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

東京大学
THE UNIVERSITY OF TOKYO

Computational Science Alliance
The University of Tokyo

さきがけ
PRESTO

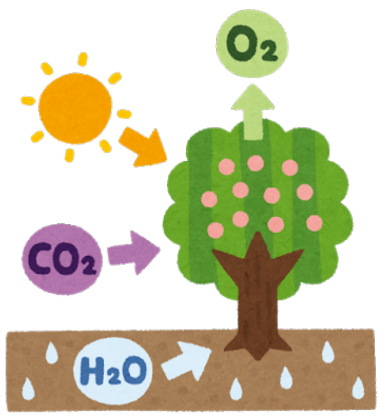
量子多体問題

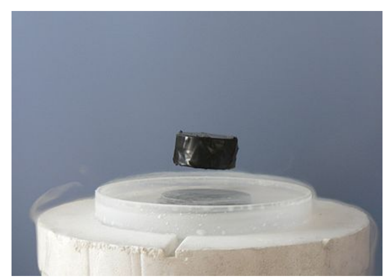
物質科学における多彩な現象

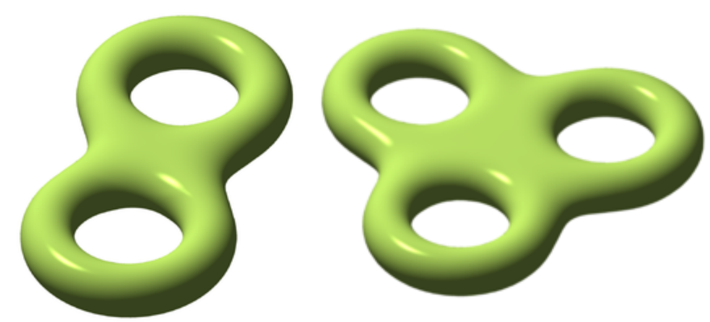
- 化学反応
- 超伝導
- トポロジカル状態
- …

多数の"粒子"が量子力学に従って"運動"

$\boxed{\text{量子多体問題}}$







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

$$\boxed{\mathcal{H}|\Psi\rangle = \underbrace{E}_{\text{エネルギー}}|\Psi\rangle}$$

＝ 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： $F = \dfrac{\langle\tilde{\Psi}|\mathcal{H}|\tilde{\Psi}\rangle}{\langle\tilde{\Psi}|\tilde{\Psi}\rangle}$

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

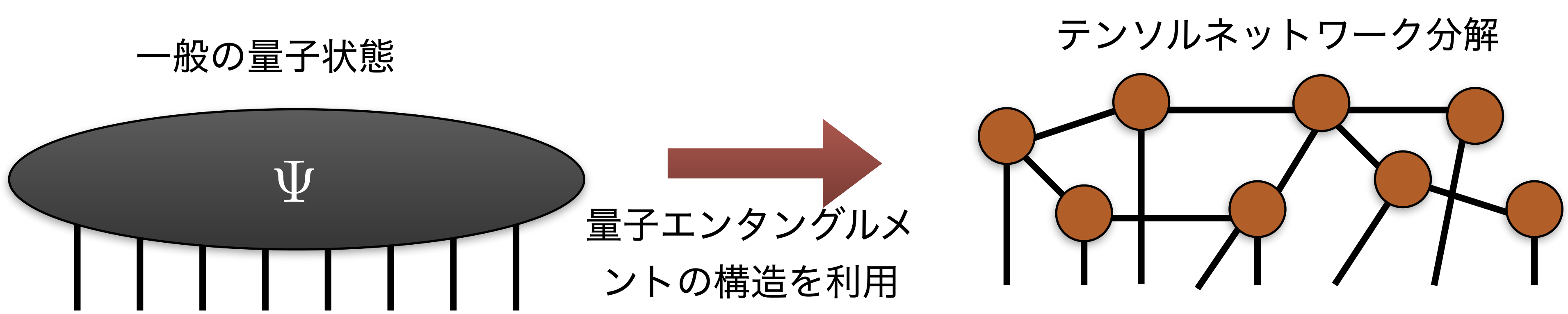
テンソルネットワークによる情報圧縮

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

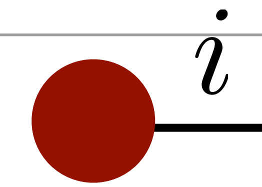
テンソルネットワーク状態：

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

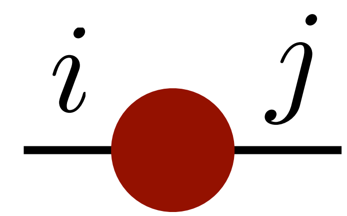


ダイアグラムを用いたテンソル表記

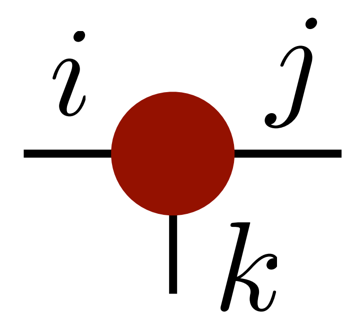
- ベクトル　$\vec{v} : v_i$



- 行列　$M : M_{i,j}$



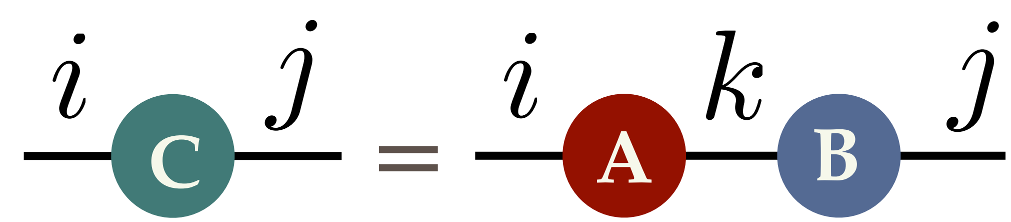
- テンソル　$T : T_{i,j,k}$



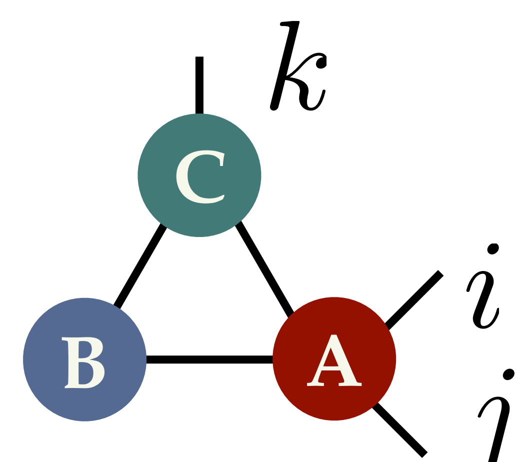
＊n階のテンソル＝n本の足

テンソルの積（縮約）の表現

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



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



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

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

基底

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

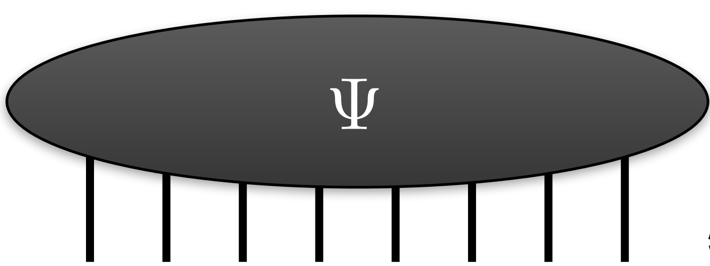
$|010100\cdots 0\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle \otimes \cdots$

