テンソルネットワーク

留野 倖多

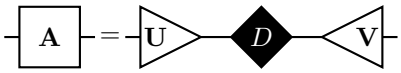
1 はじめに

1 次元の量子多体系を解析する非常に**強力**な手法を紹介します。

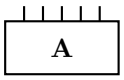
1.1 用語

まず、テンソルとは添え字付けられた表のようなもので、成分は $A_{i_1,i_2,i_3,\dots}$ です。行列の成分は A_{i_1,i_2} なので**行列の拡張**ともいえます。

次に、特異値分解について説明します。行列 $A(m\times n)$ をユニタリ行列 $U(m\times m), V(n\times n)$ と特異値行列 $D(m\times n)$ という対角行列の積 UDV に分解できます。図は、行列が 2 本足の箱、ユニタリ行列 U,V は三角形、対角行列 D は菱形というルールで



となり、テンソルの場合は、階数の分だけ足があります。5 階テンソルだと



です。このルールは**後で出てきます**。

2 行列積状態

量子多体系は状態空間が大きすぎて、そのままでは扱えません。そこでテンソルネットワークを使い、多数の要素のテンソルを少数の要素の行列の積で近似し、情報を効率的に圧縮します。この状態を行列積状態(Matrix Product State; MPS) といいます。

以下では、N 個のサイトに 1/2 スピンが 1 つずつあるという系で考えます。各サイトは↑と↓の 2 状態で、状態空間は $\mathbb{C}^{2^N}$ となります。



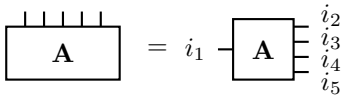
2.1 MPS の構成

N 個のスピン系の状態空間の基底は、各サイト i_n が↑と↓なので 2^N 個あり、それぞれの係数を $A_{i_1,i_2,\dots,i_N}$ とすると、波動関数 Ψ は

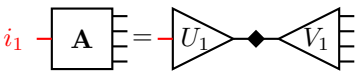
$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1,\dots,i_N=\uparrow,\downarrow} A_{i_1,i_2,\dots,i_N}|i_1 i_2 \dots i_N\rangle$$

と表せます。この係数は N 階のテンソル (=: A) の成分といえます。よって、任意の波動関数は A を用いて表せます。この A を局所的な行列の積に分解していきます。以下 $N=5$ とします (添え字は $i_1 \sim i_5$)。

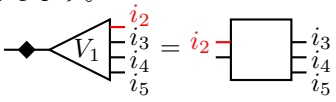
まず、i_1 とその他の添え字に分けることで、2×2^4 の行列とみなします。



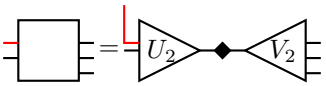
そうすると、特異値分解ができ、2×2 のユニタリ行列 U_1 と特異値、あとは、$2^4\times 2^4$ のユニタリ行列 V_1 がでてきます。



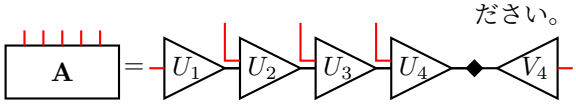
特異値と V_1 の積 (2×2^4) から、i_2 のサイトを取り出して $2^2\times 2^3$ の行列とみなします。



そして、同様に特異値分解をします。



また、特異値と V_2 の積から、今度は i_3 を取り出して $2^3\times 2^2$ の行列とみなして…といったように、これを繰り返すと、波動関数を以下のように、局所的な行列の積に分解することができます (赤線は、テンソルの足に対応)。



こうすると、任意の状態が作れるものの、登場する行列のサイズが 2 の冪乗で大きくなり扱えないため、サイズの上限を決めます。この近似は、エンタングルメントに対する制約になります (Schmidt 分解が、上での特異値分解に相当)。そのため 1 次元量子系以外だと厳しくなります。

いま説明したのは正準形式と呼ばれる MPS の一つです。特徴はユニタリ行列を使って表現していることで、内積をとるとユニタリ性:$U^\dagger U = I$ より全て打ち消し合います。これを用いると、局所的な期待値をとることなどが簡単にできます。

2.2 アルゴリズム

MPS には計算効率の良いアルゴリズムが知られています。たとえば、ハミルトニアンの基底状態を簡単に計算できます。ハミルトニアンを、各サイトに作用する演算子の和に分解すれば、各サイトで最低固有値とその固有ベクトルを計算すれば求まります (DMRG)。また、時間発展も計算できます。ハミルトニアン H の元での時間発展 e^{-iHt} は Trotter 分解を使うことで、偶数サイトと奇数サイトの演算子にわけることで局所的になり、MPS にうまく作用させることができます (TEBD)。

3 まとめ

このポスターでは、テンソルネットワークの一つの手法である、MPS とそのアルゴリズムについて説明しました。まだまだ色々な応用や使い方があるので、よかったらぜひ調べてみてください。