

# テンソルネットワーク形式への入り口

## イジング模型のテンソルネットワーク表現から

西野友年 (神戸大)

《導入》 テンソルネットワーク形式 (Tensor-Network Formulation) とは、量子力学の作用積分、場の理論の伝播関数・相関関数、あるいは統計力学の要である分配関数を、局所的な重率を表す「テンソルの縮約」で表現しようとする理論形式である。興味深いことに、初等的な統計力学で習う2次元イジング模型 (2D Ising Model) のボルツマン重率は、自然な形でテンソルネットワークの一種である、バーテックス模型 (Vertex Model) として記述できる。この事実を足がかりとして、まずはテンソルネットワーク形式に慣れ、「活用方法への発想」について足がかりを得ることが、本稿の目的である。以下では主として統計力学系に着目して話を進めるが、殆ど全ての内容について「量子・古典対応」(~経路積分)を通じ、そのまま量子物理学系へと持ち込むことができる。テンソルネットワークの重要な一例である行列積状態 (Matrix-Product State, MPS) についてまず学び、局所的なテンソルの縮約が持つ汎用性を垣間見よう。テンソルネットワーク繰り込み群 (Tensor Network Renormalization, TNR) など、最先端の研究へと至る経緯についても、概略を紹介する。

まず、MPS の歴史に触れておこう。統計力学の分野では、2次元イジング模型に対する Kramers-Wannier 近似に、MPS の起源を見ることができる。[1.(1941)] この論文の Abstract には、“A new closed form approximation of the partition function  $\lambda$  is then developed by using the matrix method in its variational form” という、驚くべき一文が含まれているのだ。転送行列の最大固有値を変分評価するこの近似は、菊池の近似を経て、Baxter によって更に改良され、角転送行列 (Corner Transfer Matrix, CTM) の手法として整備された。[2.(1968)] MPS を変分関数として用い、それを数値計算により最適化する手法が、既にこの時点で「ほぼ完成した形で」提供されていたのである。20年以上、世に先んじていたと表現しても過言ではない。後年、Haldane Gap の存在を数値的に示した Nightingale と Blöte は、論文の片隅に「Baxter の手法は、そのまま量子系にも使用出来る」と書いてある。[3.(1985)] 重要なものは何度でも再発見されるものだ。— MPS も例外ではない。非平衡統計力学の確率分布に対して、Derrida が示した構成方法は空間的に非対称な MPS である。[4.(1992,1993)] 量子系に目を転じると、相関長が有限である場合の、1次元量子基底状態を表現する方法として、Valence Bond Solid (VBS) 状態 [5.(1987)] や Finitely Correlated State が提唱された。[6.(1989)] また、Rommelse と den Nijs も、量子・古典対応の観点から、同等な形式へと至っている。[7.(1987,1989)] 特に VBS 状態は、2次元以上の量子系に対しても構成できることが特徴的である。このように、MPS の活用が各分野で同時期に、独立して研究された事実は不思議なものである。

繰り込み群の視点から MPS へと至る研究の流れにも注目したい。Wilson はフェルミ面近傍の状態に 対数離散化 を導入して、近藤不純物問題を 1次元格子の問題へと還元し、[8.(1975)] この模型の解析のために「ブロックスピン描像」[9.(1966)] を取り入れた数値繰り込み群手法を

開発した。Wilson の手法では、ブロックスピンに残す状態を、「孤立させた部分系」の固有エネルギーを参照して決定した。この処方是不純物問題には有効であったが、一様な系には向いていなかった — その理由が明確になったのは 21 世紀に入ってからのことである。これに対して、ブロックスピン変換を「波動関数に対する特異値分解」から構成する処方を提案したものが、強相関係の代表的な数値計算手法として、今日幅広く利用されている密度行列繰り込み群 Density Matrix Renormalization Group (DMRG) である。[10.(1992)] 従来にない精度で 1 次元量子系の基底エネルギーを与える DMRG の特徴が、MPS を試行関数とする変分法であることに起因している仕組みは、Ostlund と Rommer によって明らかにされた。[11.(1995)] また、この変分描像が Baxter の CTM 手法で既実装されていたことが、Okunishi らによって明らかにされた。[12.(1996)]