量子化学：

i = 原子軌道・分子軌道の占有数

係数はテンソル

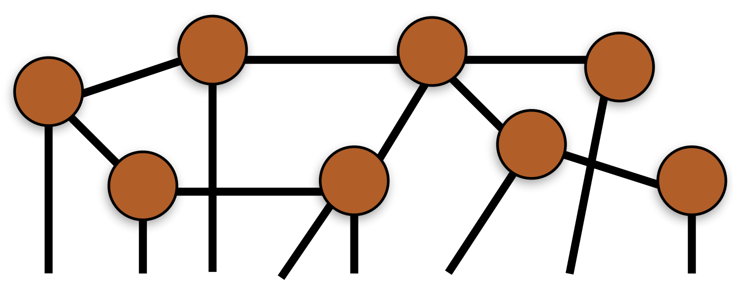
量子多体状態



量子相関の
特徴を利用した近似

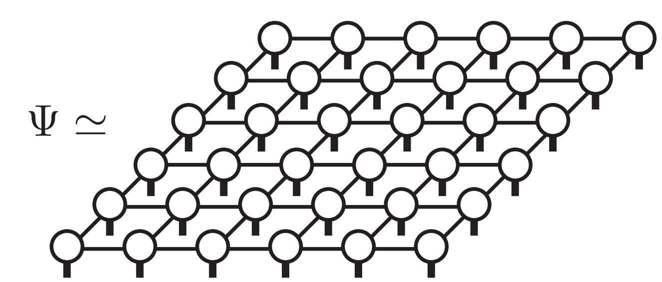
$\sim e^N$の独立要素

テンソルネットワーク分解

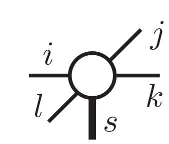


$\sim O(N)$の独立要素

PEPS, TPS (for 2d system)



$T_{ijkl}[s] =$



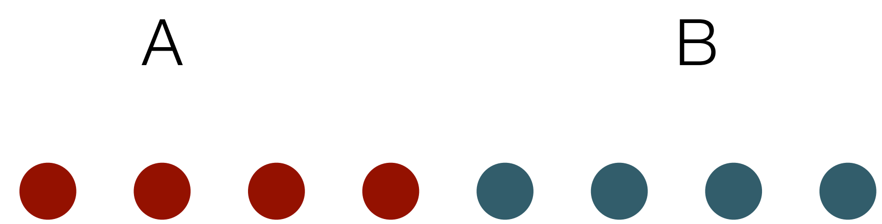
良いネットワークを選ぶことで、量子多体状態を効率的に表現できる

ex. $\boxed{\text{TPS: 独立な要素数} \sim ND^4}$　　D: テンソルTの各足の大きさ

指数関数→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**）：

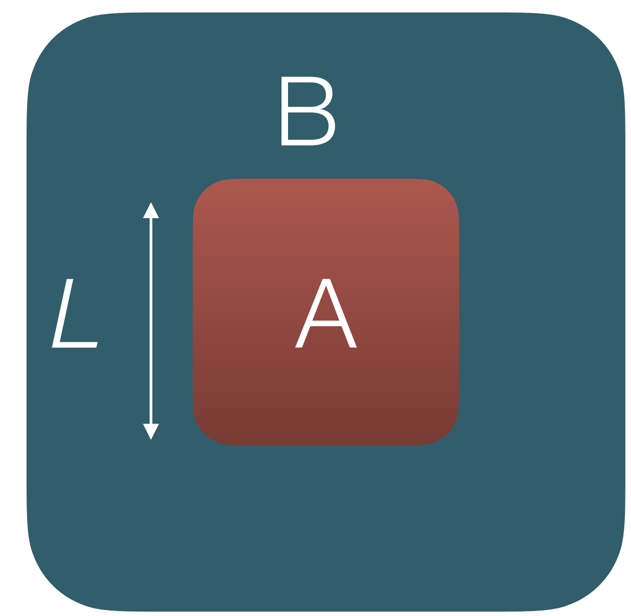


部分系の縮約密度行列:

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

EE= ρ_A のvon Neumann エントロピー

$$S = -\mathrm{Tr}\left(\rho_A \log \rho_A\right)$$



一般の状態ベクトル：

EE は 部分系の体積（スピン数）に比例

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

（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)

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

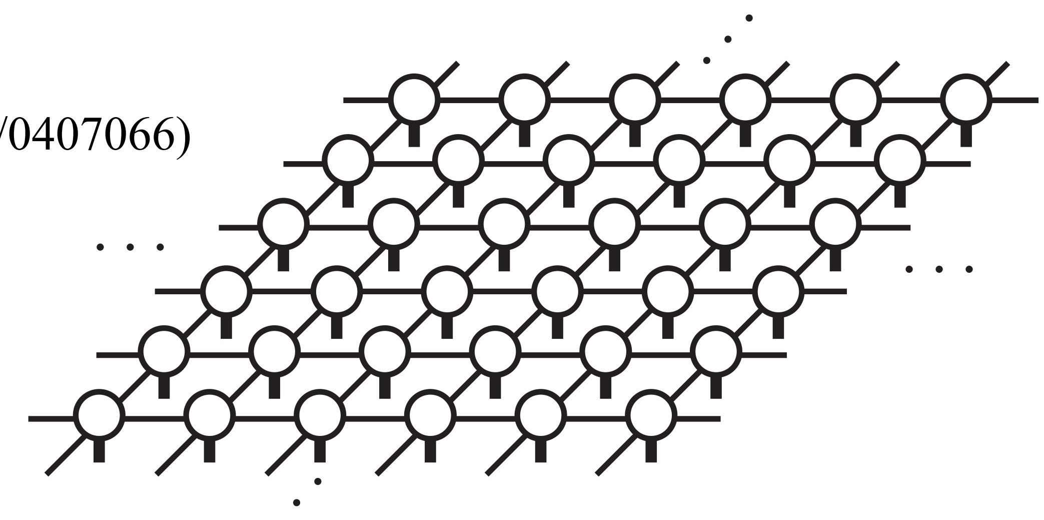
基底状態はヒルベルト空間の狭い部分空間で表現可能

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)

