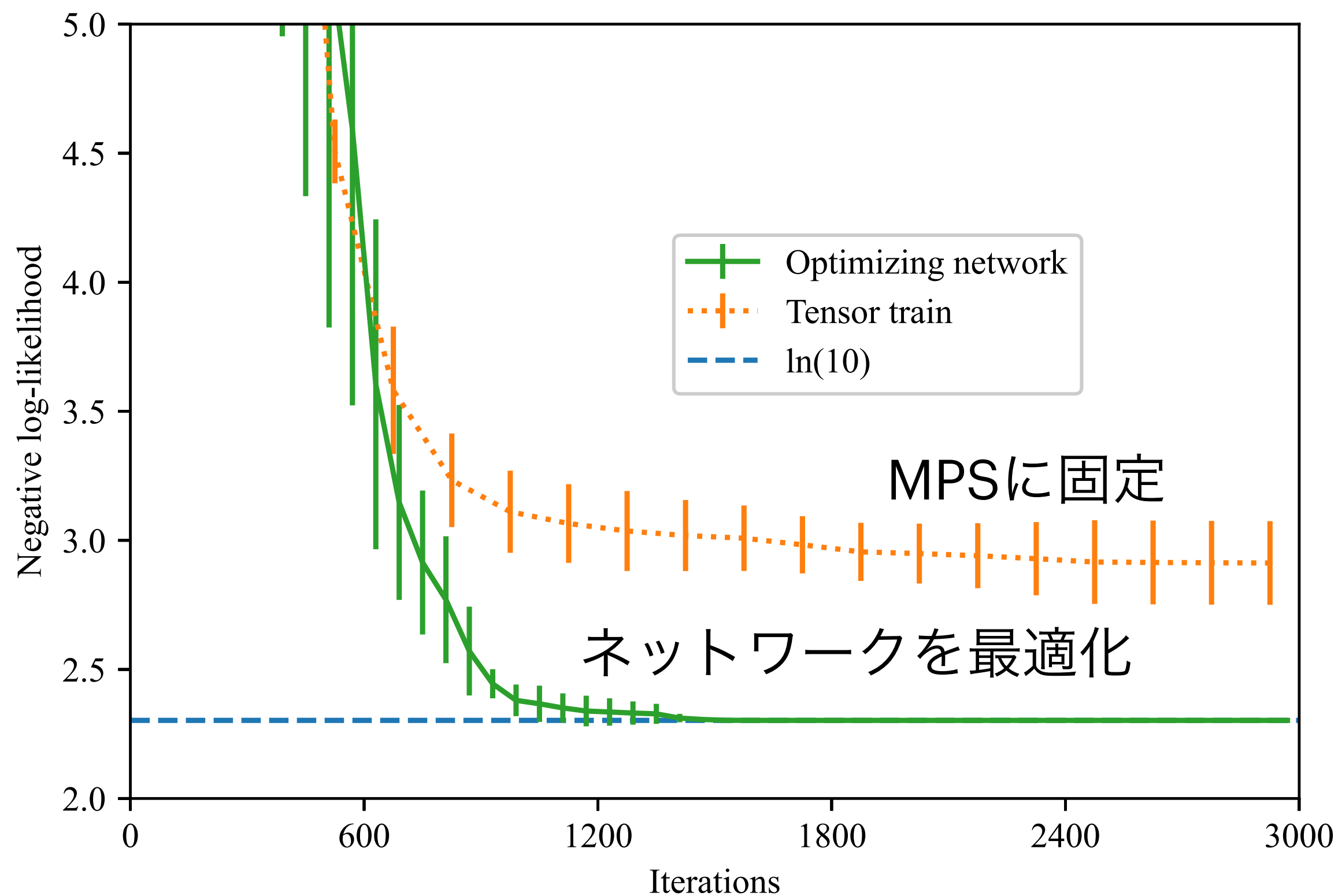
テンソル木がデータ内の関係性を自動的に抽出

長距離の相関があるランダムビット列への適用例

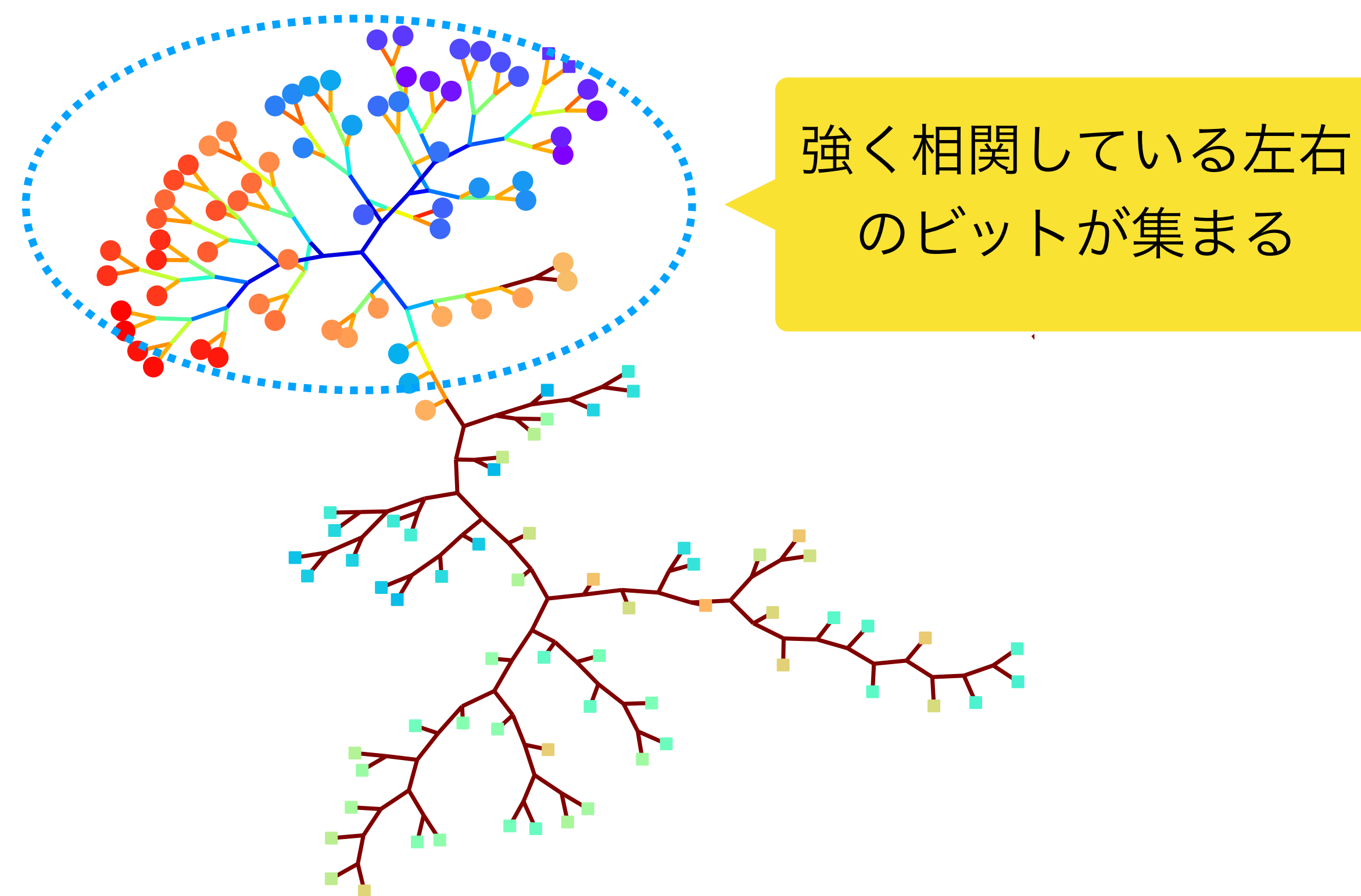
データ：10個のランダムビット列



学習過程での負の対数尤度

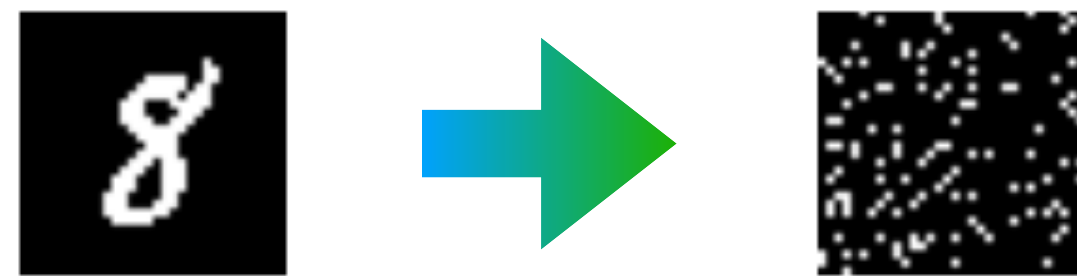