以上の経緯を経て MPS が波動関数の構成に高い近似能力を持つことがわかり、DMRG の高精度計算を 2 次元系へと拡張する試行が始まった。先に述べたように、VBS 状態は何次元でも定義可能なものであり、MPS の高次元版である Tensor Product State (TPS) そのものは、DMRG 以前から知られていた訳である。ハミルトニアン各項が MPS・TPS に対してゼロ固有値を与えるという VBS 状態の特徴を、より広いクラスの模型について探索する試みは、Niggemann らによって検討されている。[13.(1997)] Hieida は 2 次元 VBS 状態の内積や演算子期待値を、DMRG を用いて数値的に求めて見せた。[14.(1999)] Martín-Delgado らによって、厳密解から 2D TPS へのアプローチも検討された。[15.(2001)] 物性物理の諸問題に対して TPS を変分関数として用いようとする場合には、その最適化の手続きが問題となる。Nishino と Okunishi は 3 次元古典イジング模型の熱力学解析に、制限された形の TPS を用いる Kramers-Wannier 近似が「良い変分自由エネルギー」を与えることを見出した。[16.(2000)] また、その拡張として全てのテンソル要素を調整可能なパラメータとする TPS 用い、変分自由エネルギーが最大となるよう、TPS を自動的に最適化する計算方法を提唱した。[17.(2001)] これらの 2 次元化された TPS 形式は後に、量子情報の観点から「再発見」され、元来の TPS の名称に加えて、Projected Entangled-Pair State (PEPS) の名でも一般に知られるようになった。[18.(2004)]

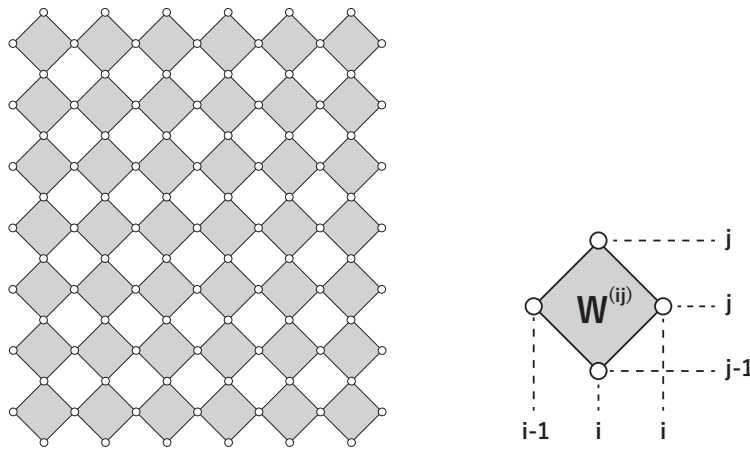
今世紀に入ると、MPS や TPS を用いた物理系の解析へ、新しい概念としてエンタングルメント (Entanglement) が速やかに浸透した。繰り込み群変換では伝統的に「物理的に重要な自由度を捨てる」ことが意識されて来たが、この目標が「量子力学的な情報エントロピー」であるエンタングルメント・エントロピーを可能な限り保持することと、ほぼ同義であることが認識されるようになったのだ。例えば、DMRG で導入された「波動関数の特異値分解 (Singular Value Decomposition, SVD)」によるブロックスピン状態の選択は、部分系と“熱浴”の間のエンタングルメントを最大化する計算方法であることが判明した。そしてこの新しい視点から、旧来の実空間繰り込み群 [19.(1982)] を見直そうとする試みが始まった。その最も顕著な進歩は、Vidal による Multi-scale Entanglement Renormalization Ansatz (MERA) によってもたらされた。[20.(2006)] テンソルネットワーク形式を「繰り込み群の階層」を持つ量子回路として構成すれば、変分状態のハミルトニアンに対する最適化が、実行可能な数値計算量に収まることが判明したのだ。繰り込み群変換に先立つエンタングルメント解消 (Disentangler) と、長距離相関を取り持つ、高い階層のテンソル結合の存在が MERA の特徴である。MERA の階層構造は「直交ウェーブレット」と深い関係にあり、Wilson がかつて行った対数離散化の選択を、より自然な形で理解することが可能になった。[21.(2016)]

MERA は当初、量子系のみにも適用可能であった。古典統計系に対しては、ブロックスピン自

自由度を局所テンソルの特異値分解によって構成する実空間繰り込み群形式が発展した。例えば Tensor Entangled Renormalization Group (TERG) は、臨界系では計算量が増大する短所はあるものの、汎用性の高い計算方法として使われて来た。[22.(2007)] 高次元系への拡張も行われ、特異値分解を一般化して計算を進める Higher-order Tensor Renormalization Group (HOTRG) では、3次元イジング模型の相転移温度を、モンテカルロ法による計算に迫る精度で与えることに成功した。[23.(2012)] MERA と TERG、この2つの計算方法は、ごく最近 Evenbly らによってテンソルネットワーク繰り込み群 (Tensor Network Renormalization, TNR) として統一された。[24.(2014)] この TNR で画期的なことは、臨界点において繰り込み群変換が階層に依存しなくなるという、Wilson 以来の「固定点の存在仮定」が、ついに具体的な形で精密観測されたことである。エネルギーを主眼とする前世紀の視点から、情報エントロピーへと視点を移して行く今世紀の試みは、少なくとも今後しばらくの間は続きそうである。— 少しでも歴史を紹介するつもりが、長くなってしまった。( 著者の記憶違いが幾つかあるかもしれない。ご容赦を。)