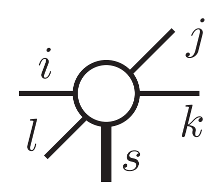


例：2次元正方格子のTPS

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*

Virtual自由度：*i, j, k, l*

$T_{ijkl}[s] =$ 

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係するパラメタ **（*D*→∞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

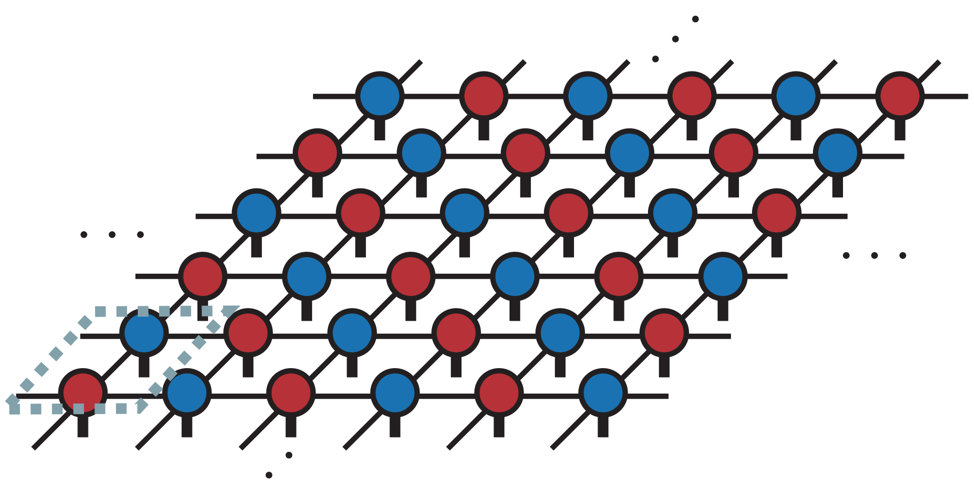
状態ベクトルに並進対称性がある場合：　$\underline{T}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$