最適化されたネットワーク構造

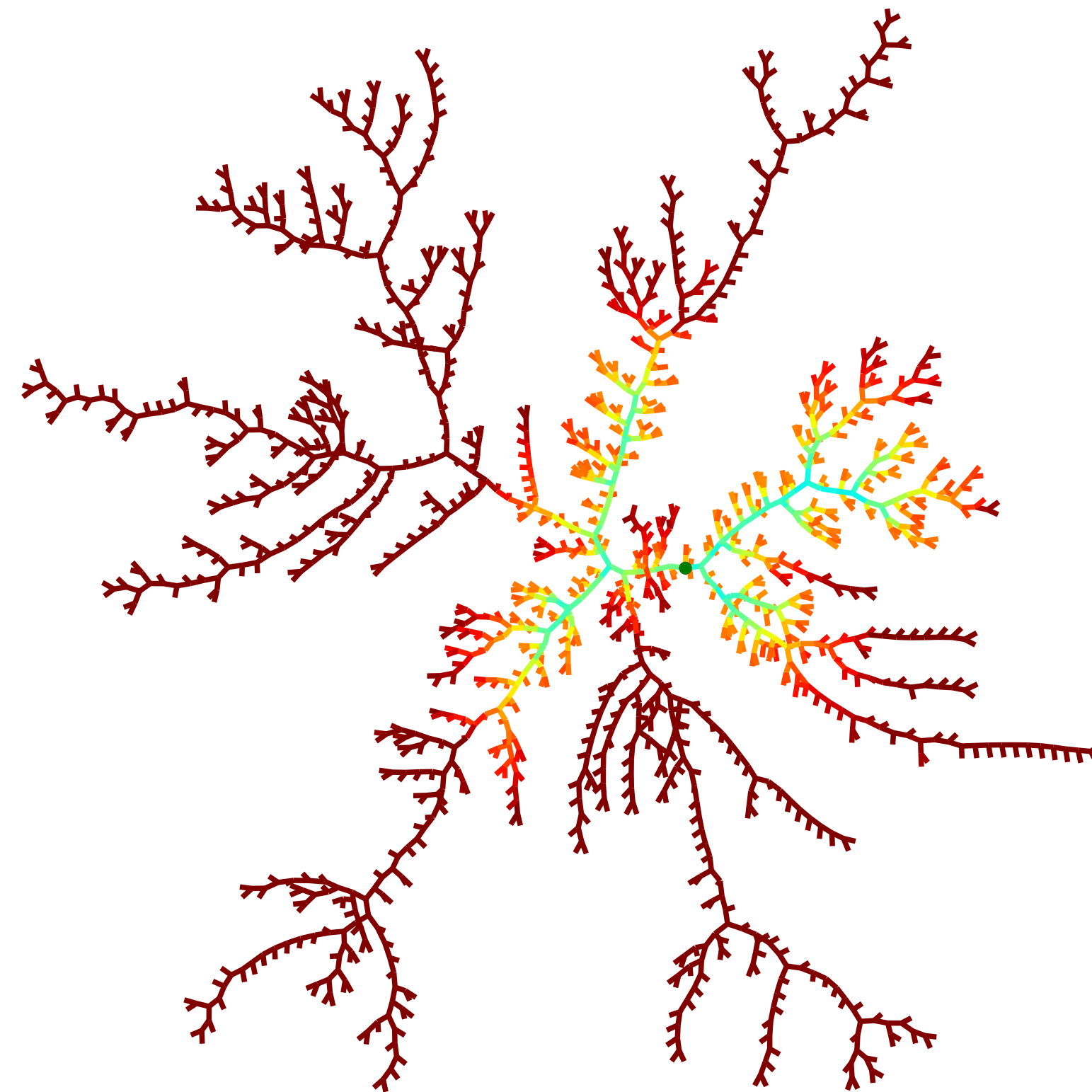


手書き数字の画像データセット(QMNIST)への適用例

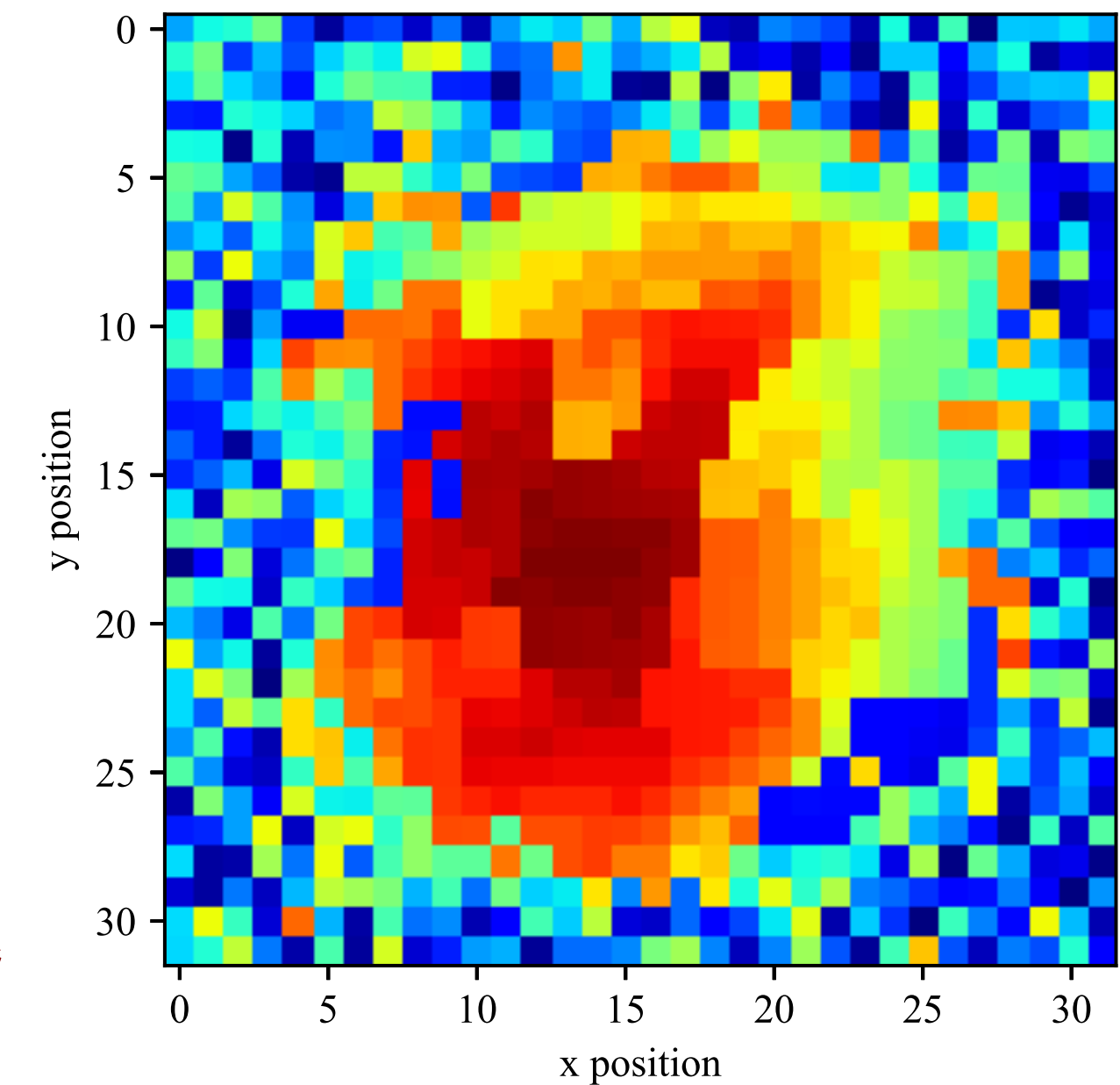
データのピクセルの位置をシャッフル



最適化されたネットワーク構造

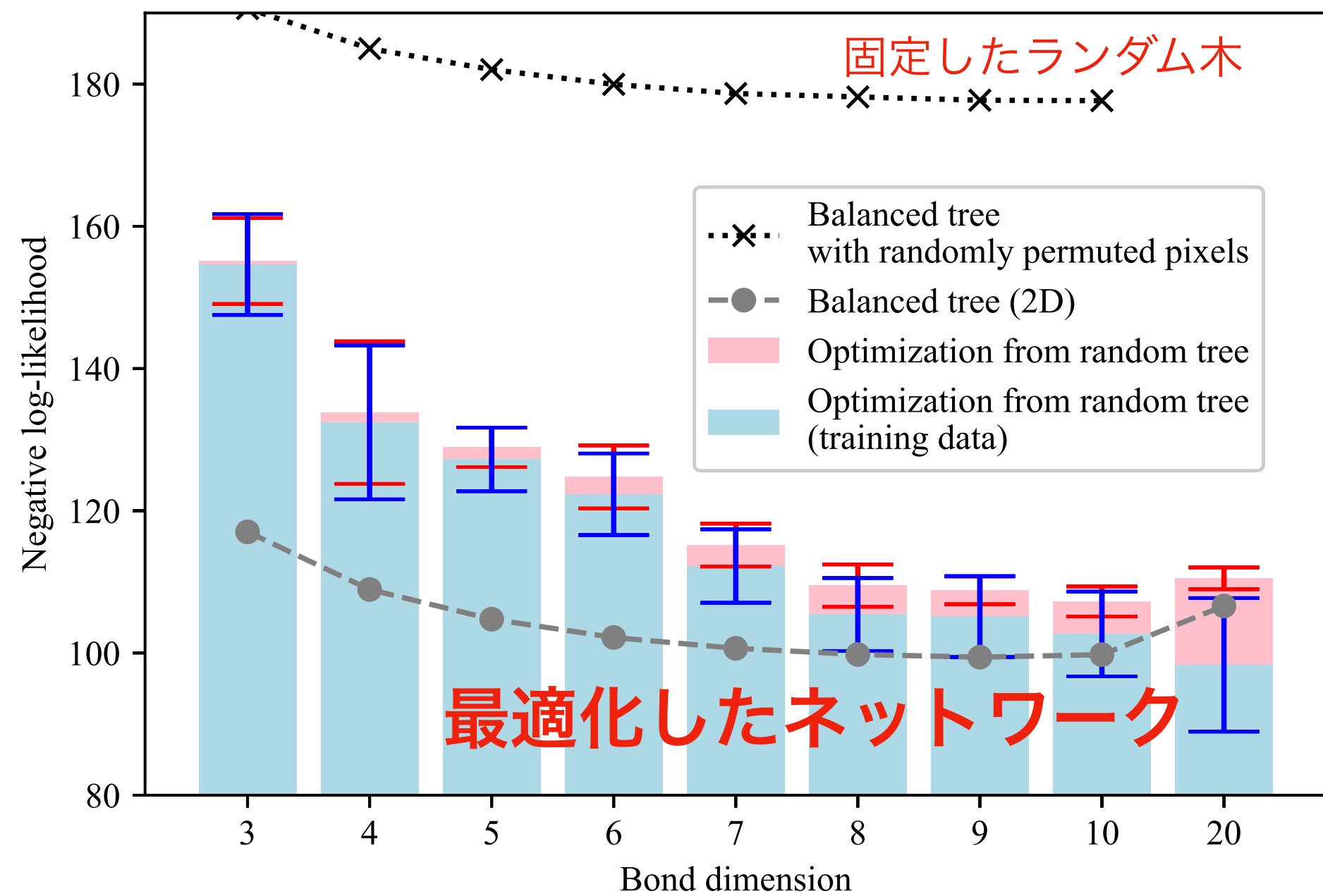