## 1 イジング模型のバーテックス表現

2次元正方格子イジング模型を例に、テンソルネットワークの簡単な構成方法をひとつ紹介する。議論を単純にするため、以下ず〜〜と「対角線方向」に向けた有限格子を扱おう。モデル固有の特徴を利用することもあるが、一般性を失わないように拡張することは、軽微な工夫で可能だ。<sup>1</sup>



図に示すように、対角線が水平・垂直方向になる正方形 (薄く塗ってある) を横に  $N$  個並べ、縦に  $M$  段積み上げた格子を考えよう。正方形の四隅には、 $\pm 1$  の値を取るスピン (Ising Spin, 白丸) があり、次のように位置のラベルを付ける。最下部に並ぶ  $N$  個を  $\sigma_1^{(0)}, \sigma_2^{(0)}, \dots, \sigma_N^{(0)}$  で表そう。これらは「最下段の正方形」の下側に位置している。最下段の正方形と、ひとつ上の段の正方形が共有している  $N$  個は  $\sigma_1^{(1)}, \sigma_2^{(1)}, \dots, \sigma_N^{(1)}$  で表し、段が上がる毎に肩文字を増やして行くと、最上部の  $N$  個は  $\sigma_1^{(M)}, \sigma_2^{(M)}, \dots, \sigma_N^{(M)}$  となる。また、ラベル付けされていないスピンの半分残っている。最下段の正方形の左右に位置するスピンを、左から  $s_0^{(1)}, s_1^{(1)}, s_2^{(1)}, \dots, s_N^{(1)}$

<sup>1</sup>論文などで「一般性を失わない」という断り書きを目にすることも多いだろう。明示的に書いておかないと、「論文 A はモデルの特殊性に頼ったものであったが」といった揶揄を外野から受け続ける可能性があるのだ。

と表そう。今度は肩文字を<sup>(1)</sup>から始め、1段上がるごとに数を増して行くので、最上段の正方形の左右に位置するスピンは $s_0^{(M)}, s_1^{(M)}, s_2^{(M)}, \dots, s_N^{(M)}$ となる。 $j$ 段目の、左から $i$ 番目の正方形は $\begin{pmatrix} & \sigma_i^{(j)} & \\ s_{i-1}^{(j)} & & s_i^{(j)} \\ & \sigma_i^{(j-1)} & \end{pmatrix}$ に囲まれている。例えば左下の隅は $\begin{pmatrix} & \sigma_1^{(1)} & \\ s_0^{(1)} & & s_1^{(1)} \\ & \sigma_1^{(0)} & \end{pmatrix}$ だ。

簡単のために外部磁場が $h = 0$ である場合に話を限ると、全系のハミルトニアン $H$ は隣り合うスピン間に働く強磁性的な Ising 相互作用の和で表され、正方形ごとに整理すると

$$H = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \left[ -J \left( \sigma_i^{(j-1)} s_{i-1}^{(j)} + s_{i-1}^{(j)} \sigma_i^{(j)} + \sigma_i^{(j)} s_i^{(j)} + s_i^{(j)} \sigma_i^{(j-1)} \right) \right] \quad (1)$$

と書ける。但し $J > 0$ は相互作用の強さを表す定数だ。全てのスピンを記号 $\{\sigma, s\}$ で表すと、温度 $T$ での分配関数 $Z$ は「あらゆるスピン配列についての和」で与えられる。

$$Z = \sum_{\{\sigma, s\}} \exp \left[ \frac{J}{k_B T} H(\{\sigma, s\}) \right] \quad (2)$$

但し $k_B$ はボルツマン定数である。スピン配列に制限を付けなかったので、自由境界条件を設定したことになる。和に含まれる項の数は $N$ や $M$ とともに指数関数的に増大して行くので、仮に $Z$ を数値的に求める場合、片端から足し算を実行することは現実的ではない。<sup>2</sup>

ここで我々は「局所テンソル」 $W^{(ij)}$ を導入する。次のように定義しよう。

$$W^{(ij)} = W \left( \begin{array}{ccc} & \sigma_i^{(j)} & \\ s_{i-1}^{(j)} & & s_i^{(j)} \\ & \sigma_i^{(j-1)} & \end{array} \right) = \exp \left[ \frac{J}{k_B T} \left( \sigma_i^{(j-1)} s_{i-1}^{(j)} + s_{i-1}^{(j)} \sigma_i^{(j)} + \sigma_i^{(j)} s_i^{(j)} + s_i^{(j)} \sigma_i^{(j-1)} \right) \right] \quad (3)$$

向かって左が「最も省略した形」、真ん中が「スピン変数を明示したもの」で、右端が定義を与える。(位置を示す $i$ と $j$ が、式のどこかに含まれていれば、適当に省略しても誤解は産まない...だろう。)ともかくも、4つのスピン変数を、それぞれ「テンソルの足」とみなすわけだ。<sup>3</sup>

