


CCMSハンズオン:TeNeS講習会 ～テンソルネットワーク法とは～

東大理 大久保毅



Computational
Science
Alliance



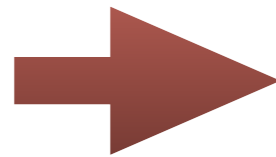
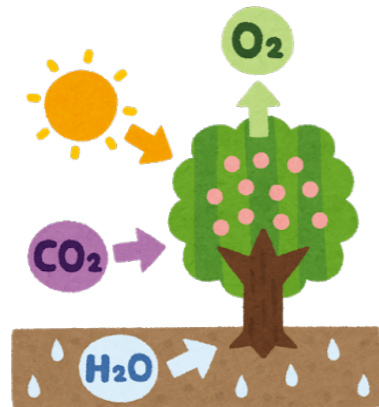
The University of Tokyo



量子多体問題

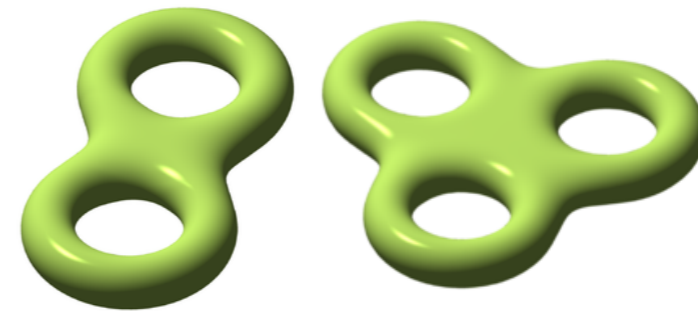
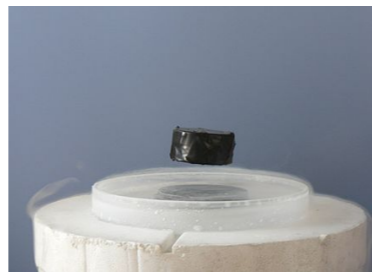
物質科学における多彩な現象

- 化学反応
- 超伝導
- トポロジカル状態
- ...



多数の"粒子"が量子力学に従って"運動"

量子多体問題



wikipedia"マイスナー効果", "トーラス"より

量子力学の支配方程式 = シュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \mathcal{H} |\Psi\rangle$$

\mathcal{H} : ハミルトニアン

$|\Psi\rangle$: 状態ベクトル



時間に依存
しない場合

$$\mathcal{H} |\Psi\rangle = \underline{E} |\Psi\rangle$$

エネルギー

= 固有値問題

量子多体問題の困難

シュレディンガー方程式： $\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$

- ベクトル空間の次元は"粒子数"に対して指数関数的に大きい
- 量子多体問題～「巨大な行列」の固有値問題
(古典的な) 計算機でこの問題を (厳密に) 解くには、
膨大なメモリと計算時間が必要

計算科学でのアプローチ

- 対角化：
- そのまま固有値問題を解くため厳密
 - $S=1/2$ の量子スピン系では50 qubit程度が限界

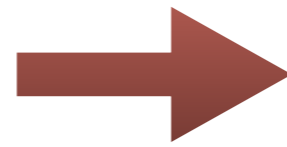
- 量子モンテカルロ法：
- 統計誤差の範囲で厳密な答えが得られる
 - 古典計算機でも大きな系が取り扱える
 - 符号問題により、適用できる系が限られる

- 変分法：
- 状態ベクトル (波動関数) の形を仮定して計算量を減らす
 - どんな系にでも適用できる (ことが多い)
 - 仮定した波動関数によるバイアスが存在する

変分法

例：最低エネルギー状態

$$\mathcal{H}|\Psi_0\rangle = E_0|\Psi_0\rangle$$



コスト関数： $F = \frac{\langle \tilde{\Psi} | \mathcal{H} | \tilde{\Psi} \rangle}{\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle}$

F の最小値 = E_0

その時の $|\tilde{\Psi}\rangle = |\Psi_0\rangle$

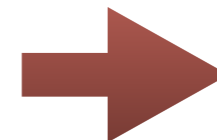
変分法

- 固有値問題の近似解を得る方法の一つ
- F の最小値を制限された空間の範囲で探す



$|\tilde{\Psi}\rangle$ の形を仮定する = 試行関数、変分波動関数

- 良い試行関数 → 高精度の最低エネルギー
- 複雑な試行関数 → コスト関数の計算量が増大



テンソルネットワークによる効率的な試行関数

テンソルネットワークによる情報圧縮

指数関数的に大きな状態空間を全て扱うことは不可能

➡ 実効的な次元を減らしたい

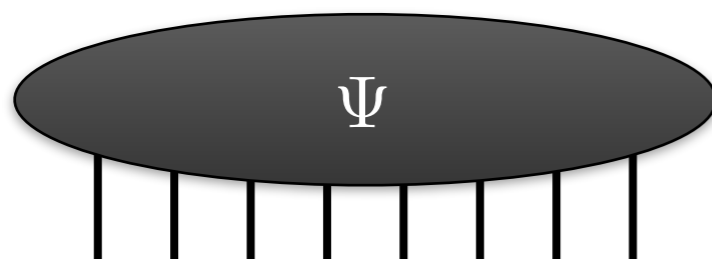
テンソルネットワーク状態：

情報のエンタングルメントに注目することで、適切な部分空間を構成

ヒルベルト空間

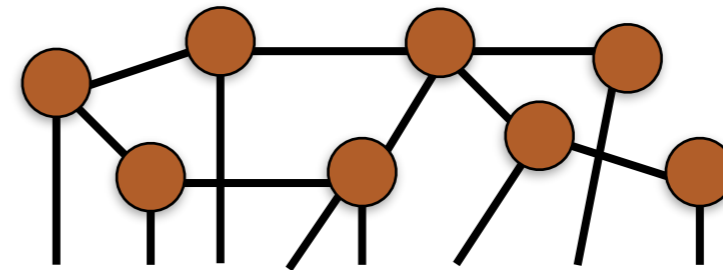
← 部分空間

一般の量子状態



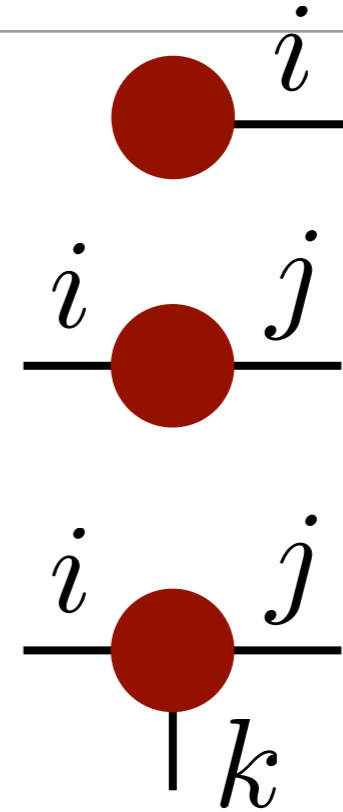
➡ 量子エンタングルメントの構造を利用

テンソルネットワーク分解



ダイアグラムを用いたテンソル表記

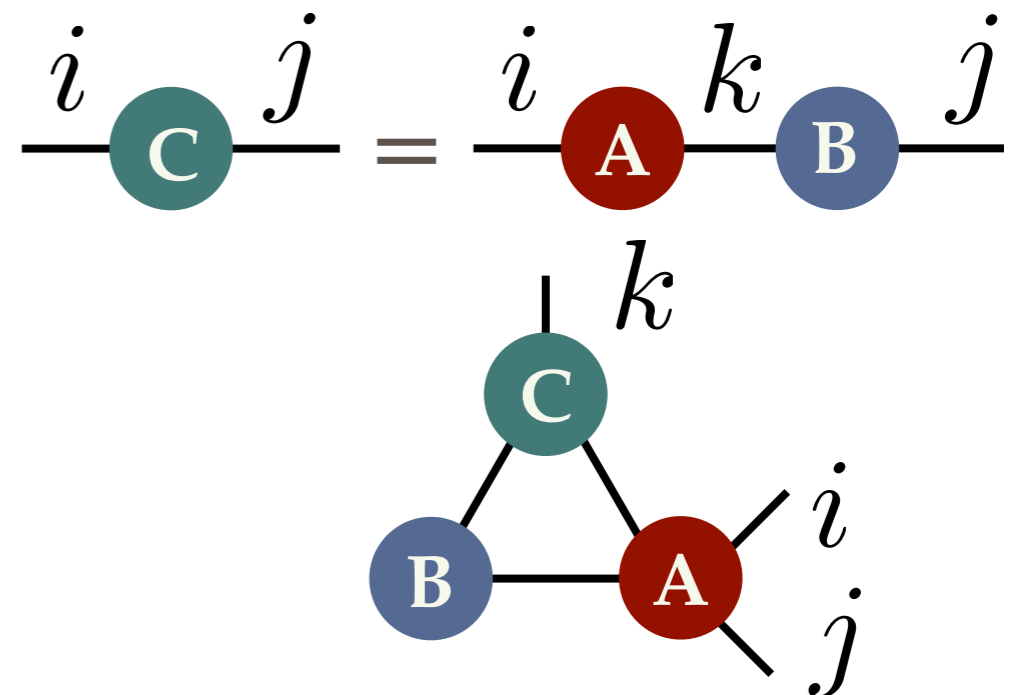
- ベクトル $\vec{v} : v_i$
- 行列 $M : M_{i,j}$
- テンソル $T : T_{i,j,k}$