ネットワーク中心からの距離のランキング



強く相関する中央付近のピクセルが集中

負の対数尤度



適応的テンソル木アルゴリズムは確率変数間の関係を自動的に取り出してネットワーク構造に反映

統計的な依存関係を持つデータへの適用例

グラフィカルモデル
(ベイジアンネットワーク)

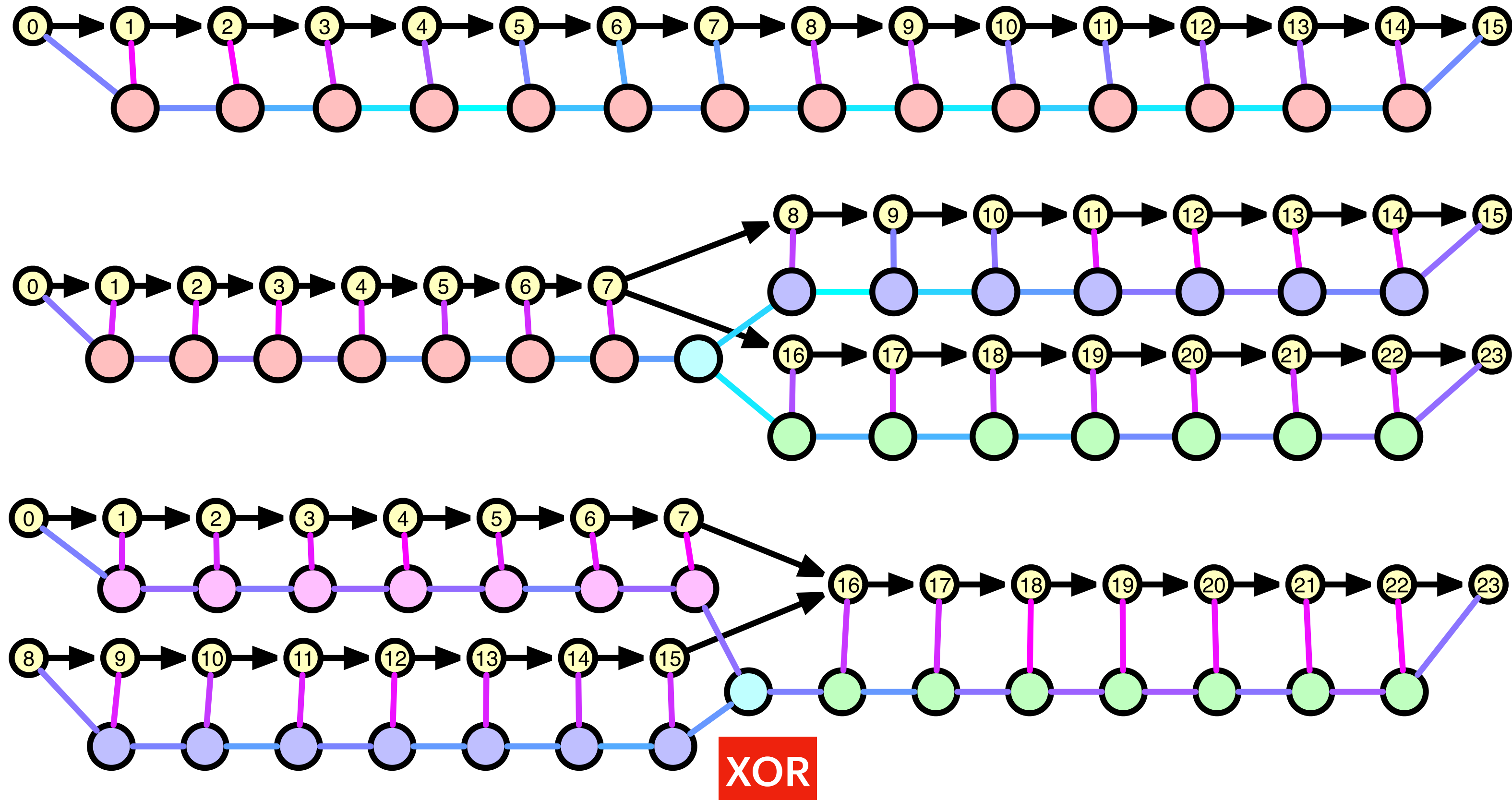
$$P_{\text{data}}(\mathbf{x}) = \prod_i P(x_i | \{x_p\}_{p \in \text{Parent}})$$

確率変数同士の依存関係



$$P(X_2 | X_1) = r\delta_{X_2, X_1} + (1 - r)(1 - \delta_{X_2, X_1})$$

結果 (相関係数 $r=0.8$)