《バーテックス》 $W^{(ij)}$ の足であるスピンは、ちょうど「十字」の上下左右に位置している。道路が交差する点や、枝の分岐にも見えるので、この十字をバーテックス(Vertex)と呼ぶ習慣がある。 $W^{(ij)}$ は古典格子模型の統計力学解析でバーテックス重率(Vertex Weight)と呼ばれて来たものの一例となっている。全ての $W^{(ij)}$ の積を取ったものはEq.(2)の右辺に現れる、全系のボルツマン重率であり、このようにバーテックス重率で表現される格子上の統計モデルを、バーテックス模型(Vertex Model)と呼ぶ。

テンソル $W^{(ij)}$ の左右の足 $s_{i-1}^{(j)}$ と $s_i^{(j)}$ が、上下の足 $\sigma_i^{(j)}$ と $\sigma_i^{(j-1)}$ とは少し異なる働きを持つ

<sup>2</sup>イジング相互作用の場合、分配関数 $Z$ を解析的に求められる。但しこれは、我々の今の目的ではない。

<sup>3</sup>行列 $A$ の要素は $a_{ij}$ と「2つの足」を持つ。3つ以上の足を持つものをテンソルと呼び、Eq.(3)の $W^{(ij)}$ は「四つ足」のテンソルである。ここでは、いわゆる「テンソルの変換性」は問題にしない。

ていることに注意しよう。隣り合う  $W^{(ij)}$  と  $W^{(i+1j)}$  を並べ、 $s_i^{(j)}$  について和を取ると

$$\sum_{s_i^{(j)}} W \begin{pmatrix} & \sigma_i^{(j)} & \\ s_{i-1}^{(j)} & & s_i^{(j)} \\ & \sigma_i^{(j-1)} & \end{pmatrix} W \begin{pmatrix} & \sigma_{i+1}^{(j)} & \\ s_i^{(j)} & & s_{i+1}^{(j)} \\ & \sigma_{i+1}^{(j-1)} & \end{pmatrix} = X \begin{pmatrix} & \sigma_i^{(j)} & \sigma_{i+1}^{(j)} & \\ s_{i-1}^{(j)} & & & s_{i+1}^{(j)} \\ & \sigma_i^{(j-1)} & \sigma_{i+1}^{(j-1)} & \end{pmatrix} \quad (4)$$

と、新しいテンソル  $X$  が得られる。(和を取った  $s_i^{(j)}$  は右辺には現れない。)このように、隣接するテンソルが共有する変数について和を取り、新しいテンソルを得る計算を「テンソルの縮約」と呼ぶ。上式のように、スピン変数を全て表に出して記述すると、スペースを取るのので、略記する方法が様々ある。Eq. (4) を、上下の足である幾つかの  $\sigma$  を全て省略して書いてみよう。

$$\sum_{s_i^{(j)}} \hat{W}(s_{i-1}^{(j)}, s_i^{(j)}) \hat{W}(s_i^{(j)}, s_{i+1}^{(j)}) = \hat{X}(s_{i-1}^{(j)}, s_{i+1}^{(j)}) \quad (5)$$

ちょっと (!) 量子力学の演算子のように “ $\hat{\phantom{x}}$ ” 記号を使ってみた。この計算は「行列の掛け算」に見えて来ないだろうか? (行列次元は 2 だ。)この行列としての構造が納得できれば、 $s_i^{(j)}$  の方を省略し、Eq. (4) を次のように書くことも可能だ。

$$W \begin{bmatrix} \sigma_i^{(j)} \\ \sigma_i^{(j-1)} \end{bmatrix} W \begin{bmatrix} \sigma_{i+1}^{(j)} \\ \sigma_{i+1}^{(j-1)} \end{bmatrix} = X \begin{bmatrix} \sigma_i^{(j)} & \sigma_{i+1}^{(j)} \\ \sigma_i^{(j-1)} & \sigma_{i+1}^{(j-1)} \end{bmatrix} \quad (6)$$

ついでに、 $j$  段目のテンソル全てを掛け合わせて、 $s_0^{(j)}, s_1^{(j)}, \dots, s_N^{(j)}$  について和を取ったもの

$$\sum_{s_0^{(j)}} \dots \sum_{s_N^{(j)}} \prod_{i=1}^N W^{(ij)} = T \begin{pmatrix} \sigma_1^{(j)} & \sigma_2^{(j)} & \dots & \sigma_N^{(j)} \\ \sigma_1^{(j-1)} & \sigma_2^{(j-1)} & \dots & \sigma_N^{(j-1)} \end{pmatrix} = T^{(j)} \quad (7)$$

も考えてみよう。これは、統計力学ではお馴染みの転送行列で、 $T^{(j)}$  は上下から「スピンの段」 $\sigma_1^{(j-1)}, \sigma_2^{(j-1)}, \dots, \sigma_N^{(j-1)}$  と  $\sigma_1^{(j)}, \sigma_2^{(j)}, \dots, \sigma_N^{(j)}$  に“挟まれて”いる。下から上へと「転送する」方向で  $T^{(j)}$  を眺める場合には、 $T(\sigma_1^{(j)}, \dots, \sigma_N^{(j)} | \sigma_1^{(j-1)}, \dots, \sigma_N^{(j-1)})$  とスピンの段を横に並べて書く方が見易いかもしい。