テンソルの積（縮約）の表現

*n階のテンソル=n本の足

$$C_{i,j} = (AB)_{i,j} = \sum_k A_{i,k} B_{k,j}$$



$$\sum_{\alpha,\beta,\gamma} A_{i,j,\alpha,\beta} B_{\beta,\gamma} C_{\gamma,k,\alpha}$$

量子多体状態のテンソルネットワーク表現

量子多体状態： $\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i_1, i_2, \dots, i_N\}} \Psi_{i_1 i_2 \dots i_N} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle$$

基底

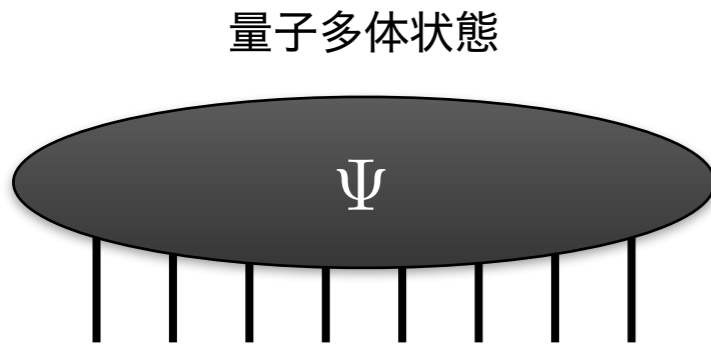
量子スピン・bit : $i = \uparrow, \downarrow = |0\rangle, |1\rangle$

$|010100 \dots 0\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle \otimes \dots$

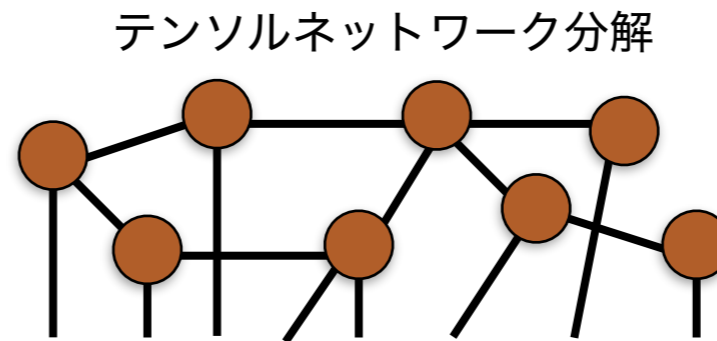
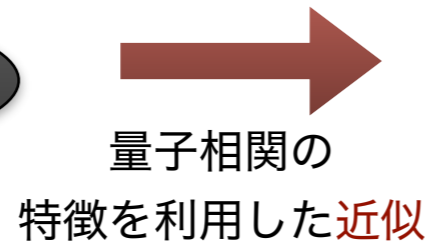
量子化学：

$i =$ 原子軌道・分子軌道の占有数

係数はテンソル

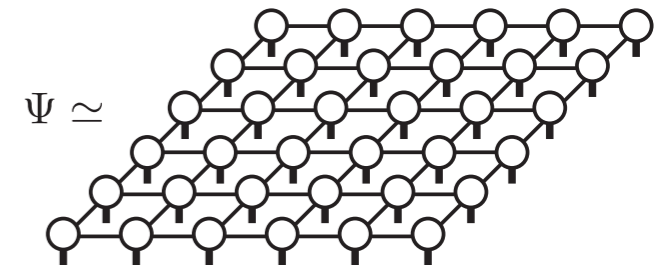


$\sim e^N$ の独立要素



$\sim O(N)$ の独立要素

PEPS, TPS (for 2d system)



$$T_{ijkl}[s] = \begin{array}{c} i \\ \diagup \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \diagdown \\ l \end{array} \begin{array}{c} j \\ \diagdown \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \diagup \\ k \\ s \end{array}$$

良いネットワークを選ぶことで、量子多体状態を効率的に表現できる

ex. TPS: 独立な要素数 $\sim ND^4$

D : テンソルTの各足の大きさ

指数関数 \rightarrow 線形

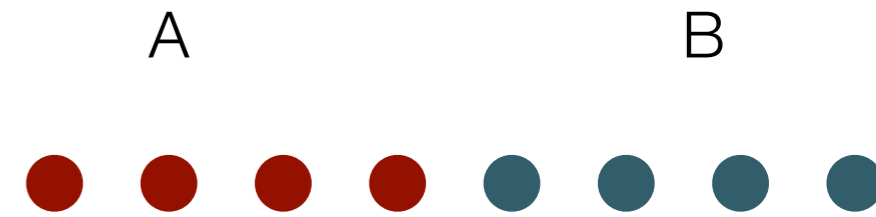
良いネットワークの選び方：

エンタングルメントエントロピーの面積則

エンタングルメントエントロピー (**EE**) :

部分系の縮約密度行列:

$$\rho_A = \text{Tr}_B |\Psi\rangle\langle\Psi|$$



EE = ρ_A の von Neumann エントロピー

$$S = -\text{Tr}(\rho_A \log \rho_A)$$

一般の状態ベクトル：

EE は 部分系の体積 (スピン数) に比例

$$S = -\text{Tr}(\rho_A \log \rho_A) \propto L^d$$

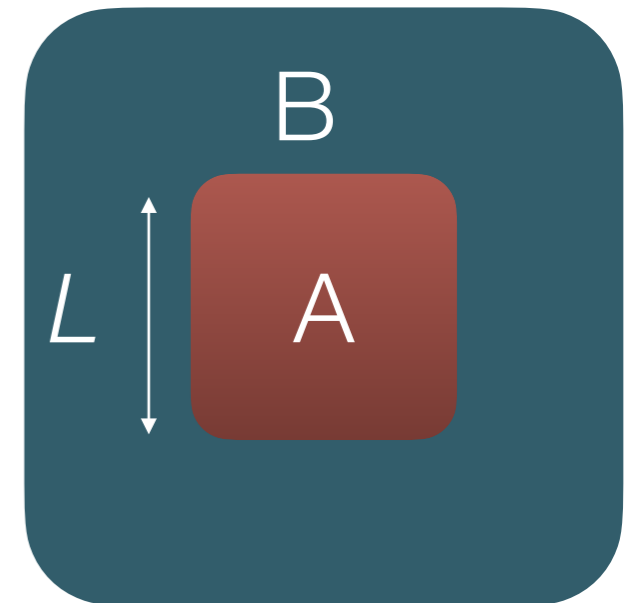
(c.f. ランダムベクトル)