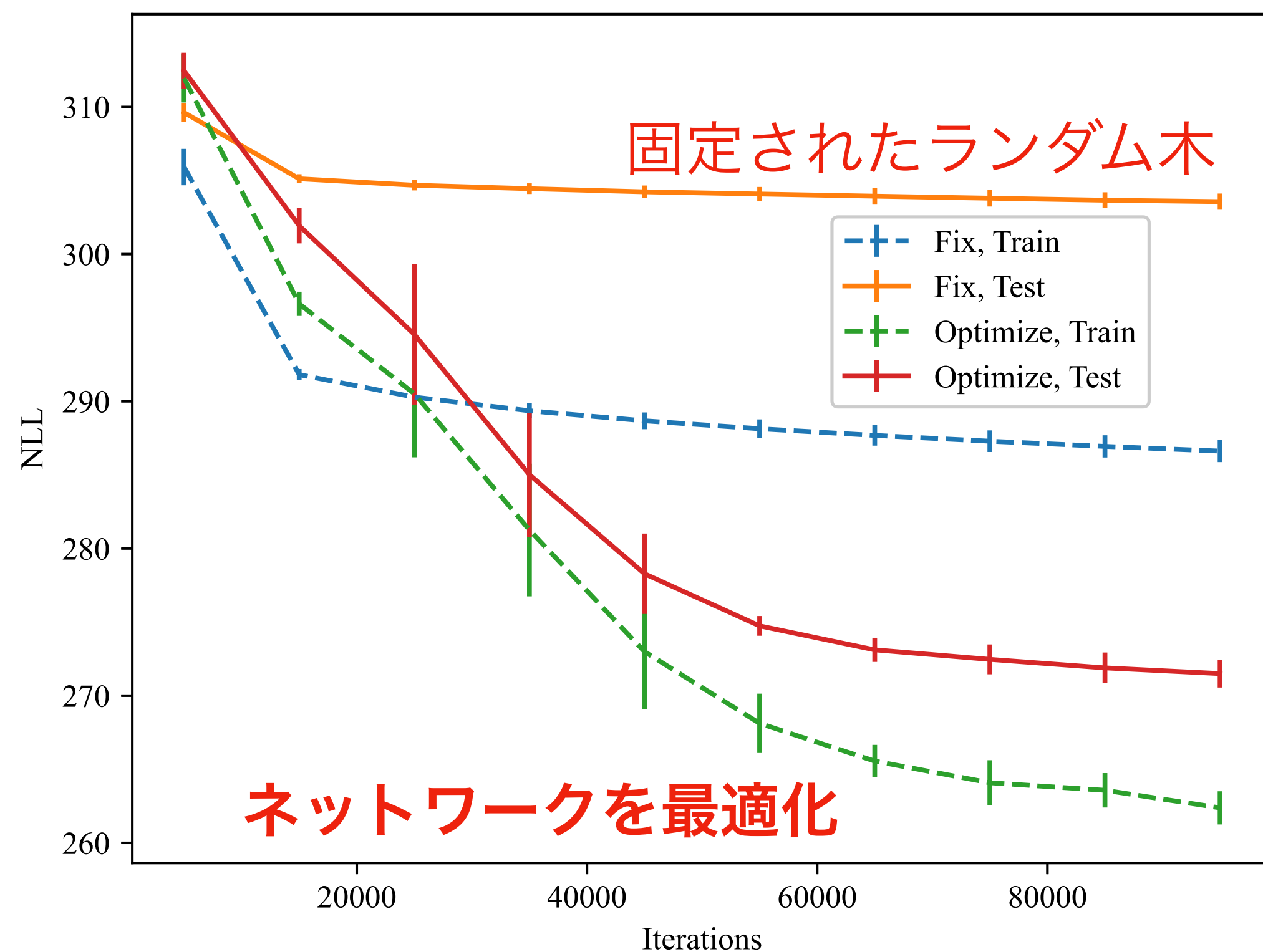
適応的テンソル木アルゴリズムはベイジアンネットワークの依存関係を再現

S&P500インデックス中の株価の変動データへの適用例

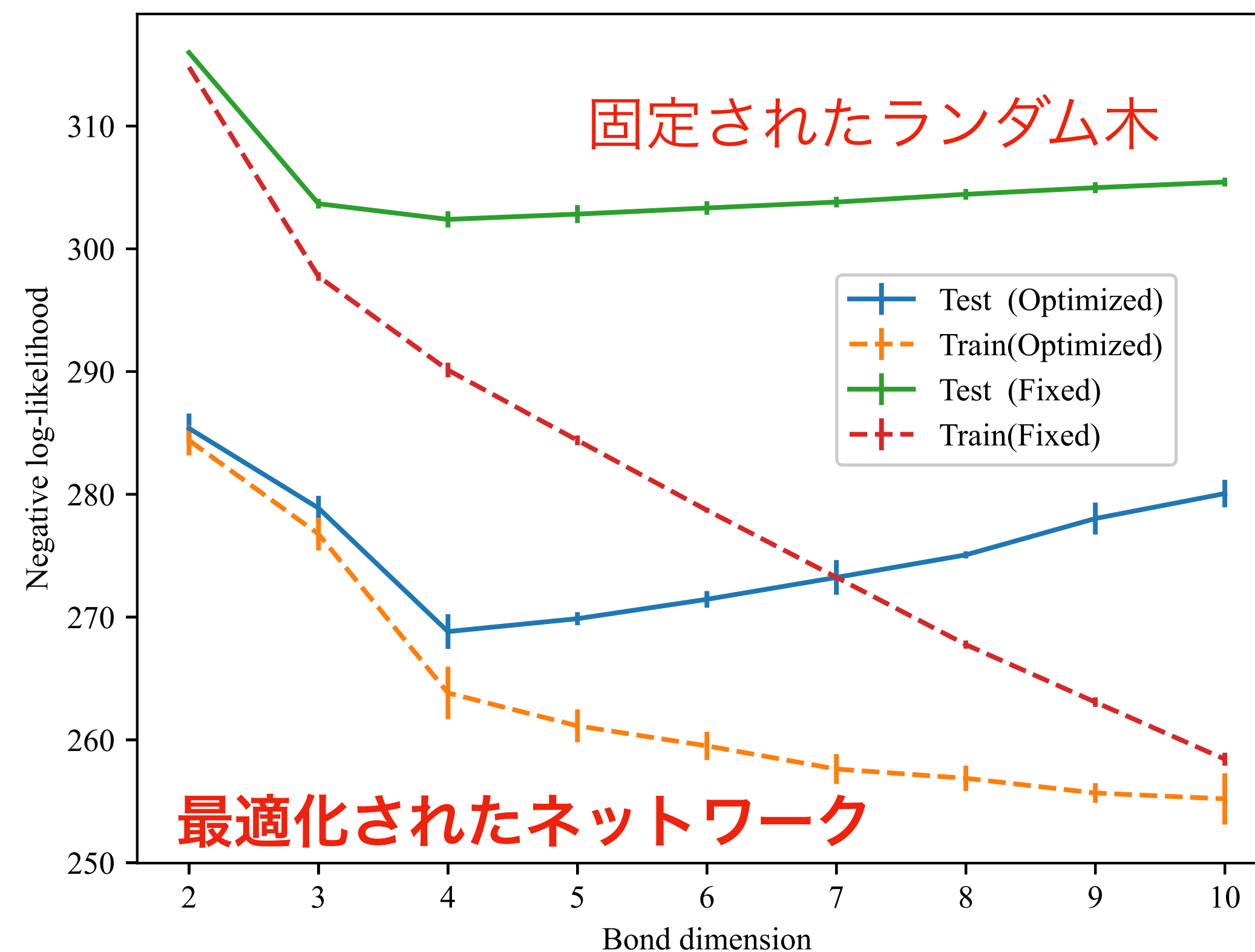
データ: 株価の変動をバイナリ化

株価の平均変動率より大きい場合に1、そうでなければ0