《MPO》 上の Eq. (7) は、Eq. (5) のように「行列の積」を繰り返した形で書ける。

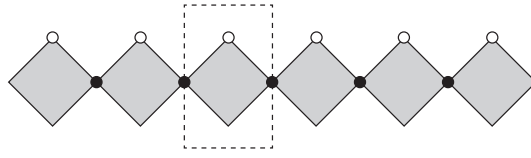
$$\hat{T}^{(j)} = \sum_{s_0^{(j)}} \sum_{s_1^{(j)}} \dots \sum_{s_N^{(j)}} \hat{W}(s_0^{(j)}, s_1^{(j)}) \hat{W}(s_1^{(j)}, s_2^{(j)}) \dots \hat{W}(s_{N-1}^{(j)}, s_N^{(j)}) \quad (8)$$

この  $\hat{T}^{(j)}$  は、スピンの並んだ「状態」に作用する演算子(の要素)とみなすこともできて、Matrix Product Operator (MPO) とも呼ばれる。Eq. (6) と同じように、

$$T^{(j)} = \sum_{s_0^{(j)}} \sum_{s_N^{(j)}} W \begin{bmatrix} \sigma_1^{(j)} \\ \sigma_1^{(j-1)} \end{bmatrix} W \begin{bmatrix} \sigma_2^{(j)} \\ \sigma_2^{(j-1)} \end{bmatrix} \dots W \begin{bmatrix} \sigma_N^{(j)} \\ \sigma_N^{(j-1)} \end{bmatrix} \quad (9)$$

という「行列の足を省略した形」でも書ける。左右両端のスピン  $s_0^{(j)}$  と  $s_N^{(j)}$  についての和を忘れないように。





Eq. (9) と同様に「行列の足  $s$  を隠して」 $\sigma$  の方だけを明示すると、「行列  $D$  の積の形」で書くこともできる。(但し、左端の  $L$  は行ベクトル、右端の  $R$  は列ベクトルとみなす。)

$$\Psi(\sigma_1^{(1)}, \sigma_2^{(1)}, \dots, \sigma_N^{(1)}) = L[\sigma_1^{(1)}] D[\sigma_2^{(1)}] D[\sigma_3^{(1)}] \cdots D[\sigma_{N-1}^{(1)}] R[\sigma_N^{(1)}] \quad (13)$$

《MPS》  $\Psi^{(1)}$  は行列積 Eq. (13) で与えられるので、行列積あるいは行列積 (波動) 関数と呼ぶ。 $\Psi^{(1)}$  を量子力学の波動関数に見立てると、対応する量子力学的な状態は

$$|\Psi^{(1)}\rangle = \sum_{\sigma_1^{(1)}} \cdots \sum_{\sigma_N^{(1)}} L[\sigma_1^{(1)}] D[\sigma_2^{(1)}] \cdots D[\sigma_{N-1}^{(1)}] R[\sigma_N^{(1)}] |\sigma_1^{(1)}, \sigma_2^{(1)}, \dots, \sigma_N^{(1)}\rangle \quad (14)$$

と表せ、これを行列積状態 (Matrix Product State, MPS) と呼ぶ。ただ、波動関数と状態の関係は上式に示した通り、1対1なので、「 $\Psi^{(1)}$  が表す MPS」を省略して「MPS  $\Psi^{(1)}$ 」と書く“乱れた言葉遣い”も許容されることが多い。

いま考えた行列積  $\Psi^{(1)}$  は「行列の足」となる  $s_i^{(1)}$  が  $\pm 1$  の2つの値を取るので、MPS を構成する行列の次元は全て2である。後で示す(?) ように、行列をそれぞれ持っておけば充分であって、 $\Psi^{(1)}$  を明示的に持つ必要はない。そもそも、 $\Psi^{(1)}$  は  $2^N$  個もの要素を持つので、系の幅  $N$  が大きな場合には、数値的計算の途中で  $\Psi^{(1)}$  の全要素を計算機に格納することは事実上不可能だ。

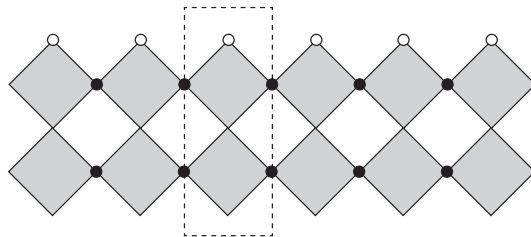
さて、 $\Psi^{(1)}$  に転送行列  $T^{(2)}$  を作用させよう。短く書くと  $\Psi^{(2)} = T^{(2)} \Psi^{(1)}$  で、スピン変数  $\sigma$  を明示した式では次のように書ける。<sup>4</sup>

$$\Psi(\sigma_1^{(2)}, \dots, \sigma_N^{(2)}) = \sum_{\sigma_1^{(1)}} \cdots \sum_{\sigma_N^{(1)}} T(\sigma_1^{(2)}, \dots, \sigma_N^{(2)} | \sigma_1^{(1)}, \dots, \sigma_N^{(1)}) \Psi(\sigma_1^{(1)}, \dots, \sigma_N^{(1)}) \quad (15)$$