基底状態ベクトル：

多くの低エネルギー状態では, EE は面積に比例

J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio, Rev. Mod. Phys, 277, **82** (2010)

$$S = -\text{Tr}(\rho_A \log \rho_A) \propto L^{d-1}$$



基底状態はヒルベルト空間の狭い部分空間で表現可能

テンソル積状態 (TPS) : 面積則を満たすTNS

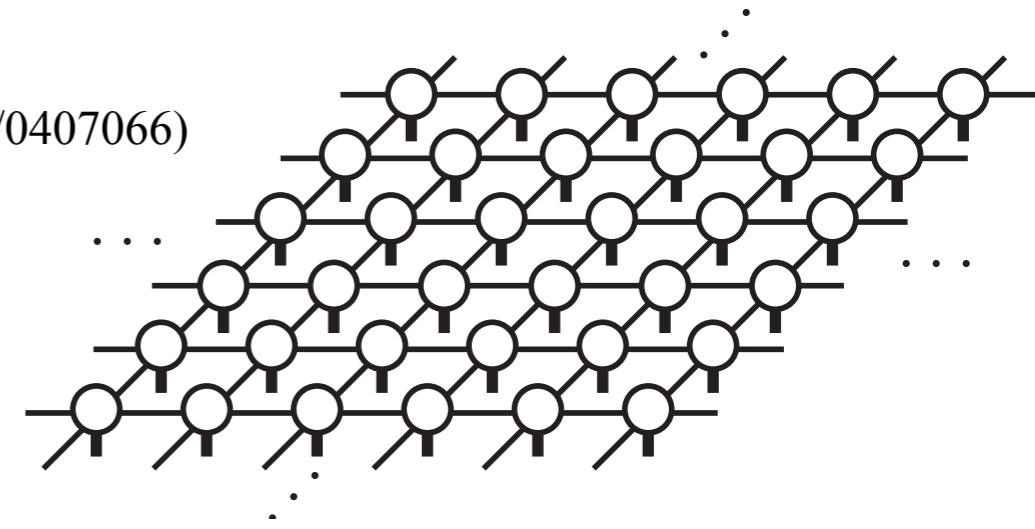
TPS (Tensor Product State) (AKLT, T. Nishino, K. Okunishi, ...)

PEPS (Projected Entangled-Pair State)

(F. Verstraete and J. Cirac, arXiv:cond-mat/0407066)

例 : 2次元正方格子のTPS

4+1 階のテンソルが敷き詰められたネットワーク



局所自由度 : s

$$T_{ijkl}[s] = \begin{array}{c} i \quad j \\ \diagup \quad \diagdown \\ \circ \\ \diagdown \quad \diagup \\ l \quad k \\ s \end{array}$$

Virtual自由度 : i, j, k, l

各インデックスの次元 = **ボンド次元 (D)**

変分波動関数としての精度に関するパラメタ (**$D \rightarrow \infty$ で厳密に**)

TPSを変分波動関数とする変分法

- 面積則を満たすため、有限Dでも精度の良い近似
- 無限系も直接、有限のDで計算できる : iTPS
- テンソルネットワークのみを仮定した、バイアスの少ない変分波動関数
- ボンド次元の増大により、系統的に精度を改善できる

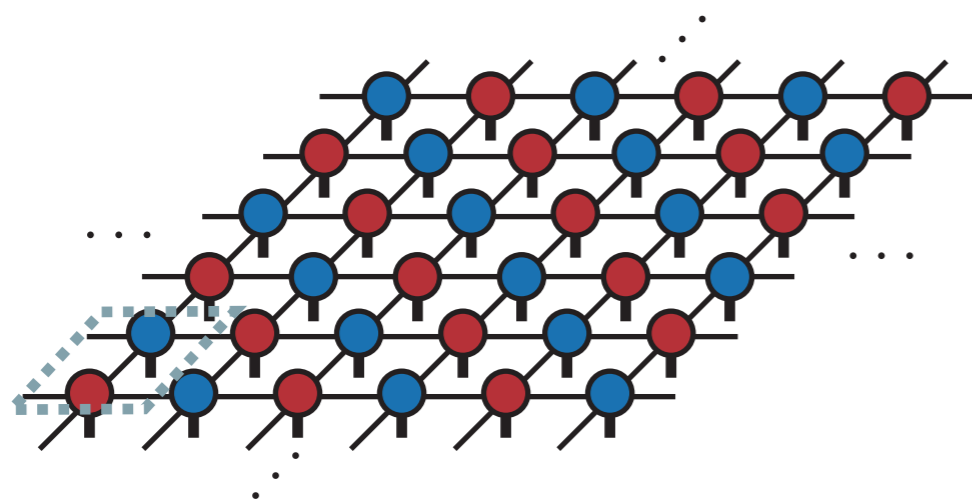
無限系のテンソル積状態：iTPS

状態ベクトルに並進対称性がある場合： $\underline{T}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$
並進の演算子 ↑ 位相はつかない