学習過程での負の対数尤度



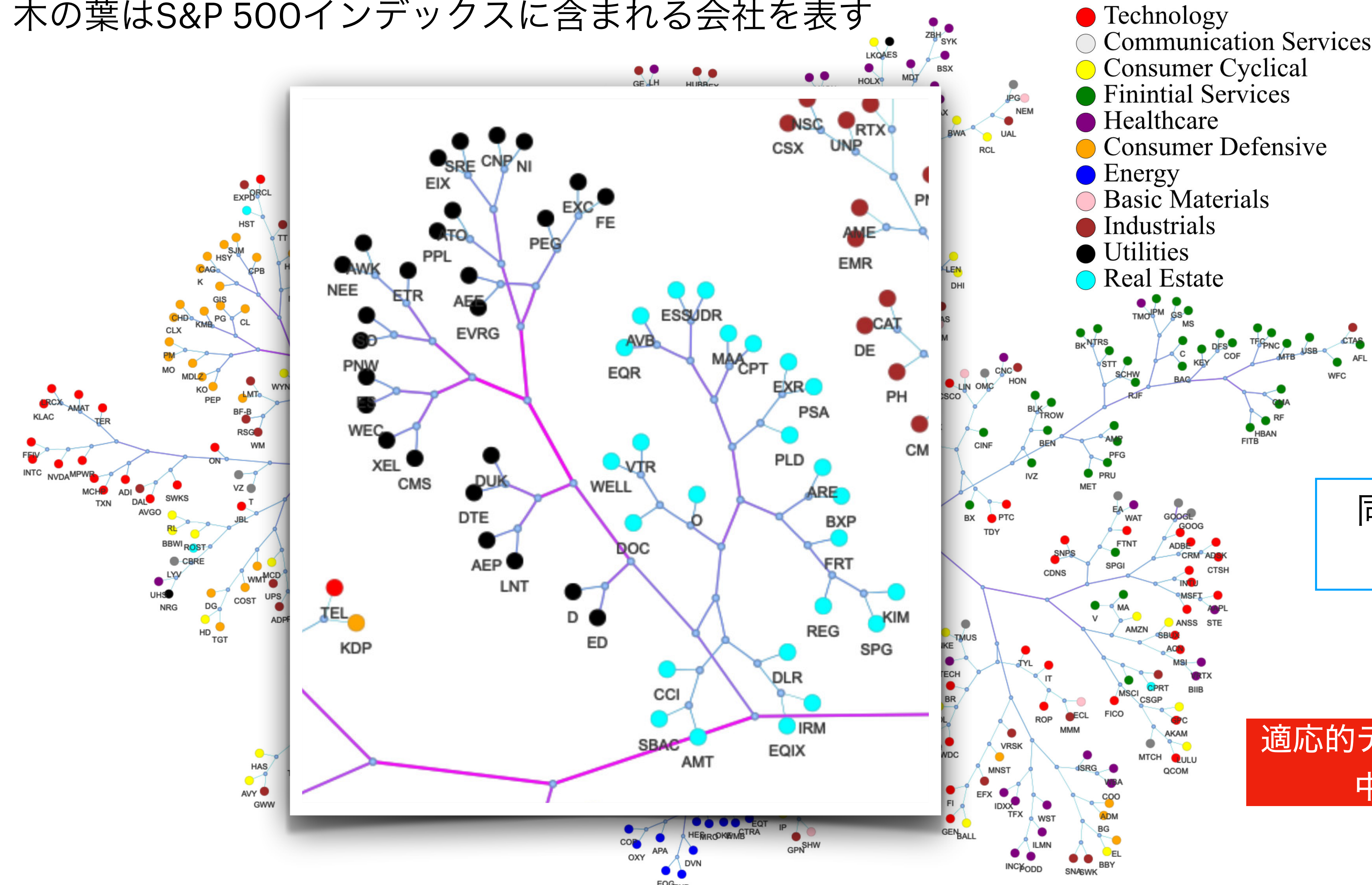
ボンド次元と負の対数尤度



最適化されたネットワークの方が良い性能

S&P500インデックスの株価変動率データに最適化されたネットワーク構造

木の葉はS&P 500インデックスに含まれる会社を表す