同じ様に、 $T^{(3)}, T^{(4)} \dots$  を次々と作用させて行くと、 $\Psi^{(j)}$  ( $1 \leq j \leq N$ ) を「形式的に」得る。

$$\Psi^{(3)} = T^{(3)} \Psi^{(2)}, \quad \Psi^{(4)} = T^{(4)} \Psi^{(3)}, \quad \Psi^{(5)} = T^{(5)} \Psi^{(4)}, \dots \quad (16)$$

説明は省略するけれども、 $j$  段目まで積み上げた  $\Psi^{(j)}$  も行列積の形をしていて、行列はどれも  $2^j$  次元となる。次の図は  $\Psi^{(2)}$  の場合を示したものである。白丸が  $\sigma_1^{(2)}$  から  $\sigma_N^{(2)}$  で、黒丸が「行列の足」に相当している。また、点線で囲った部分が、ひとつの行列  $D$  を表している。



<sup>4</sup>Eq. (\*\* ) の左辺は  $\Psi^{(2)}$  と添え字を明示すべきかもしれない。

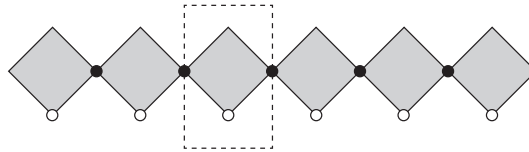
最後に得られる  $\Psi^{(M)}$  を使えば、分配関数を表すこともできる。

$$Z = \sum_{\sigma_1^{(M)}} \sum_{\sigma_2^{(M)}} \cdots \sum_{\sigma_N^{(M)}} \Psi(\sigma_1^{(M)}, \dots, \sigma_N^{(M)}) \quad (17)$$

いま考えた最上段のスピン  $\sigma_1^{(M)}, \dots, \sigma_N^{(M)}$  についての和を、最上段の転送行列  $T^{(M)}$  に対して行ってみよう。残るスピンは  $\sigma_1^{(M-1)}, \dots, \sigma_N^{(M-1)}$  である。

$$\Phi(\sigma_1^{(M-1)}, \dots, \sigma_N^{(M-1)}) = \sum_{\sigma_1^{(M)}} \sum_{\sigma_2^{(M)}} \cdots \sum_{\sigma_N^{(M)}} T(\sigma_1^{(M)}, \dots, \sigma_N^{(M)} | \sigma_1^{(M-1)}, \dots, \sigma_N^{(M-1)}) \quad (18)$$

こうして作られる  $\Phi^{(M-1)}$  もまた、Eq. (13) と同じように MPS の構造を持っている。



図に描くと、 $\Psi^{(1)}$  を上下反転したものになっていることがわかるだろう。

$\Phi^{(M-1)}$  を行ベクトルとみなして、左側から転送行列  $T^{(M-1)}$ 、 $T^{(M-2)}$  と作用させて行くと、

$$\Phi^{(M-2)} = \Phi^{(M-1)} T^{(M-1)}, \quad \Phi^{(M-3)} = \Phi^{(M-2)} T^{(M-2)}, \quad \dots \quad (19)$$

と、次々と新しい MPS を得ることができる。 $\Phi^{(j)}$  は、 $2^{M-j}$  次元の行列の積である。ここまで準備すれば、Eq. (2) の分配関数  $Z$  を、「縦に」1 段ずつ積み上げて行く計算

$$Z = \Phi^{(M-1)} T^{(M-1)} T^{(M-2)} \cdots T^{(3)} T^{(2)} \Psi^{(1)} \quad (20)$$

で表すことができる。また、適当な  $j$  番目の段に目をつけて、分配関数を内積の形

$$Z = \Phi^{(j)} \Psi^{(j)} = \sum_{\sigma_1^{(j)}} \cdots \sum_{\sigma_N^{(j)}} \Phi(\sigma_1^{(j)}, \dots, \sigma_N^{(j)}) \Psi(\sigma_1^{(j)}, \dots, \sigma_N^{(j)}) \quad (21)$$