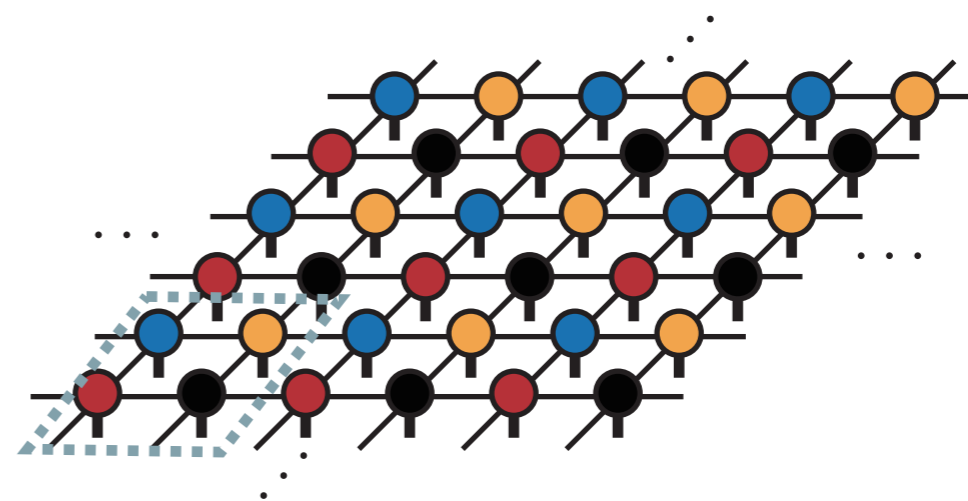
同じテンソルを周期的に（無限に）並べることで、

無限系の波動関数が有限の自由度で表現可能

→ TeNeSでは、**正方格子のiTPS**を扱う



2サイトユニットセル



4サイトユニットセル

*対象の周期が不明な場合は、複数のユニットセルで計算したエネルギーを比較し、適切なユニットセルを探す

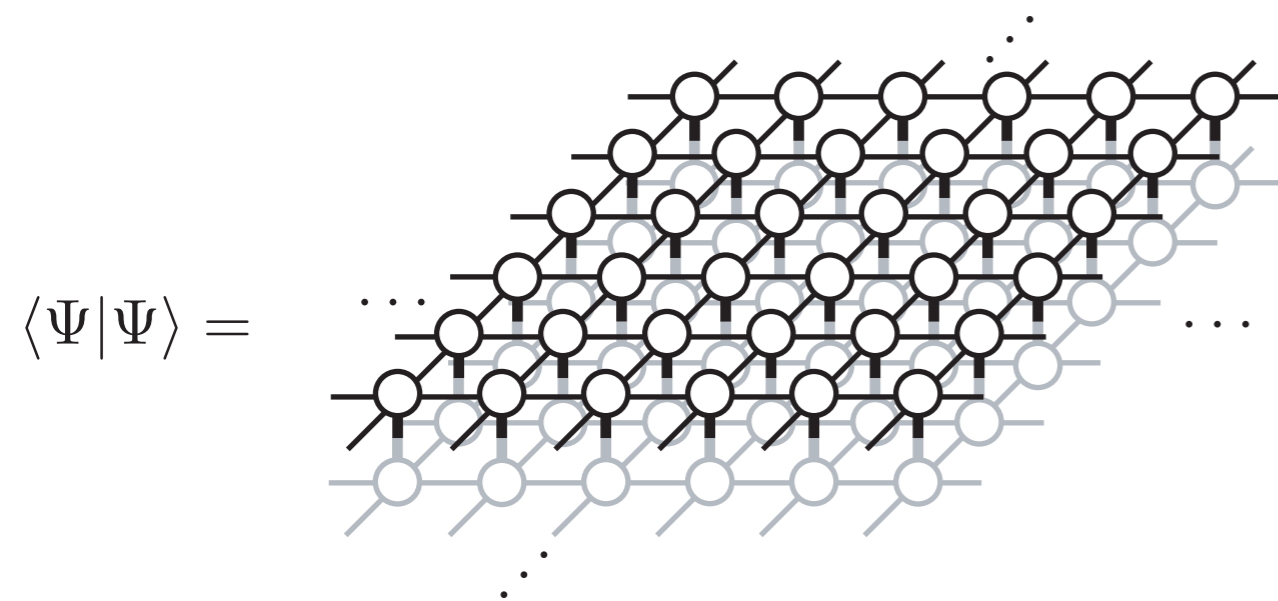
iTPSを用いた計算アルゴリズム

基底状態の物性を調べるためには、

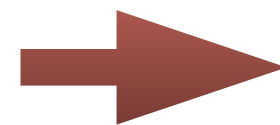
1. エネルギー期待値などの物理量計算
2. iTPSの最適化

の二つの計算が少なくとも必要

*TPSでは「テンソルネットワークの縮約」の厳密計算は困難



このネットワークの縮約には、
指数関数的に大きな計算量が必要

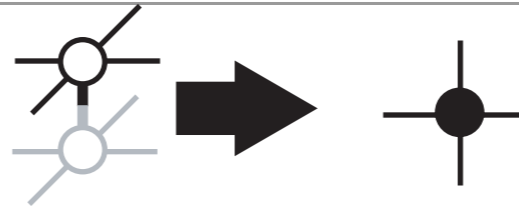


近似的な縮約

- テンソル繰り込み
- 境界MPS法
- 角転送行列法
- 平均場環境

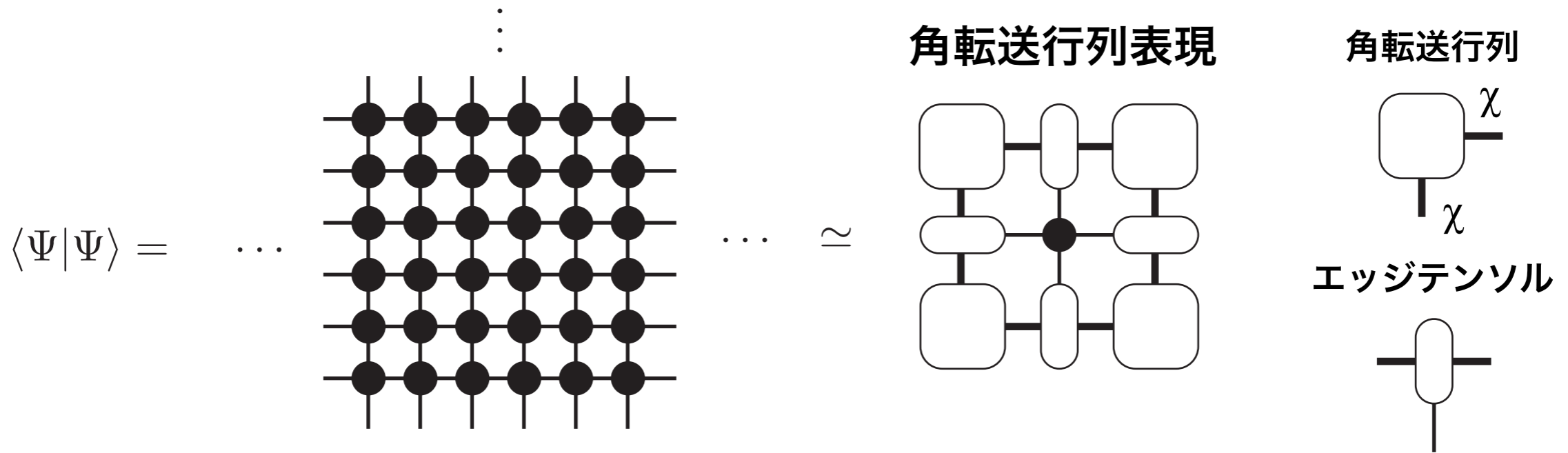
角転送行列法による近似的な縮約

先ほどのネットワークを簡略化：

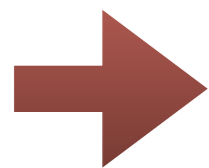


ボンド次元： D

ボンド次元： D^2



無限に広がった環境を"ボンド次元" χ の角転送行列で近似的に表現



角転送行列とエッジテンソルは、 $O(\chi^2 D^6), O(\chi^3 D^4)$

のコストで計算可能（詳細はマニュアル・参考文献参照）

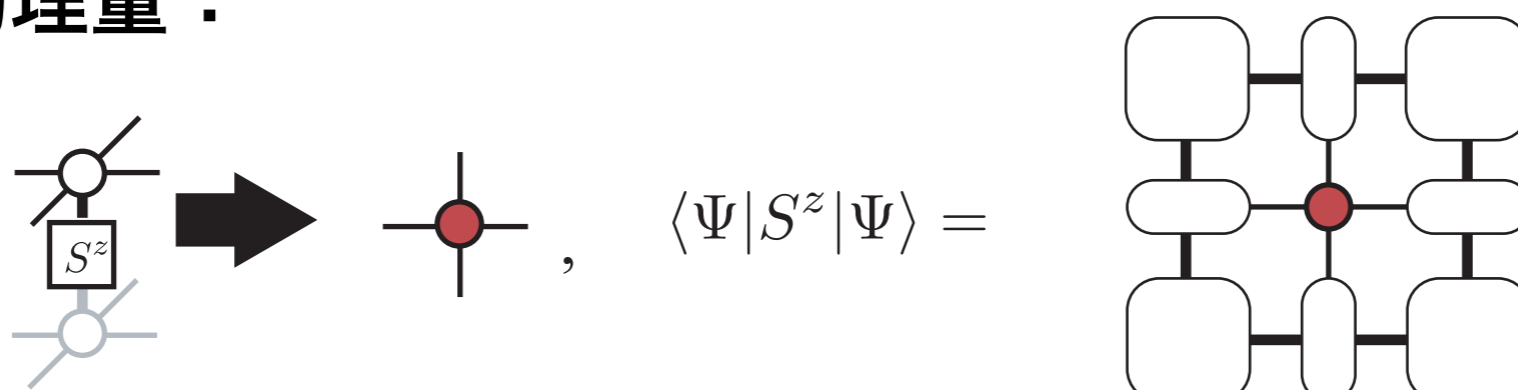
* χ は物理量が収束するように十分に大きく取る

*通常、 $\chi \propto O(D^2)$ でスケールするため縮約コストは $O(D^{10})$

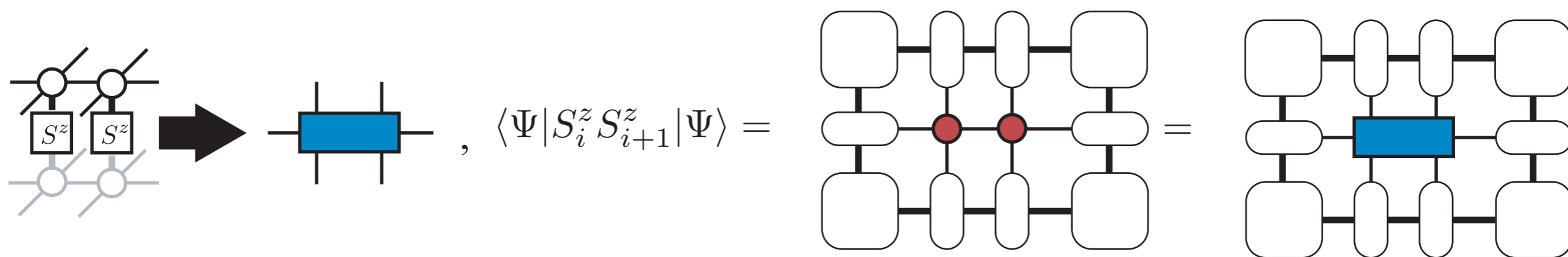
角転送行列法による物理量の計算

角転送行列を用いれば局所的な物理量は（比較的）簡単に計算可能

1サイト物理量：

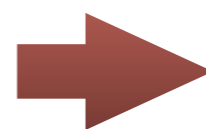


2サイト物理量：



*計算するダイアグラムが（2次元的に）大きくなると、**縮約コストは大きく増える**

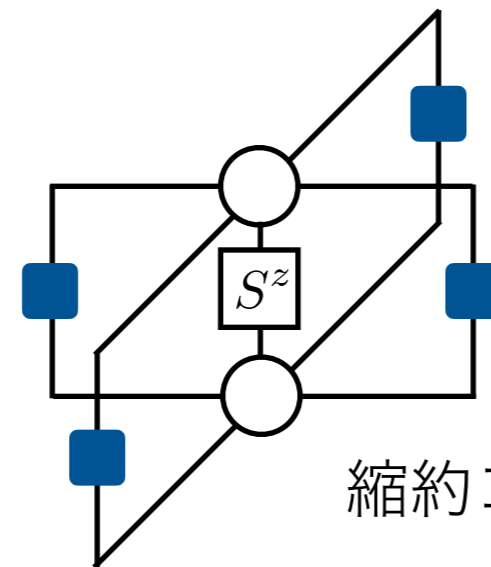
- ・ 対角方向に長距離の相関関数
- ・ 大きなクラスタの多体相互作用



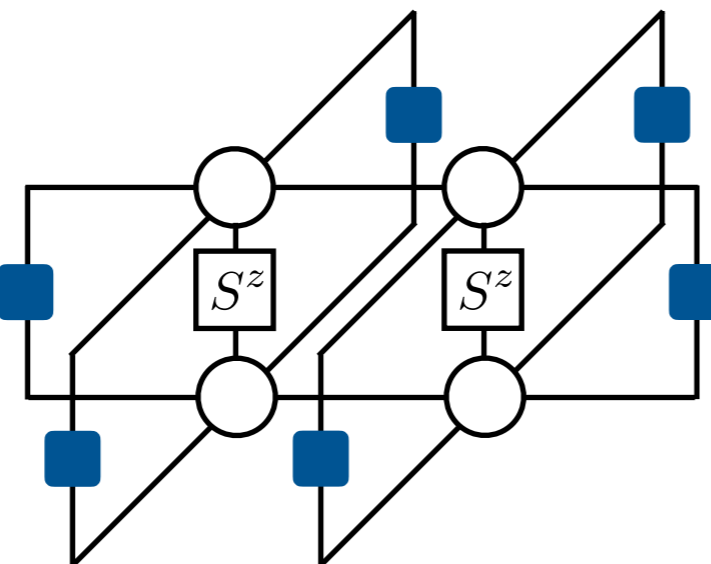
TeNeSでも原理的に計算可能だが、
長時間の計算が必要

平均場環境

平均場環境：各ボンドに平均場的な環境を考えて期待値を計算