並進の演算子　位相はつかない

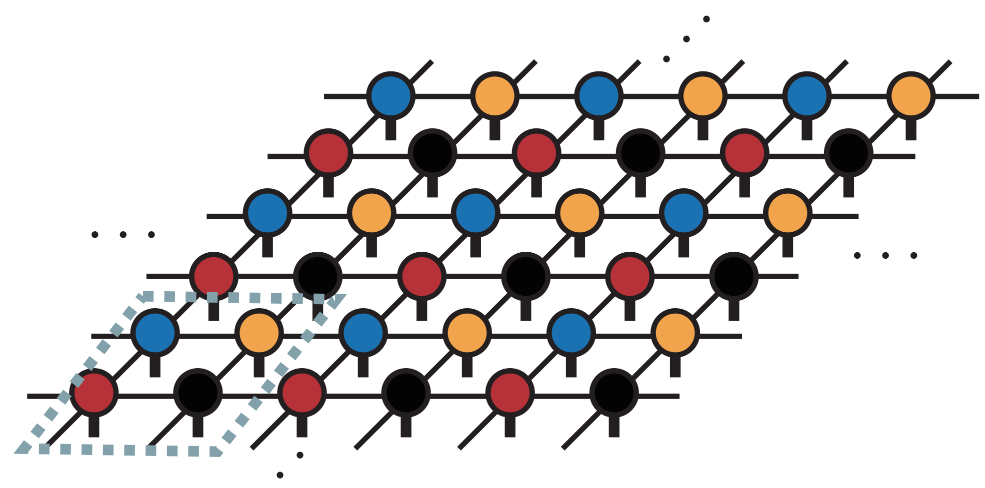
同じテンソルを周期的に（無限に）並べることで、

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

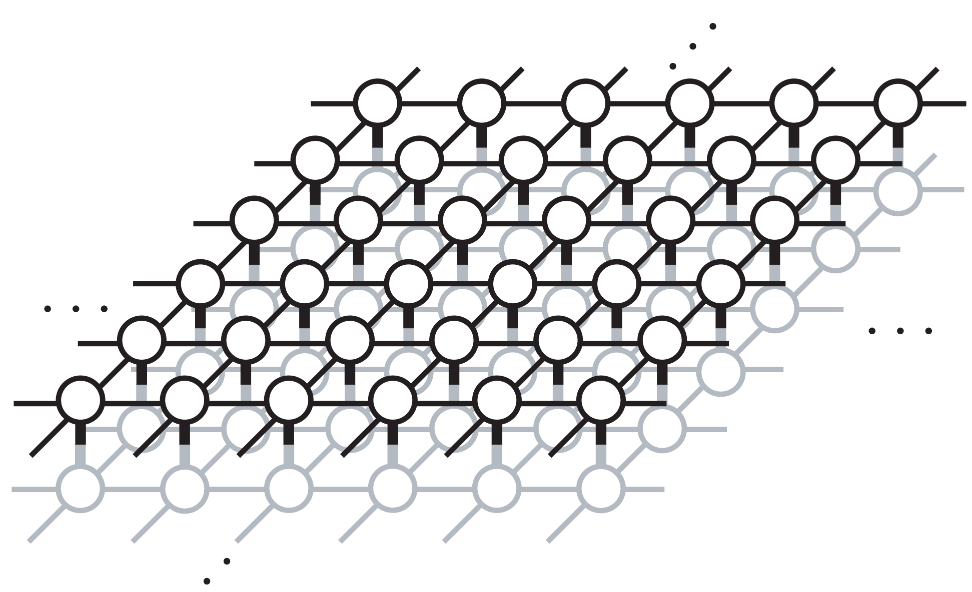
基底状態の物性を調べるためには、

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

$\langle \Psi | \Psi \rangle =$



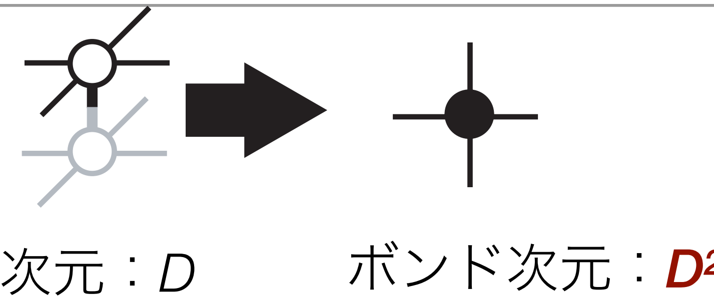
このネットワークの縮約には、
指数関数的に大きな計算量が必要

近似的な縮約

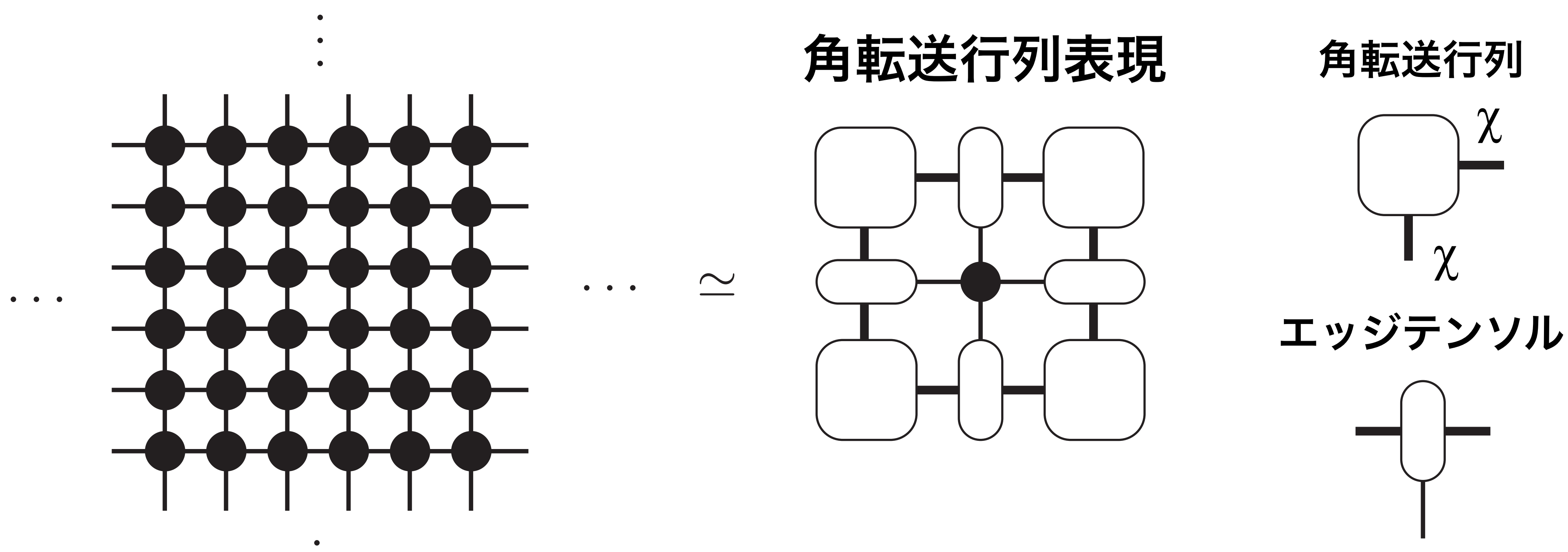
- テンソル繰り込み
- 境界MPS法
- 角転送行列法
- 平均場環境

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：



$\langle\Psi|\Psi\rangle =$



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）

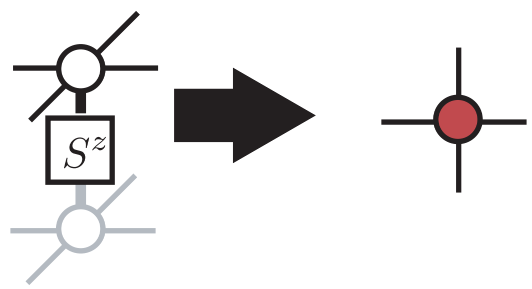
＊χは物理量が収束するように十分に大きく取る

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

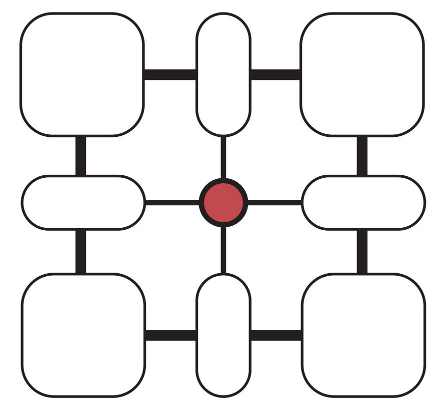
角転送行列法による物理量の計算

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