で記述することもできる。スピンの列を、左半分の  $k$  個  $\sigma_1^{(j)}, \dots, \sigma_k^{(j)}$  と、右半分の  $\sigma_{k+1}^{(j)}, \dots, \sigma_N^{(j)}$  に分けて考えて、右半分について内積を部分的に取ったものは、密度行列とも呼ばれる。

$$\begin{aligned} \rho(\sigma_1^{(j)} \cdots \sigma_k^{(j)} | \bar{\sigma}_1^{(j)} \cdots \bar{\sigma}_k^{(j)}) \\ = \sum_{\sigma_{k+1}^{(j)}} \cdots \sum_{\sigma_N^{(j)}} \Phi(\bar{\sigma}_1^{(j)}, \dots, \bar{\sigma}_k^{(j)}, \sigma_{k+1}^{(j)}, \dots, \sigma_N^{(j)}) \Psi(\sigma_1^{(j)}, \dots, \sigma_k^{(j)}, \sigma_{k+1}^{(j)}, \dots, \sigma_N^{(j)}) \end{aligned} \quad (22)$$

定義から明らかなように、 $\rho$  の行列次元は  $2^k$  であり、またそのトレースは  $Z$  を与える。

$$\text{Tr} \rho = \sum_{\sigma_1^{(j)}} \cdots \sum_{\sigma_k^{(j)}} \rho(\sigma_1^{(j)} \cdots \sigma_k^{(j)} | \sigma_1^{(j)} \cdots \sigma_k^{(j)}) = Z \quad (23)$$

《焼き直し》 この章では、何も新しいことを書かなかった。以上は、パーテックス模型では「太古の昔」から知られていたことに過ぎない。MPS や MPO という言葉遣いに慣れ、テンソルネットワークの視点から、数式の「変幻自在な記法」— 要するに場当たりの朝令暮改ダメ記法 — を紹介したわけだ。数式を使うことには限界があるので、テンソルの結合を図で表すダイアグラムが良く使われる。



### 3 特異値分解とエンタングルメント

$\Psi^{(j)}$  が MPS で表せるとは言っても、その行列次元は  $2^j$  であり、 $j$  とともに指数関数的に増大して行く。そこで頼りになるのが、特異値分解 (Singular Value Decomposition, SVD) による行列次元の圧縮である。まず  $\Psi^{(j)}$  は、次のように 3 つの要素に分割して記述できる。

$$\Psi(\sigma_1^{(j)}, \dots, \sigma_k^{(j)}, \sigma_{k+1}^{(j)}, \dots, \sigma_N^{(j)}) = \sum_{\eta} U(\sigma_1^{(j)}, \dots, \sigma_k^{(j)} | \eta) \lambda_{\eta} V(\sigma_{k+1}^{(j)}, \dots, \sigma_N^{(j)} | \eta) \quad (24)$$

ここで、 $U$  や  $V$  は直交行列である。<sup>5</sup>

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_1^{(j)}} \dots \sum_{\sigma_k^{(j)}} U(\sigma_1^{(j)}, \dots, \sigma_k^{(j)} | \eta) U(\sigma_1^{(j)}, \dots, \sigma_k^{(j)} | \eta') &= \delta_{\eta, \eta'} \\ \sum_{\sigma_{k+1}^{(j)}} \dots \sum_{\sigma_N^{(j)}} V(\sigma_{k+1}^{(j)}, \dots, \sigma_N^{(j)} | \eta) V(\sigma_{k+1}^{(j)}, \dots, \sigma_N^{(j)} | \eta') &= \delta_{\eta, \eta'} \end{aligned} \quad (25)$$

また、 $\lambda_{\eta}$  は特異値と呼ばれるもので、( $U$  や  $V$  を調整すれば) 正の実数に選ぶことができる。添え字の  $\eta$  は 1 から始まって、「 $2^k$  と  $2^{N-k}$  の小さい方」までの値を取る。

$\lambda_{\eta}$  は、割と速やかに (?!) 減衰するので、あまりに値の小さな  $\lambda_{\eta}$  は無視して構わない。つまり、 $1 \leq \eta \leq \chi$  の、 $\chi$  自由度だけで、十分に  $\Psi^{(j)}$  を近似できると考えられる。

$$\Psi(\sigma_1^{(j)}, \dots, \sigma_k^{(j)}, \sigma_{k+1}^{(j)}, \dots, \sigma_N^{(j)}) \sim \sum_{\eta=1}^{\chi} U(\sigma_1^{(j)}, \dots, \sigma_k^{(j)} | \eta) \lambda_{\eta} V(\sigma_{k+1}^{(j)}, \dots, \sigma_N^{(j)} | \eta) \quad (26)$$

これが、MPS の「自由度」を落とす、キーポイントである。実際に、数値計算で、どのように特異値分解を利用して行くか、具体的な方法については、近い内に和文解説記事にまとめて紹介する予定である。