$$\langle \Psi | S^z | \Psi \rangle =$$


縮約コスト： $O(D^4)$

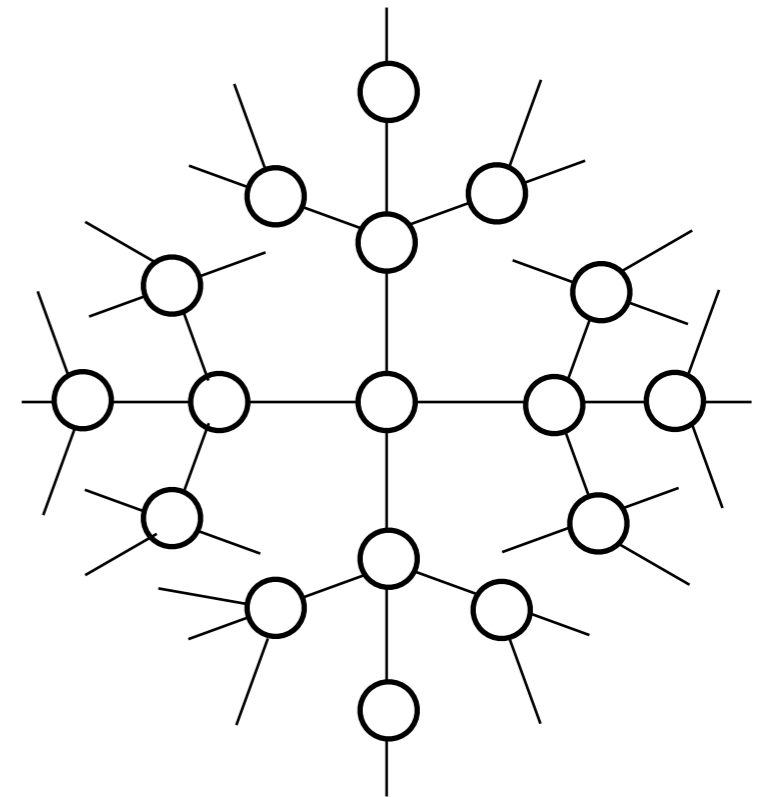
$$\langle \Psi | S_i^z S_{i+1}^z | \Psi \rangle =$$


縮約コスト： $O(D^5)$

計算が非常に軽くなるが、近似も大きい

■：平均場テンソル

テンソルネットワーク内の
ループ構造を無視する状況で正確



*正方格子では近似になるため、
エネルギーの変分的にならない

iTPSの最適化

iTPSの典型的な最適化法

1. 変分最適化法

エネルギー期待値を最小にする様にテンソルを変化させる

$$\min_A E(A) = \min_A \frac{\langle \Psi(A) | \hat{H} | \Psi(A) \rangle}{\langle \Psi(A) | \Psi(A) \rangle}$$

*微分の計算が困難だったが、最近発展

P. Corboz, Phys. Rev. B **94**, 035133 (2016).

L. Vanderstraeten *et al*, Phys. Rev. B **94**, 155123 (2016).

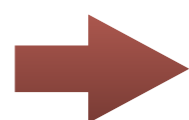
H.-J. Liao *et al*, Phys. Rev. X **9**, 31041 (2019).

2. 虚時間発展法

長時間の虚時間発展で基底状態を得る

$$\lim_{M \rightarrow \infty} (e^{-\tau \mathcal{H}})^M |\psi\rangle = \text{ground state}$$

虚時間発展演算子をかけると、iTPSのボンド次元が増大



同じボンド次元のiTPSに再度近似

*TeNeSでは虚時間発展を採用 → 実時間発展も同様のアルゴリズム

iTPSの（虚）時間発展法

虚時間発展の分解：（仮定）ハミルトニアンは二体相互作用の和 $\mathcal{H} = \sum_{\{(i,j)\}} H_{ij}$

鈴木-トロッター分解

小さな時間刻み τ
での虚時間発展

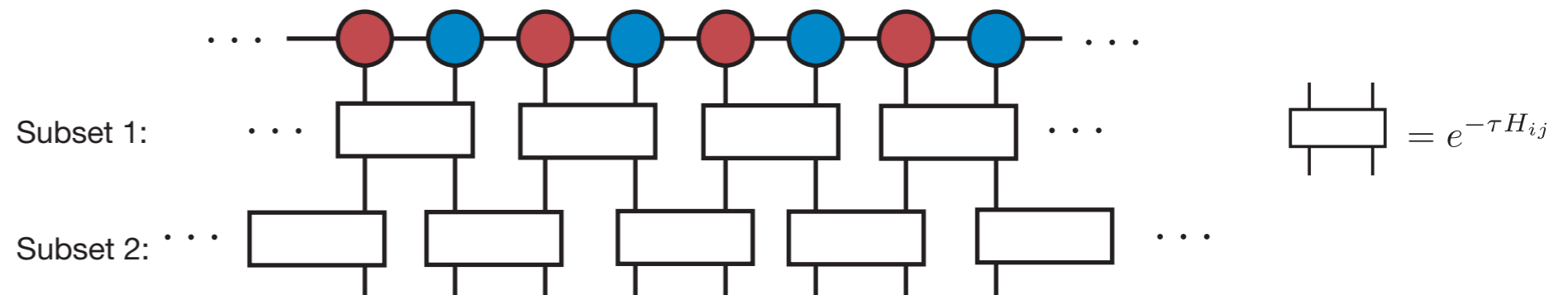
$$e^{-\tau\mathcal{H}} = \prod_{\{(i,j)\}} e^{-\tau H_{ij}} + O(\tau^2)$$

（*より高次の近似を考えることもできる）

→
全体の虚時間発展

$$e^{-T\mathcal{H}}|\Psi_0\rangle = \left(\prod_{\{(i,j)\}} e^{-\tau H_{ij}} \right)^{N_\tau} |\Psi_0\rangle + O(\tau)$$