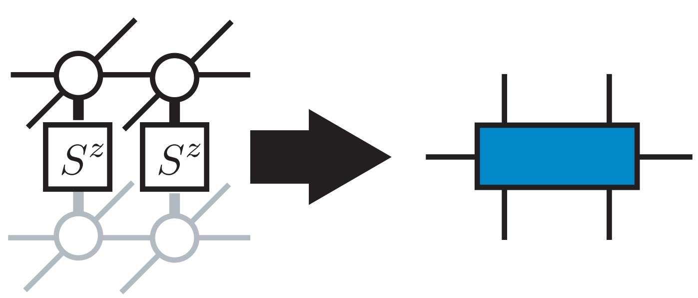
1サイト物理量：



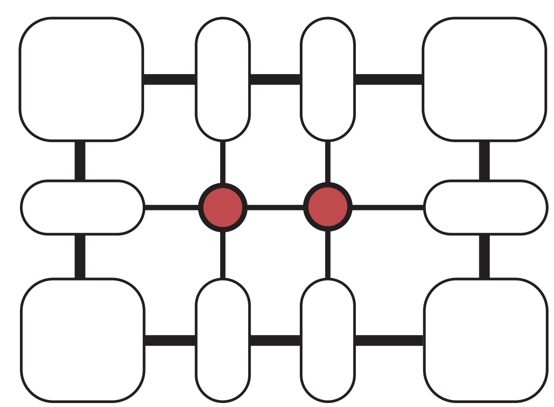
, $\langle\Psi|S^z|\Psi\rangle =$



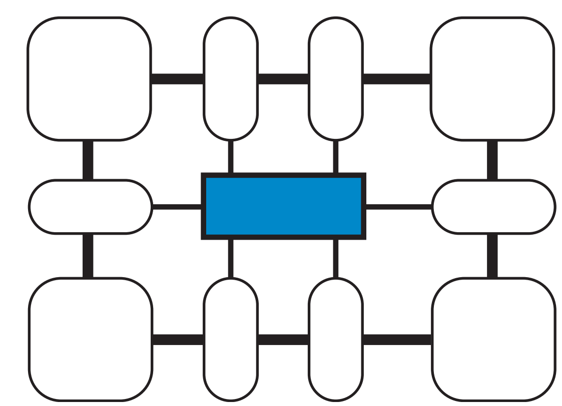
2サイト物理量：



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



$=$



＊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

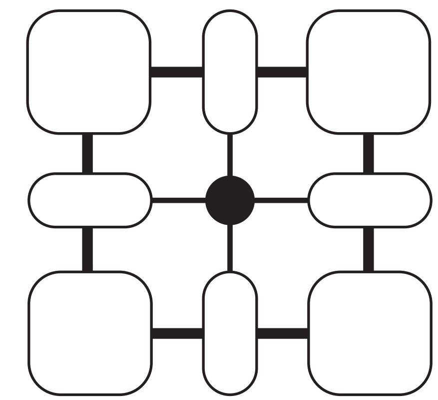
- 対角方向に長距離の相関関数
- 大きなクラスタの多体相互作用

TeNeSでも原理的に計算可能だが、
長時間の計算が必要

角転送行列法と相関長

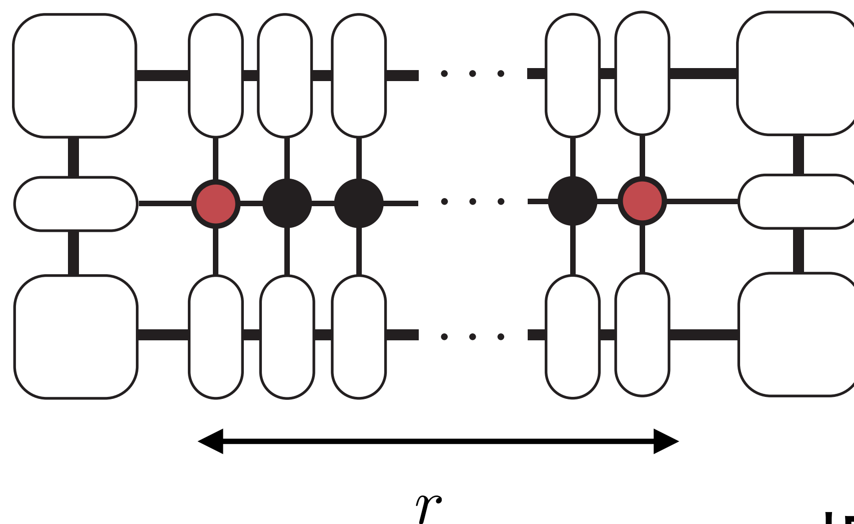
角転送行列を用いれば相関長も計算できる

角転送行列表現

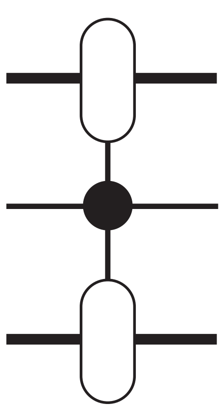


相関関数

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



転送行列



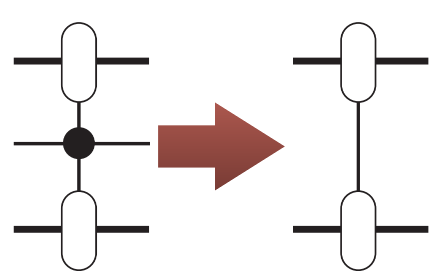
固有値：λ_i

$$|\lambda_0| \geq |\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \cdots$$

相関長

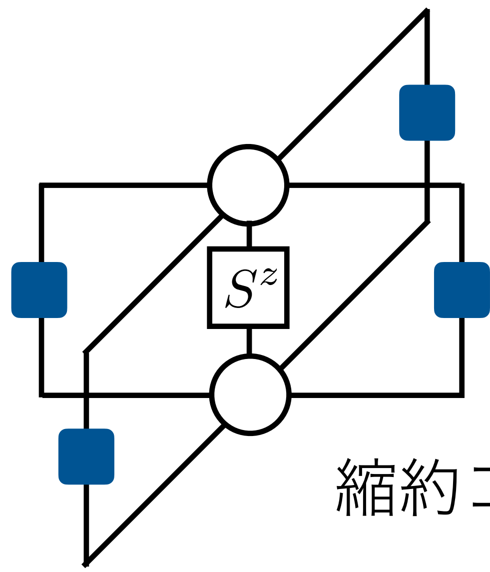
$$\frac{1}{\xi} = -\ln \frac{|\lambda_1|}{|\lambda_0|}$$