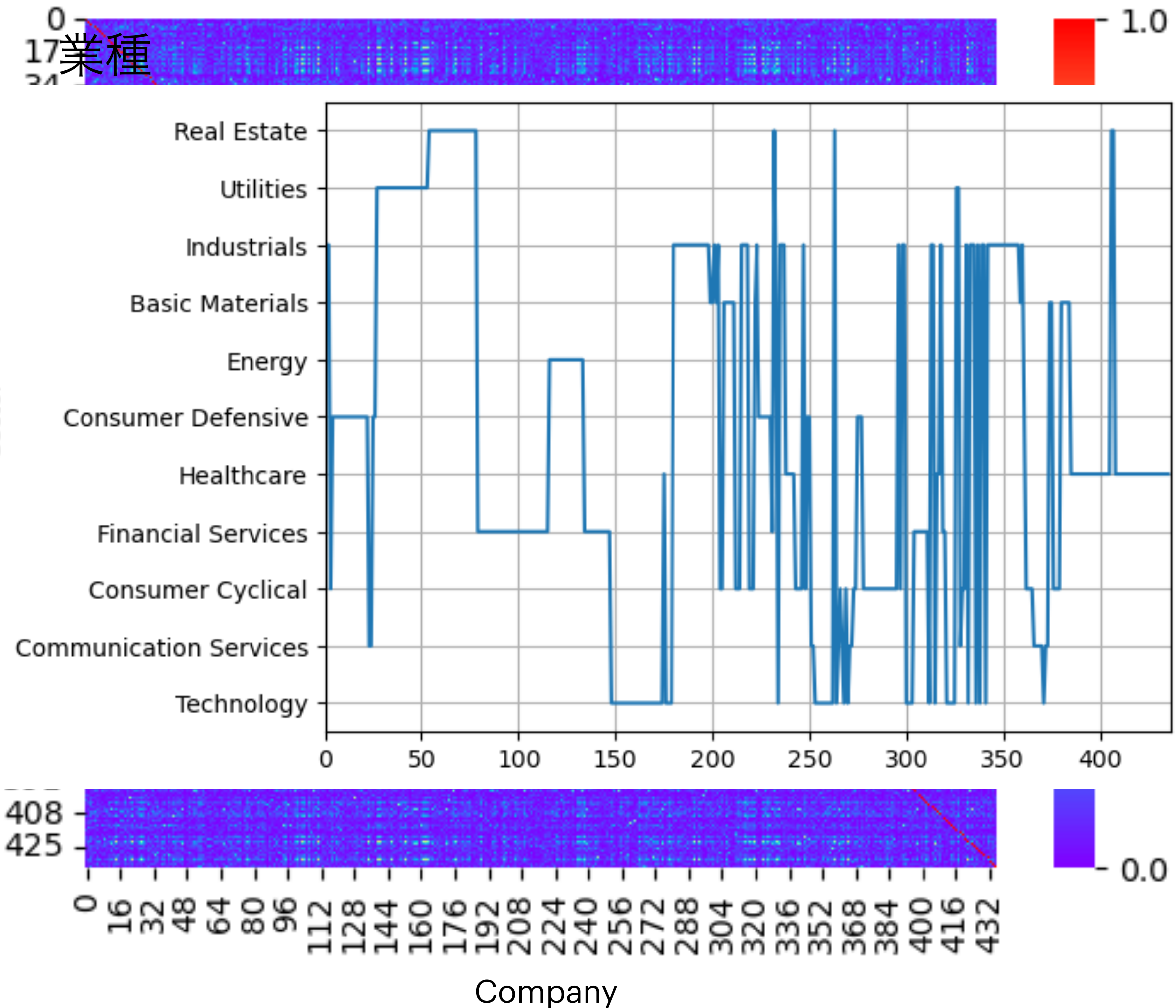
会社は業種のセクターに応じて色が付けられている

同じ業種中の会社は集まり、1色の部分木構造を作る

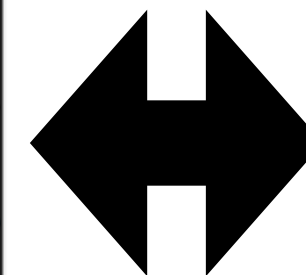
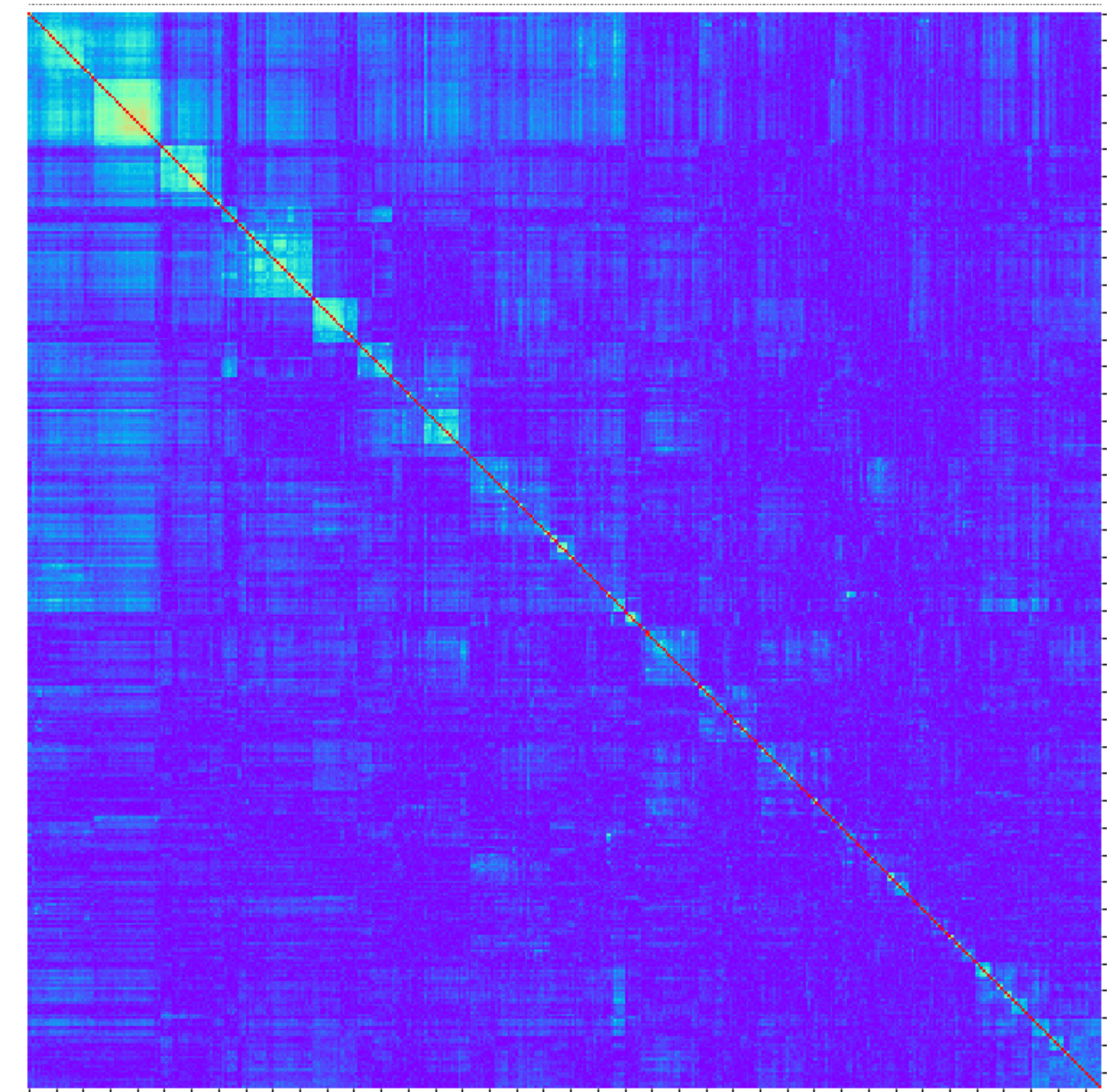
適応的テンソル木アルゴリズムはデータ中の隠された関係性を抽出