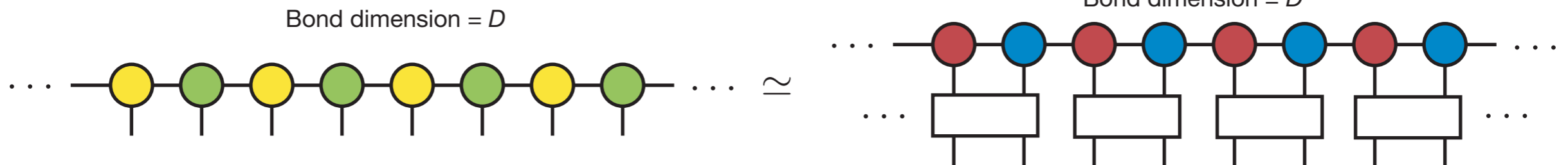
→
相互作用を
可換な組に分解



iTPSの（虚）時間発展法

打ち切りによる近似

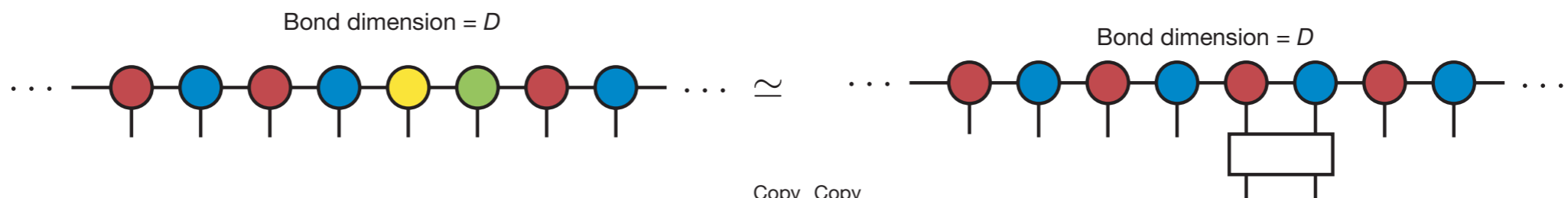
（虚）時間発展後の状態を再び、iTPSで近似する $|\Psi_\tau^{\text{iTPS}}\rangle \simeq \prod_{\{(i,j) \in \text{subset}_n\}} e^{-\tau H_{ij}} |\Psi^{\text{iTPS}}\rangle$



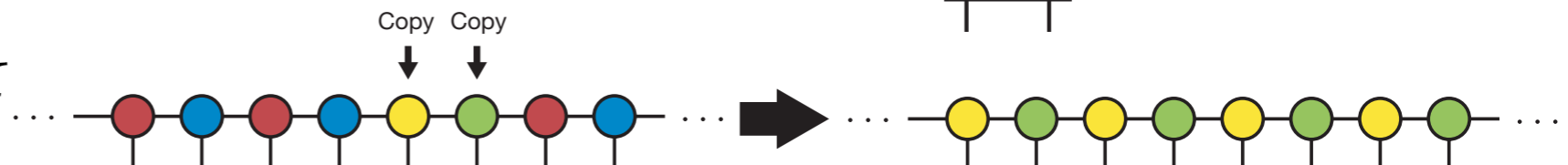
この近似は最小化問題：
$$\min \left\| |\Psi_\tau^{\text{iTPS}}\rangle - \prod_{\{(i,j) \in \text{subset}_n\}} e^{-\tau H_{ij}} |\Psi^{\text{iTPS}}\rangle \right\|^2$$

並進対称性の影響で非線型の難しい最適化問題....

➡ 局所近似する：
$$\min \left\| |\Psi_\tau^{\text{iTPS}}\rangle - e^{-\tau H_{ij}} |\Psi^{\text{iTPS}}\rangle \right\|^2$$



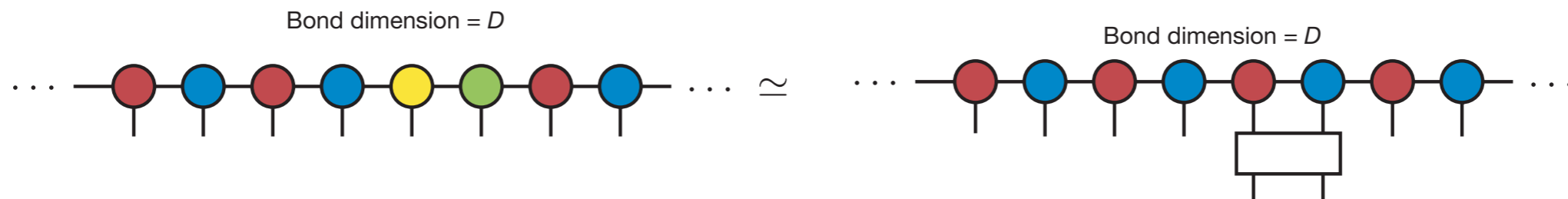
➡ 並進対称性を利用して
全体にコピー



iTPSの（虚）時間発展法

最適化問題の解法

$$\min \left\| \left| \Psi_{\tau}^{\text{iTPS}} \right\rangle - e^{-\tau H_{ij}} \left| \Psi^{\text{iTPS}} \right\rangle \right\|^2$$

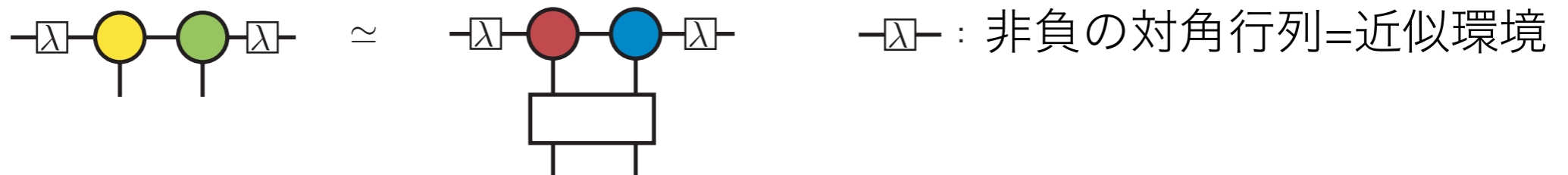


コスト関数は角転送行列を用いて計算可能： $O(D^{10})$

➡ **Full update法**と呼ばれる (cf. R. Orus *et al*, Phys. Rev. B **80**, 094403 (2009))

より計算の軽い近似最適化？

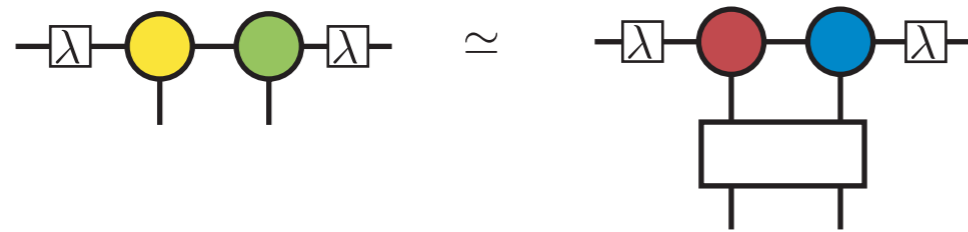
さらに近似した環境を用いて、完全な局所問題に置き換える



➡ **Simple update法**と呼ばれる (H. G. Jiang *et al*, Phys. Rev. Lett. **101**, 090603 (2008))

iTPSの（虚）時間発展法

Simple update法 (H. G. Jiang *et al*, Phys. Rev. Lett. **101**, 090603 (2008))