＊角転送行列が無限環境を表していることより、中心のテンソルは省略可能。

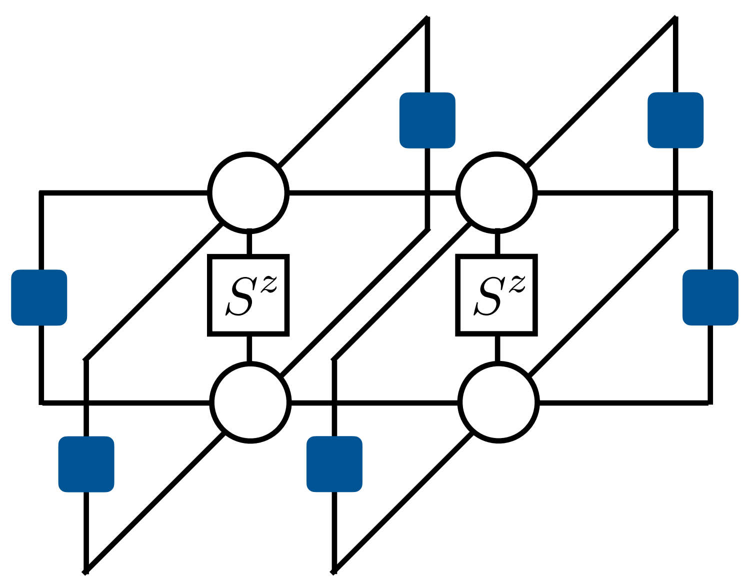


平均場環境

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

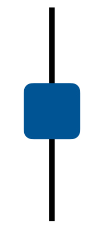
$\langle\Psi|S^z|\Psi\rangle =$ 

縮約コスト：$O(D^4)$

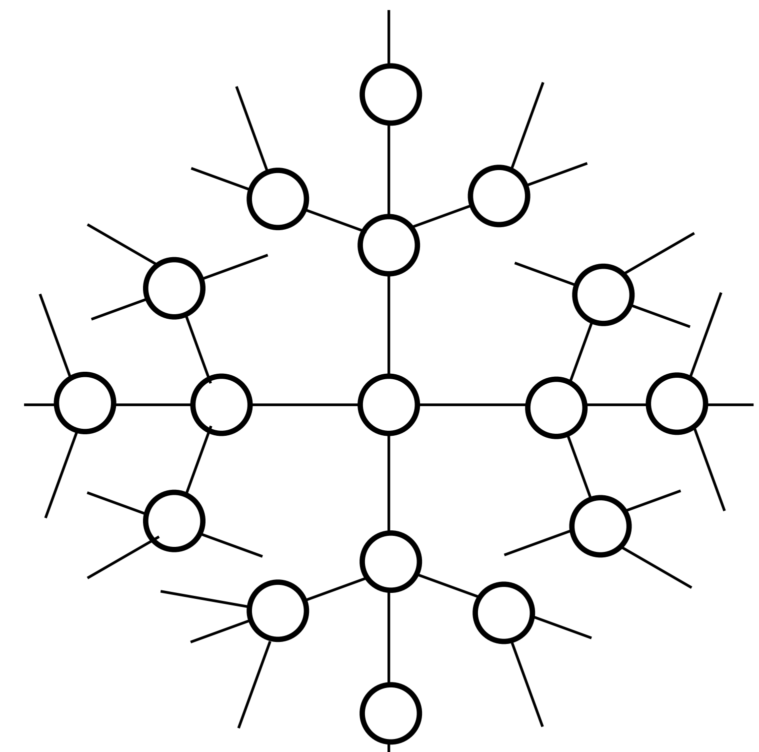
$\langle\Psi|S^z_i S^z_{i+1}|\Psi\rangle =$ 

縮約コスト：$O(D^5)$

$\boxed{\text{計算が非常に軽くなるが、近似も大きい}}$

：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 a*l , Phys. Rev. B **94**, 155123 (2016).

H.-J. Liao *et a*l, 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

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

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

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

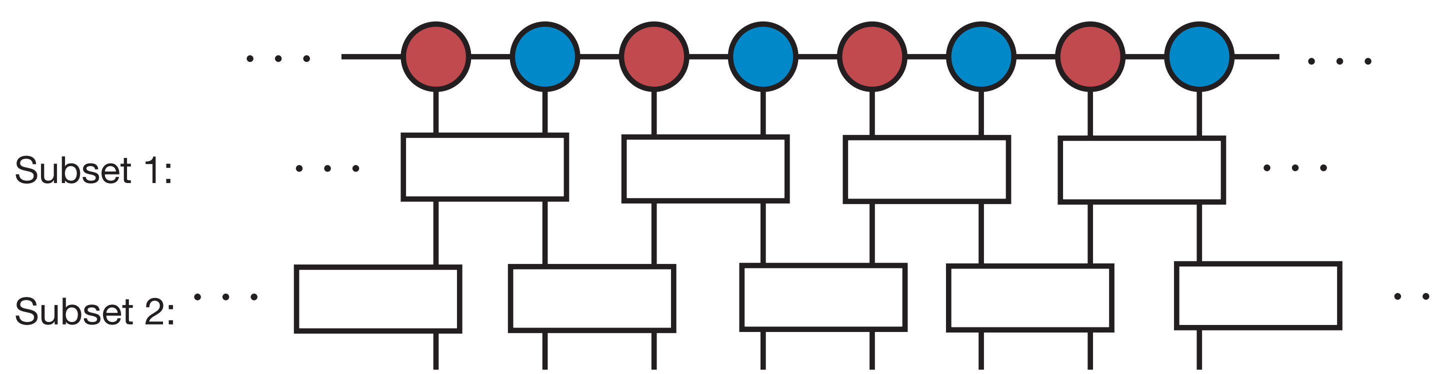
$$e^{-\tau\mathcal{H}} = \prod_{\{(i,j)\}} e^{-\tau H_{ij}} + O(\tau^2)$$

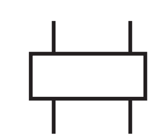
（＊より高次の近似を考えることもできる）

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

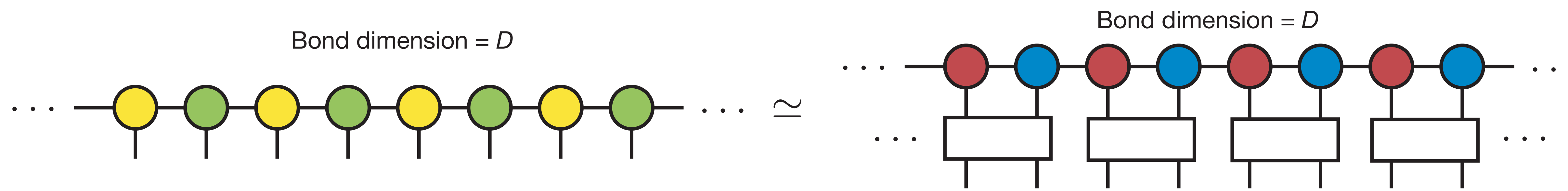


 $= e^{-\tau H_{ij}}$

iTPSの虚時間発展法

打ち切りによる近似

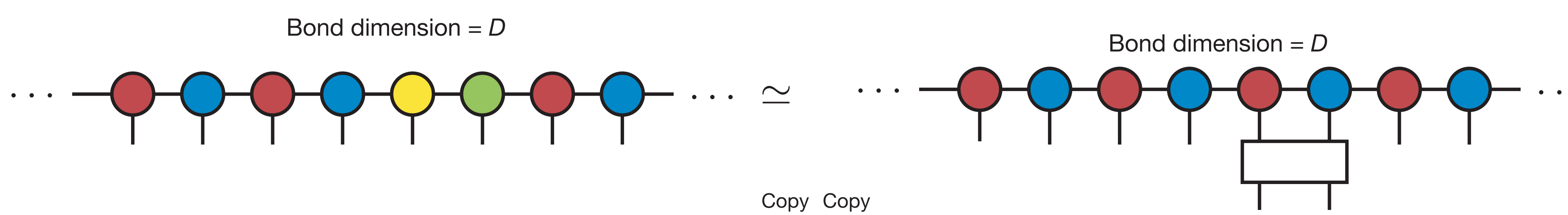
虚時間発展後の状態を再び、iTPSで近似する $|\Psi_\tau^{\mathrm{iTPS}}\rangle \simeq \prod_{\{(i,j)\in\mathrm{subset}_n\}} e^{-\tau H_{ij}}|\Psi^{\mathrm{iTPS}}\rangle$