2点相関のクラスタリングによる解析

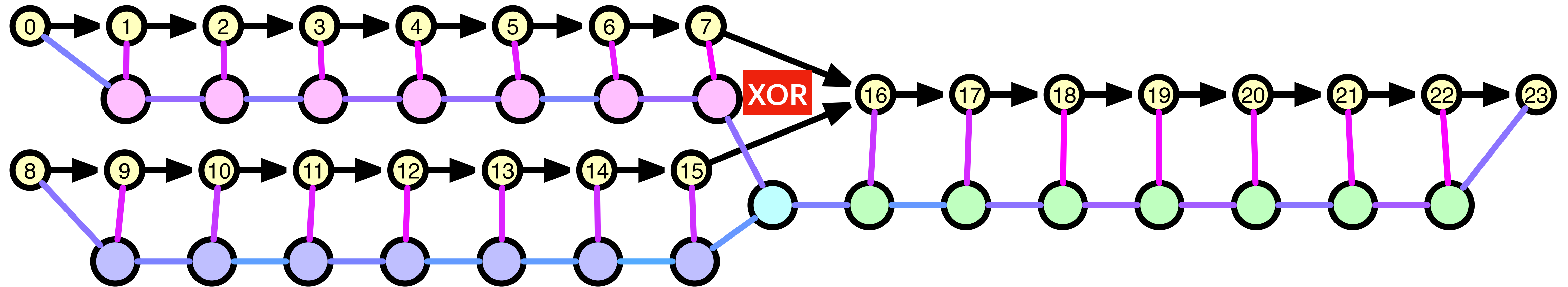
会社の株価変動率の2点相関係数



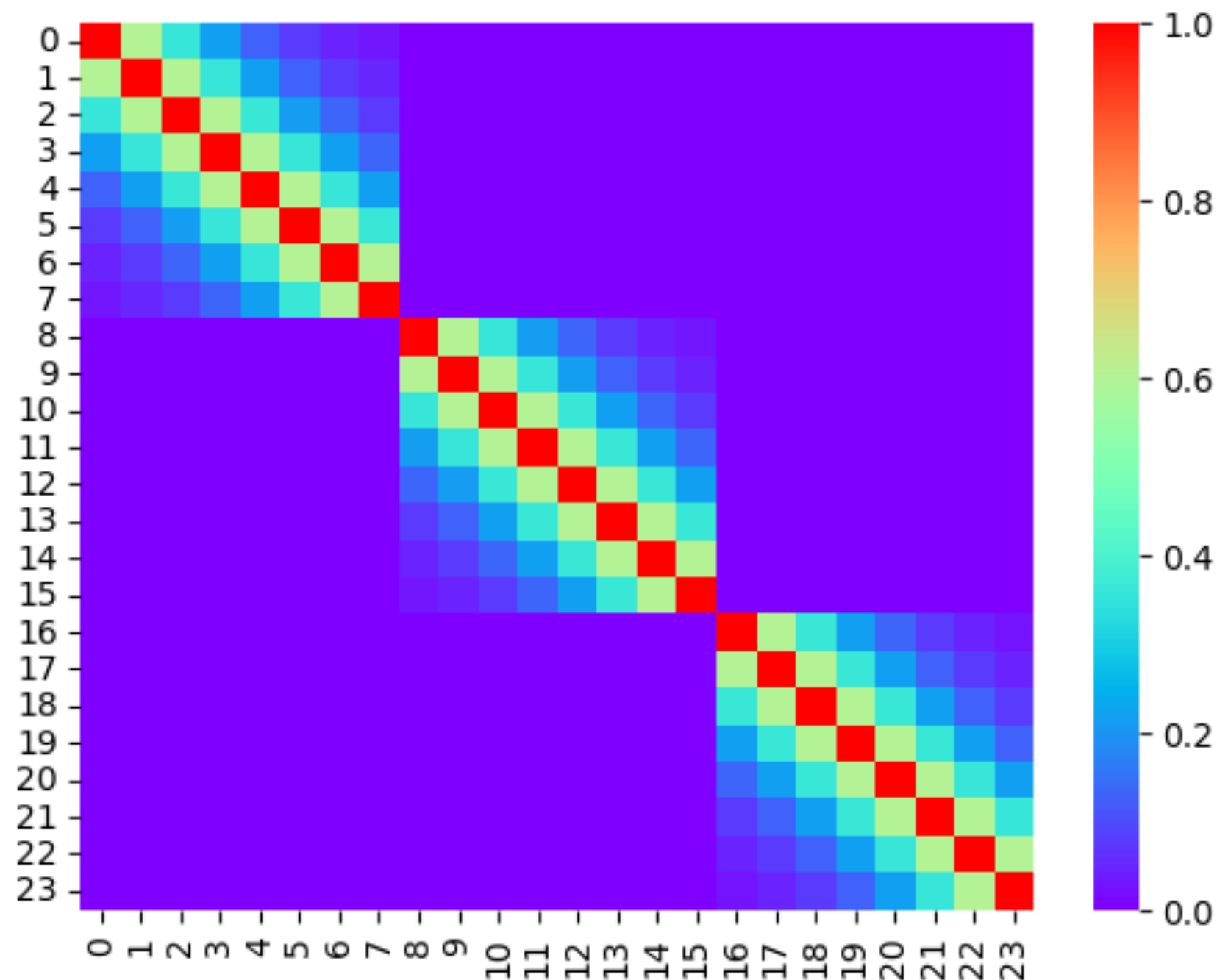
クラスタリング結果



2点相関のない場合のデータに対する適用例



このデータに対する2点相関係数



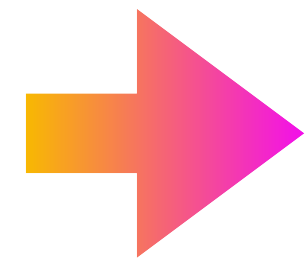
$$P(x_{16} = \text{xor}(x_7, x_{15})) = 0.8$$

2点相関で見ると3つの孤立した確率変数のグループがあるが、確率変数7、15、6は強く相関。

2点相関を用いたアルゴリズムでは捉えることができない関係性（多体相関）を適応的テンソル木アルゴリズムは抽出

まとめ

- 適応的テンソル木を用いた生成モデル
 - 知識のないデータに対する性能の向上
 - 最適化したネットワーク構造により隠されたデータ中の関係性を表現：多体相関



学習アルゴリズムでデータに隠された関係性を抽出

K.H., T. Okubo, N. Kawashima, *Tensor tree learns hidden relational structures in data to construct generative models*, [arXiv:2408.10669](https://arxiv.org/abs/2408.10669)

今後の課題

- 最適化アルゴリズムの改善
 - ボンド次元の動的な変更
 - ボンドの更新順序
- ボルンマシンならではの応用先

この研究は、トヨタ、SQAI、科研費によってサポートされました