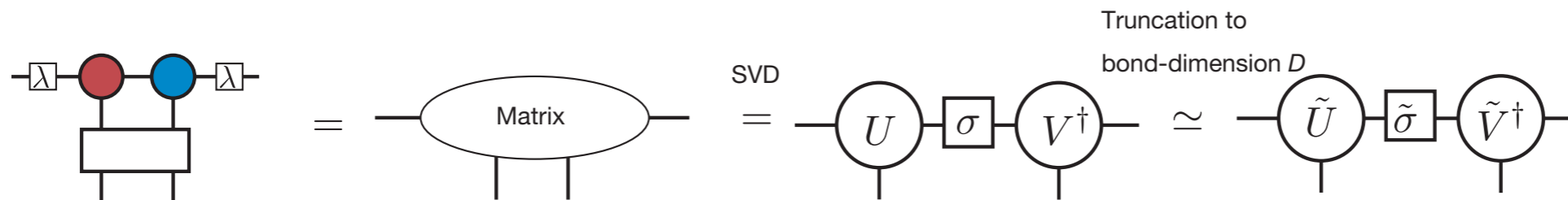


$-\lambda-$: 非負の対角行列 = 近似環境

縮約に出てきた平均場
と本質的に同一

右辺のダイアグラムを行列だと考え、特異値分解による低ランク近似

計算コスト：(QR分解を使うと) $O(D^5)$ ととても軽い！



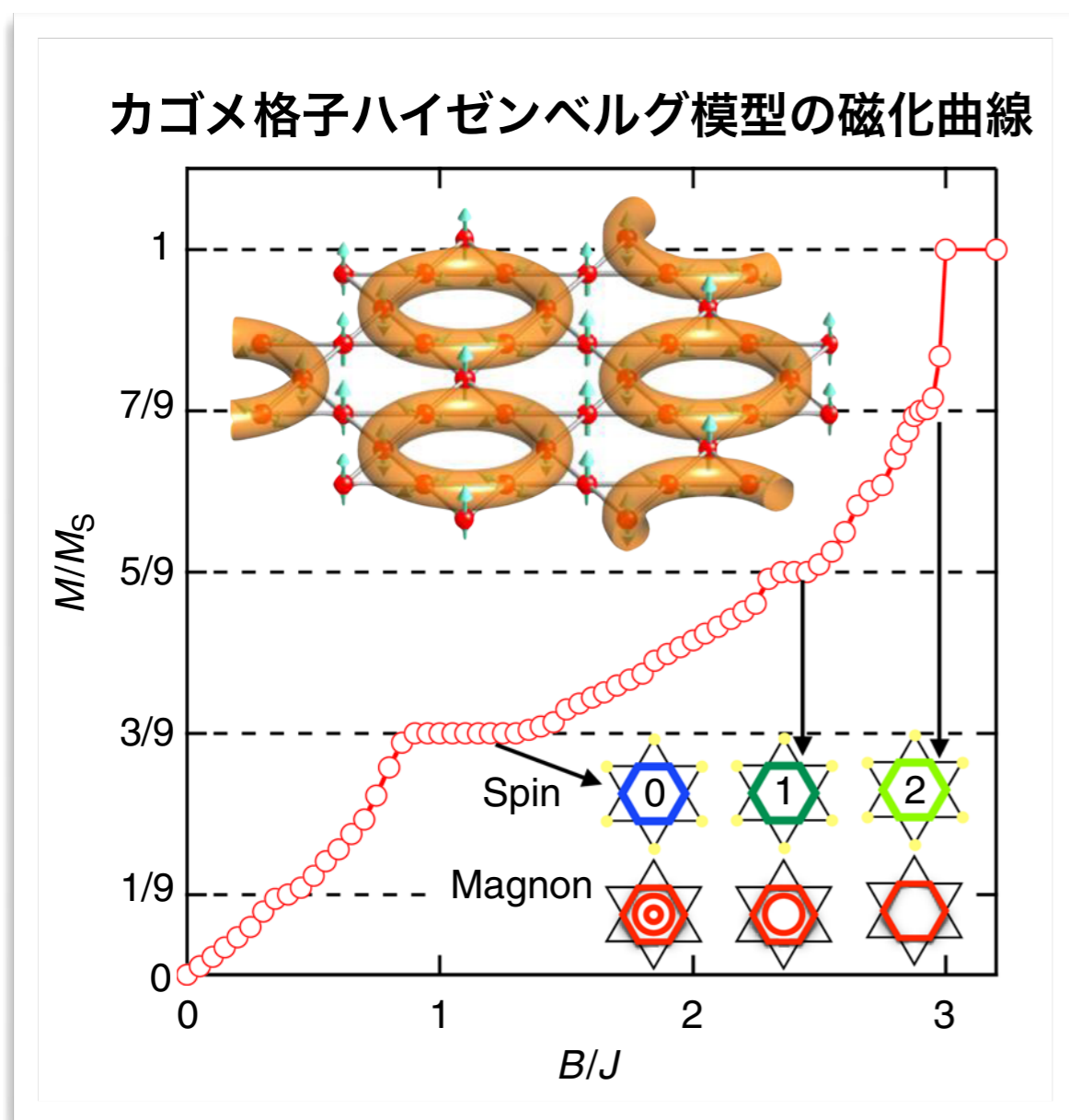
次のステップでの
環境として用いる

Simple update法のデメリット：

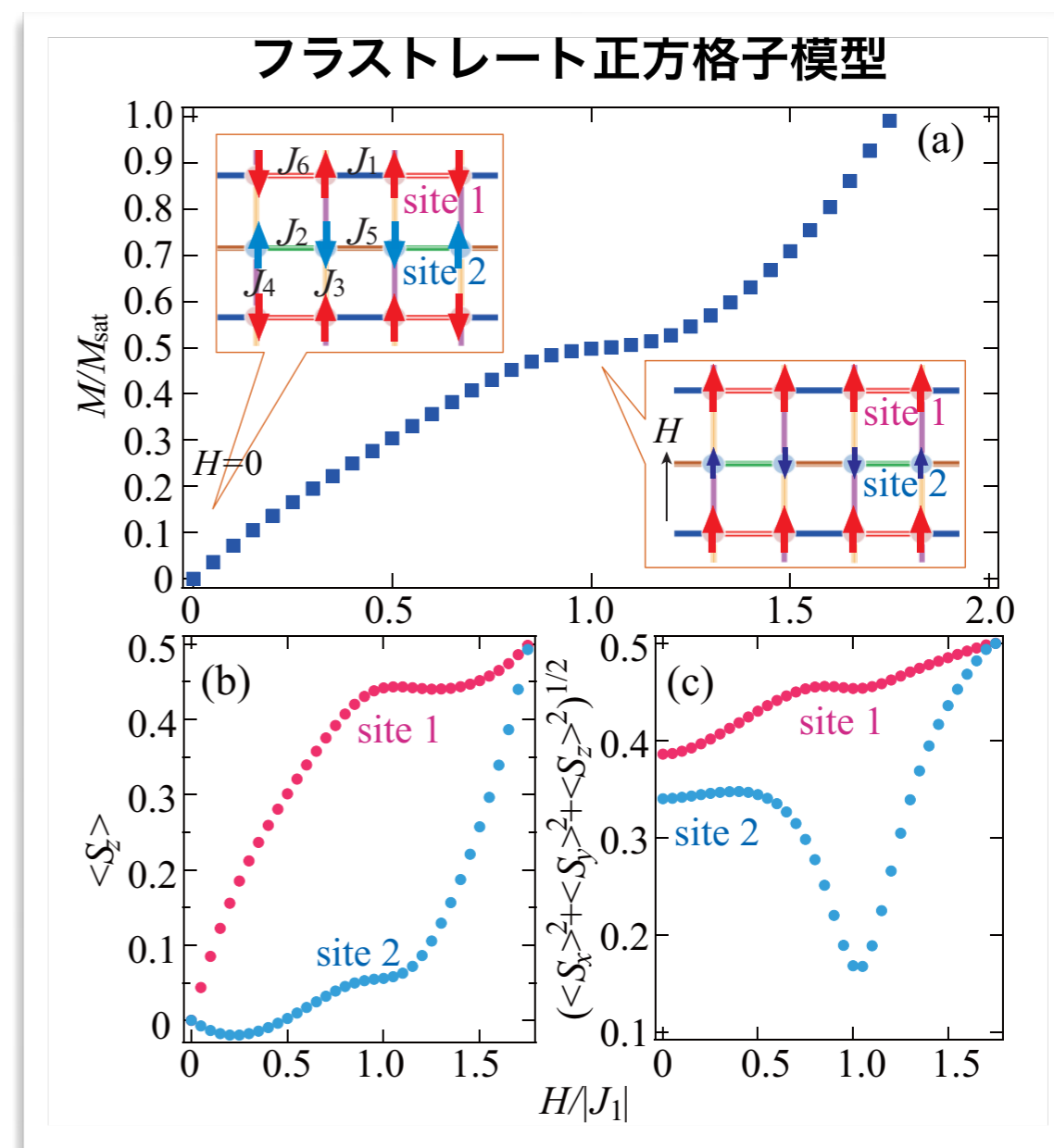
- 初期状態依存性が大きく、不適切な状態に最適化がトラップされる場合がある
- ランダムな状態から始めた場合、長距離相関を成長させることが苦手
 - 量子臨界点近傍などでは、full update法の方が良い

テンソルネットワーク法の適用例

例：（QMCのできない）フラストレート磁性体



R. Okuma, D. Nakamura, T. Okubo et al,
Nat. Commun. **10**, 1229 (2019).



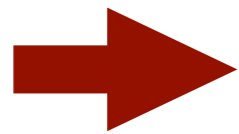
H. Yamaguchi, Y. Sasaki, T. Okubo,
Phys. Rev. B **98**, 094402 (2018).