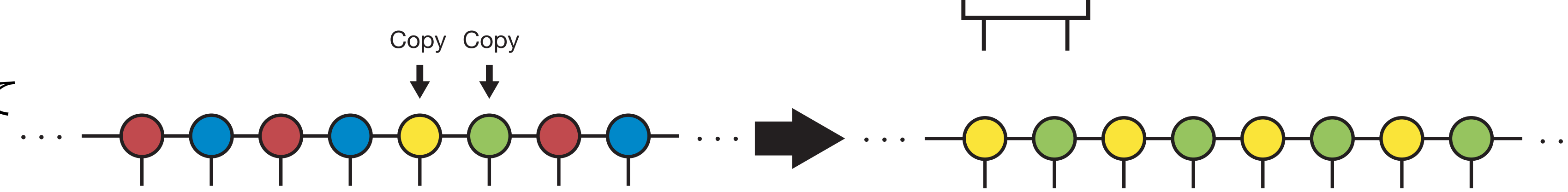
この近似は最小化問題： $\min \left\| |\Psi_\tau^{\mathrm{iTPS}}\rangle - \underline{\prod_{\{(i,j)\in\mathrm{subset}_n\}} e^{-\tau H_{ij}}}|\Psi^{\mathrm{iTPS}}\rangle \right\|^2$

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



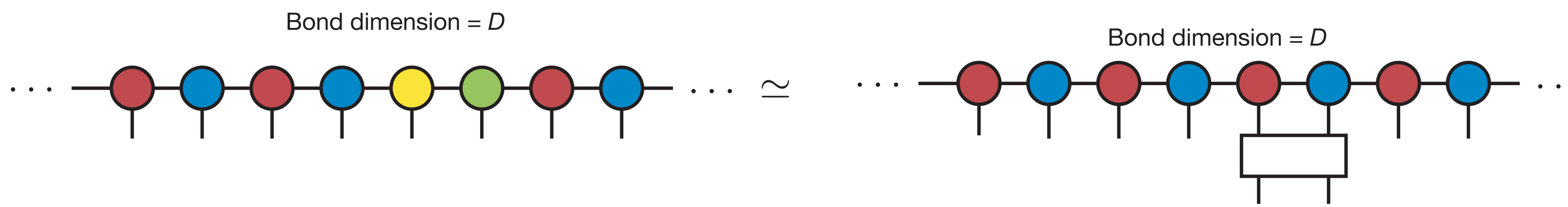
並進対称性を利用して全体にコピー



iTPSの虚時間発展法

最適化問題の解法

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

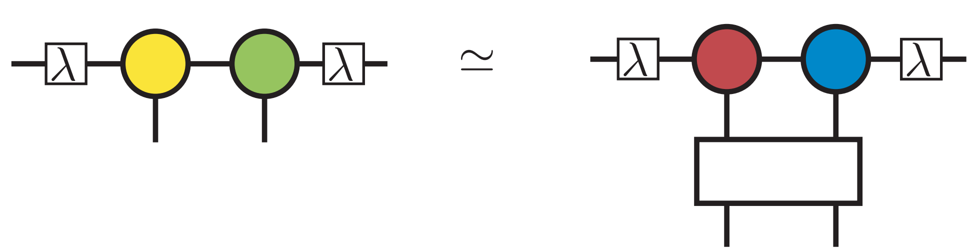


コスト関数は角転送行列を用いて計算可能：$O(D^{10})$

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



$-\boxed{\lambda}-$: 非負の対角行列=近似環境

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

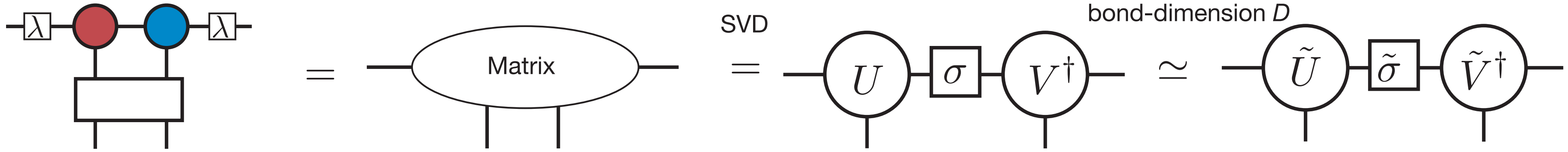
Simple update法 (H. G. Jiang *et al*, Phys. Rev. Lett. **101**, 090603 (2008))