$\Psi^{(j)}$  が規格化されている場合、特異値  $\lambda_{\eta}$  は総和則  $\sum_{\eta} \lambda_{\eta}^2 = 1$  を満たす。これを、確率の規格化であると考えれば、確率分布に対応するエントロピーを定義できる。これが、エンタングルメント・エントロピーである。

$$S = - \sum_{\eta} \lambda_{\eta}^2 \log \lambda_{\eta}^2 \quad (27)$$

「量子・古典対応」を通じて、量子力学へと話の場を移すならば、二つに分けた部分、 $\sigma_1^{(j)}$  から  $\sigma_k^{(j)}$  までと、 $\sigma_{k+1}^{(j)}$  から  $\sigma_N^{(j)}$  までの間で、どれだけの情報が交換可能であるかを表しているのが  $S$  であり、これをエンタングルメント・エントロピー (Entanglement Entropy) と呼ぶ。

### 4 いきなり最終章

MPS と MPO について、導入するという目的は、とりあえず達成できた。ここから先は、特異値分解を使った繰り込み群計算手法に続く — 近いうちに、どこか別の場所を借りて、和文

<sup>5</sup>より一般的には、ユニタリー行列まで拡張して考える。

で解説する予定だ。(実は執筆中です。)その要点について、少しだけ「中身をお知らせ」すると…。いま導入した特異値分解 (SVD) を、Vertex Weight である  $W^{(ij)}$  に対して行い、4 つの足を持つ  $W^{(ij)}$  (Eq. (3)) を 2 つの「3脚テンソル」に分解してみると、新たに登場するテンソルの脚  $\eta$  を ブロックスピン自由度 とみなすことができる。これは、Tensor Entanglement Renormalization Group (TERG) への第一歩となる重要な視点である。ただし、このように半ば強引に (!) SVD を実行すると、分割した二つのテンソルの間に、強いエンタングルメントが残ってしまう。これでは、強く結合する自由度を先に「繰り込んでしまい」、より弱い相関を大きな空間的スケールの物理に残すという 繰り込み群 のコンセプトを、十分には実現できない。そこでまず、短距離のエンタングルメントを、繰り込み群変換に先立って解消してしまう工夫が Vidal によって考えられ、冒頭で紹介した MERA として提唱されたわけだ。[20.(2008)] 数値計算として、どのように MERA や、その発展形である Tensor Network Renormalization (TNR) を実装して行けば良いか、まだ十分には解明されていない点も多々ある。これからテンソルネットワークの研究に参入する余地は、まだまだ広く残っている。

## 5 参考文献

- [1] H.A. Kramers, Phys. Rev. **60**, 263 (1941).
- [2] R.J. Baxter, J. Math. Phys. **9**, 650 (1968).
- [3] M.P. Nightingale, and H.W.J. Blöte, Phys. Rev. B **33**, 659(R) (1986).
- [4] B. Derrida, E. Domany, and D. Mukamel, J. Stat. Phys. **69** 667 (1992); B. Derrida, and M.R. Evans, J. Phys. I France **3**, 311 (1993).
- [5] I. Affleck, T. Kennedy, E. Lieb, and H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **59**, 799 (1987).
- [6] M. Fannes, B. Nachtergale, and R.F. Werner, Europhys. Lett. **10**, 663 (1989).
- [7] K. Rommelse, and M. den Nijs, Phys. Rev. Lett. **59** 2578 (1987); M. den Nijs, and K. Rommelse, Phys. Rev. B **40**, 4709 (1989).
- [8] K.G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
- [9] L.P. Kadanoff, Physics (Long Island City, N.Y.) **2**, 263 (1966).
- [10] S.R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).
- [11] S. Östlund, and S. Rommer, Phys. Rev. Lett. **75**, 3537 (1995).
- [12] T. Nishino, and K. Okunishi, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 891 (1996).
- [13] H. Niggemann, A. Klümper, and J. Zittartz: Z.Phys. B **104**, 103 (1997).
- [14] Y. Hieida, K. Okunishi, and Y. Akutsu, New J. Phys. **1**, 7.1 (1999).
- [15] M.A. Martín-Delgado, M. Roncaglia, and G. Sierra, Phys. Rev. B **64**, 075117 (2001).
- [16] K. Okunishi, and T. Nishino, Prog. Theor. Phys. **103**, 541 (2000).
- [17] T. Nishino, Y. Hieida, K. Okunishi, N. Maeshima, Y. Akutsu, and A. Gendiar, Prog. Theor. Phys. **105**, 409 (2001).

- [18] F. Verstraete, and J.I. Cirac, arXiv:cond-mat/0407066 (2004).
- [19] ed. T.W. Burkhardt, and J.M.J. van Leeuwen, “Real-Space Renormalization”, Topics in Current Physics, **30** (Springer, 1982)
- [20] G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **101**, 110501 (2008).
- [21] G. Evenbly, and S.R. White, Phys. Rev. Lett. **116**, 140403 (2016).
- [22] M. Levin, and C.P. Nave, Phys. Rev. Lett. **99**, 120601 (2007).
- [23] Z.Y. Xie, J. Chen, M.P. Qin, J.W. Zhu, L.P. Yang, and T. Xiang, Phys. Rev. B **86**, 045139 (2012).
- [24] G. Evenbly, and G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **115**, 180405 (2015).