実時間発展と虚時間発展の違い

Ver. 2.0では実時間発展計算を導入 →基本アルゴリズムは虚時間発展と同じ

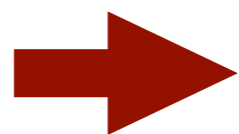
【実用上の違い】

1. 虚時間発展は基底状態に向かうため、量子エンタングルメントがずっと小さいが、実時間発展では通常、量子エンタングルメントが増大する



長時間実時間発展シミュレーションで精度を保つには、大きなボンド次元が必要

2. 虚時間発展では、最終的に到達する状態（基底状態）のみが重要だが、実時間発展では、各時刻での状態の精度も大事



各時刻での精度には、ボンド次元の他、Suzuki-Trotter分解の精度（誤差）も影響する

有限温度計算法

Ver. 2.0では有限温度計算にも対応

期待値

$$\langle \hat{O} \rangle_\beta = \text{Tr}[\rho(\beta)\hat{O}]$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

密度行列

$$\rho(\beta) = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta \mathcal{H}}$$

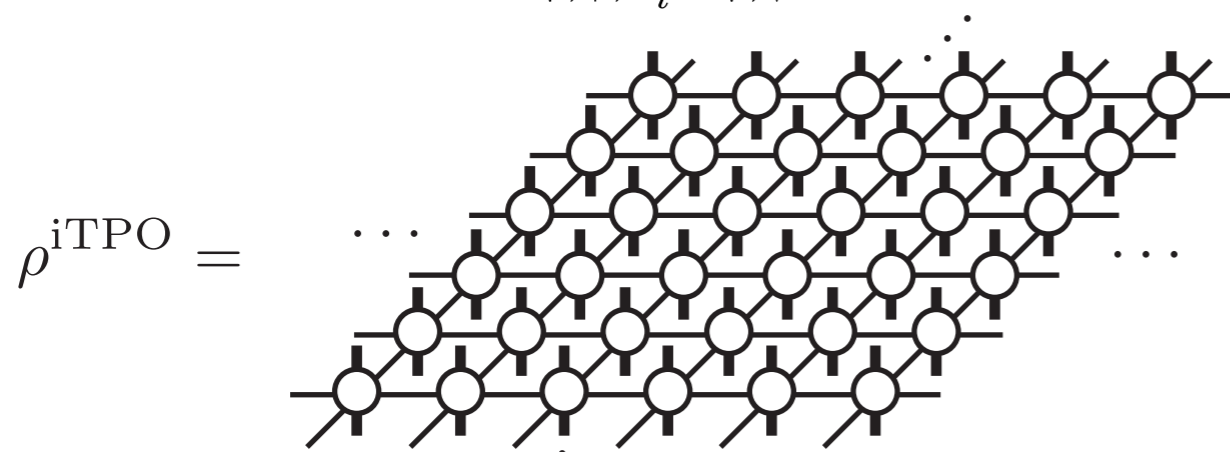
分配関数

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}$$

TeNeSでは、密度行列をiTPO (infinite Tensor Product Operator) で近似

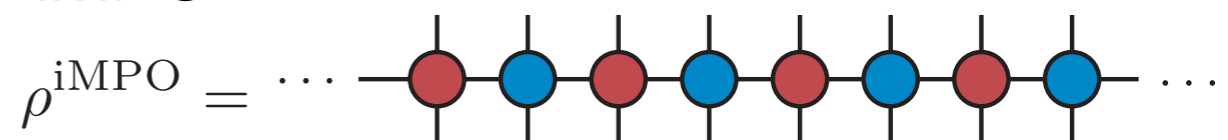
(cf. A. Kshetrimayum et al, PRL **122**, 070502 (2019))

$$\rho(\beta) = \sum_{s_i = \uparrow, \downarrow, s'_i = \uparrow, \downarrow} (\rho(\beta))_{s_1, s_2, \dots, s_N}^{s'_1, s'_2, \dots, s'_N} |s'_1, s'_2, \dots, s'_N\rangle \langle s_1, s_2, \dots, s_N|$$



$$T_{ijkl}[s, s'] =$$

*cf. iMPO



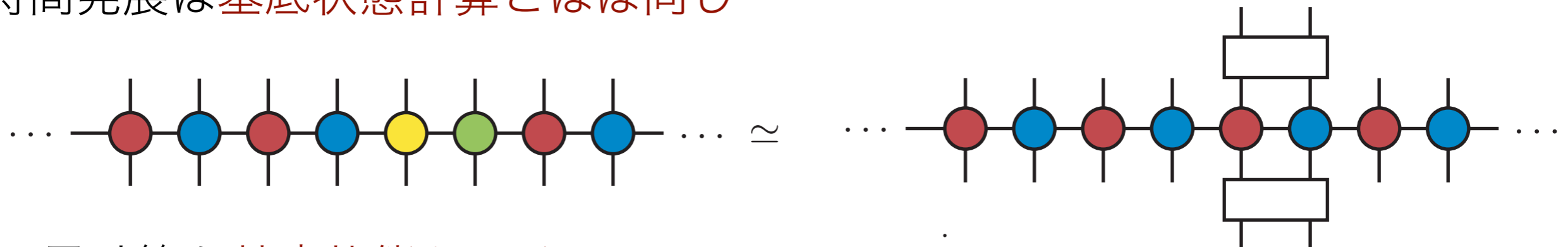
有限温度計算法

各温度の状態：初期状態 $\rho(\beta = 0)$ からの虚時間発展で得る

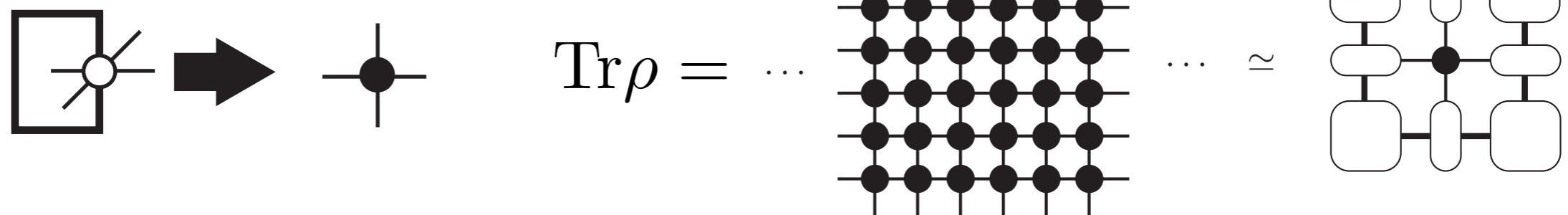
$$\rho(\beta) = e^{-\frac{\beta}{2}\mathcal{H}} \rho(0) e^{-\frac{\beta}{2}\mathcal{H}/2}$$

* 初期状態は単位行列 $\rho^{\text{iMPO}}(0) = \dots \left| \begin{array}{c} | \\ | \\ | \\ | \\ | \\ | \\ | \end{array} \right. \dots$

* 虚時間発展は基底状態計算とほぼ同じ

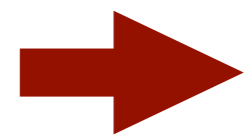


* 物理量計算も基底状態と同じCTMRG



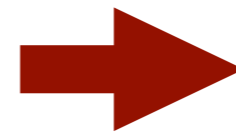
有限温度計算と基底状態計算の違い

1. 近似された密度行列はエルミートな半正定値行列とは限らない



近似の誤差として負や複素数の固有値を持ち
うるため、非物理的な結果が生じる可能性

- ・ 負の比熱
- ・ 基底状態より低いエネルギー
- ・ ...

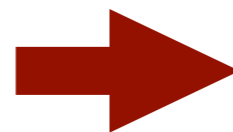


ボンド次元 D の増大で改善
*CTMRGのボンド次元では本
質的な改善にはならない

2. 有限温度計算では全体の計算コストが $O(D^6)$ になり、基底状態計算よりも大きなボンド次元 D での計算が可能

基底状態： $D \lesssim 14$

有限温度： $D \lesssim 100$



高温での表現能力は高い

(アルゴリズム) まとめ

- テンソルネットワーク状態を用いると量子多体系の基底状態が効率的に表現できる
 - テンソル積状態はエンタングルメントの面積則を満たす良いテンソルネットワークになっている
 - 並進対称性があれば、無限系も有限自由度で取り扱える
- 角転送行列により無限系の環境が近似的に計算可能
 - 平均場環境を用いれば（近似は大きい）環境計算が軽くなる
- 虚時間発展を用いることによりテンソル積状態を最適化可能
- Ver. 2.0では、実時間発展と有限温度計算の機能も追加
 - 基底状態計算の自然な拡張として、テンソルネットワークが使える