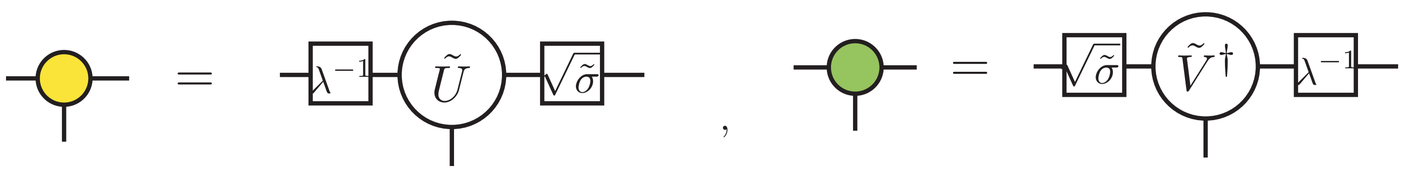
 : 非負の対角行列=近似環境

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）$O(D^5)$ とても軽い！





, $\lambda_{\mathrm{new}} = \sqrt{\tilde{\sigma}}$

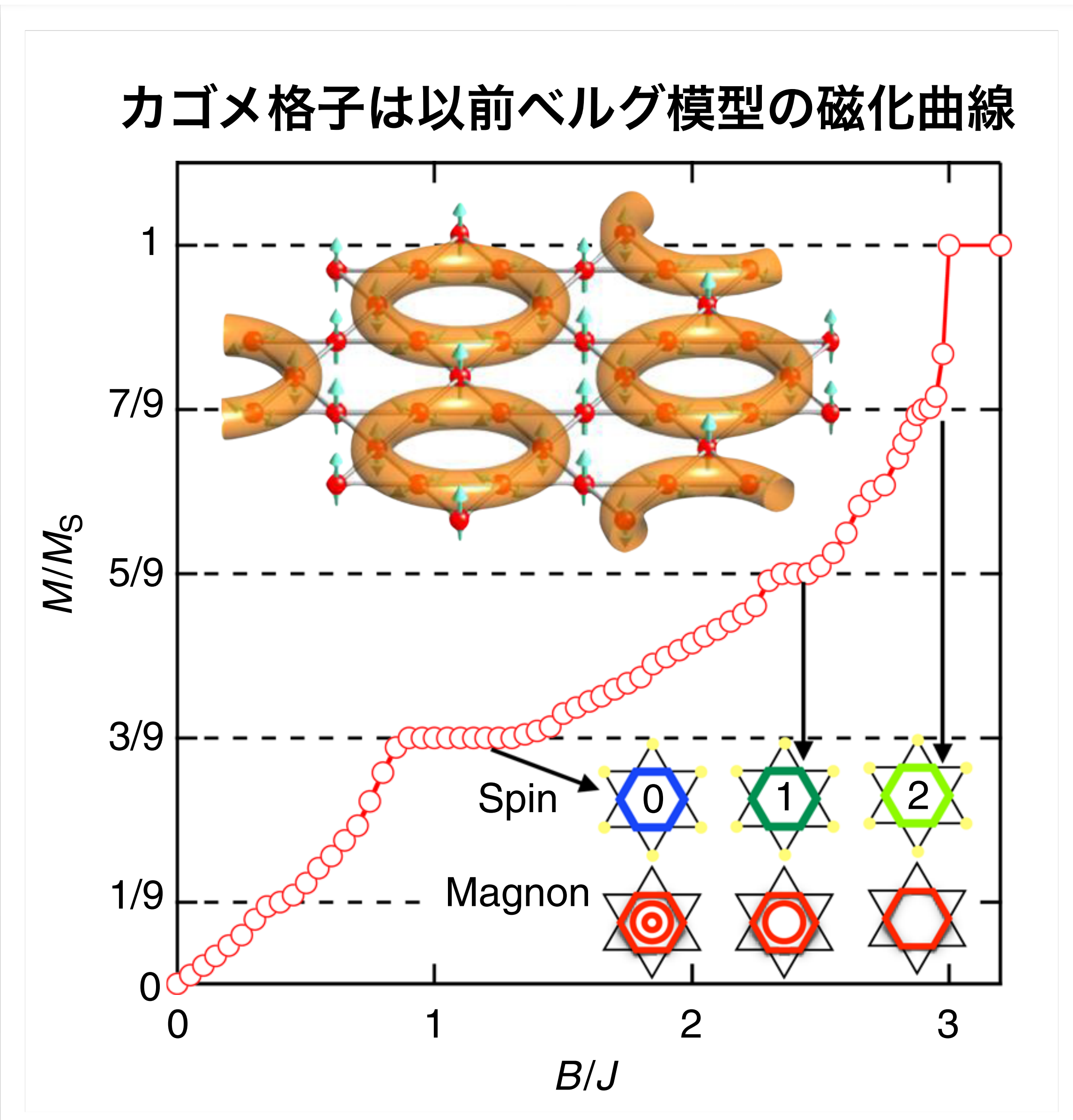
次のステップでの環境として用いる

Simple update法のデメリット：

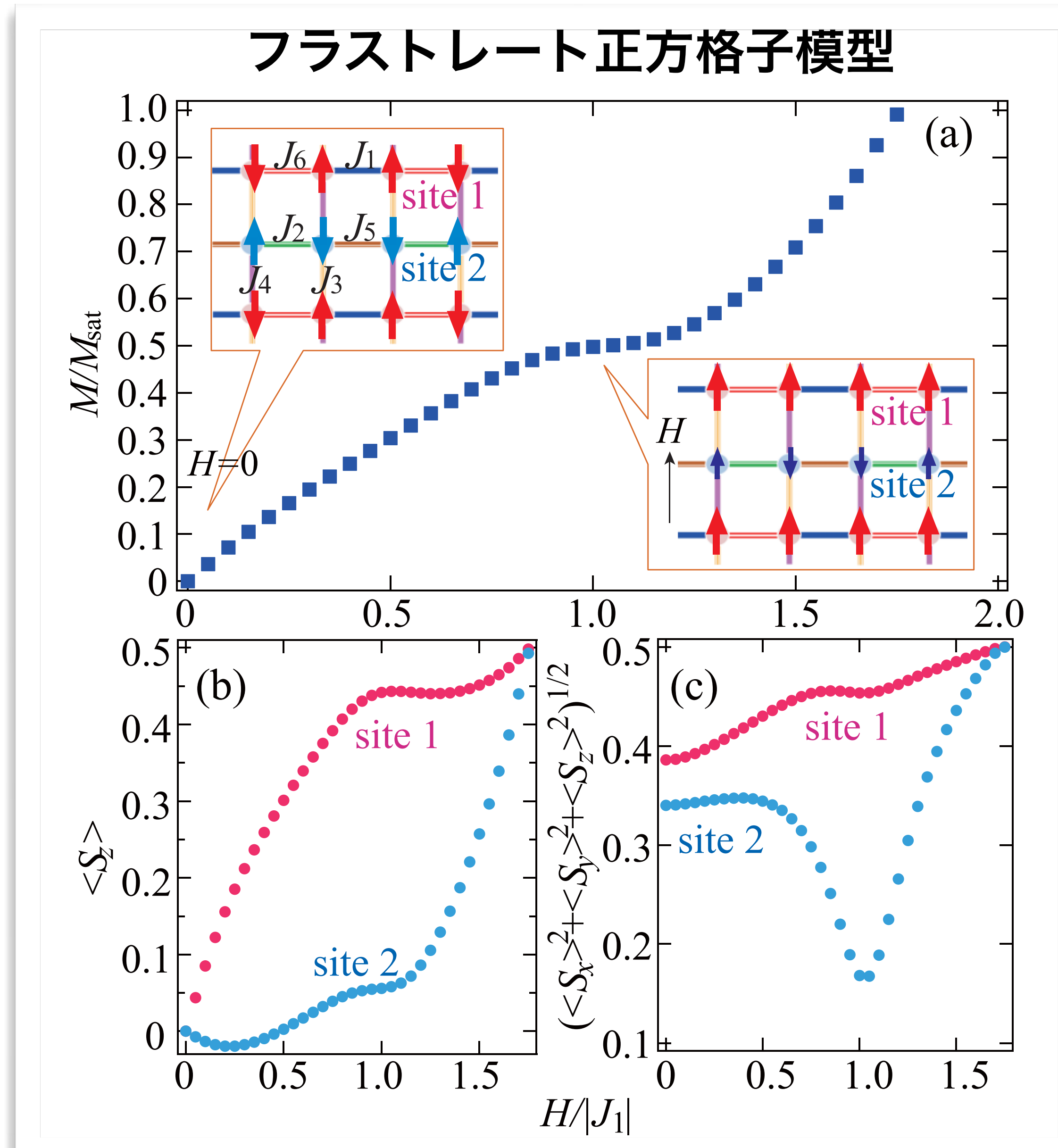
- 初期状態依存性が大きく、不適切な状態に最適化がトラップされる場合がある
- ランダムな状態から始めた場合、長距離相関を成長させることが苦手
  - 量子臨界点近傍などでは、full update法の方が良い

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).

（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（近似は大きいが）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