

テンソルネットワークによる情報圧縮と フラストレート磁性体への応用

東京大学大学院理学系研究科 大久保毅

概要

物理における多体問題では、しばしば、構成要素数に対して自由度が指数関数的に増大し、最新の計算機でさえ、その情報を蓄えることが困難になる。しかし、物理的に重要な多くの例では、自由度全てが必要な訳ではなく、重要な情報を抽出できれば、情報を圧縮して状態を効率的に記述することができる。テンソルネットワークは、このような情報圧縮を行う記述法の一つであり、近年では、古典・量子多体問題を数值的に解析する手法として、応用が広がってきている。本講義ノートでは、このようなテンソルネットワークの基本的な考え方を紹介し、量子多体系の波動関数を良く記述する、テンソル積状態の導入までを行う。ページ数の制約もありこの講義ノートでは触れられないが、集中ゼミではこのテンソル積状態を用いた基底状態の計算方法、フラストレート磁性体研究への応用例も紹介する予定である。

1 はじめに

統計力学や物性物理学で扱われる多体問題では、要素数（粒子数） N に関して $\exp(\alpha N)$ の形で、指数的に大きくなる計算を行う状況がしばしば現れる。例えば、格子上に局在して相互作用する N 個の（古典）イジングスピン

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (1)$$

($S_i = \pm 1$ で、 $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は適当な格子での最近接ペアの和) の熱力学的な性質を統計力学で考える際には、カノニカル分布の分配関数 $Z = \sum_{\{S_i = \pm 1\}} e^{-\beta \mathcal{H}}$ が計算できれば良いが、右辺に現れている和 $\sum_{\{S_i = \pm 1\}}$ には、 2^N 個の指数的に大きな項が含まれる。また、 N 個の $S = 1/2$ の量子スピンの相互作用する系の波動関数（状態ベクトル）は、一般に、

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{s_i = \uparrow, \downarrow\}} = \Psi_{s_1 s_2 \dots s_N} |s_1\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes \dots \otimes |s_N\rangle \quad (2)$$

のように、局在スピンの直積状態で展開できて、その項数は 2^N 個と指数的に大きい。このように、系の要素数に対して指数的に大きくなる“計算”は、 N が非常に小さい時には計算機などを用いて厳密に取り扱うことが可能だが、すぐに計算機の限界に達してしまい、人間の手には負えなくなる。

このような状況でも、もし、指数関数的に大きな空間から重要な情報だけを取り出して情報を効率的に圧縮することができれば、計算量・情報量を劇的に減らすことができ、大きな要素数 N の計算を行うことが可能になる。本週中ゼミで取り扱うテンソルネットワークはそのような情報圧縮を効率的に行う記述法の一つである。例えば、先ほどの古典イジング模型の分配関数は、テンソルネットワークを用いて厳密に表現でき、近年では、「テンソルネットワーク繰り込み」と呼ばれる

近似計算手法を用いて、その臨界現象が精密に解析できるようになってきている [1-4]。また、量子スピン系の波動関数をテンソルネットワークで表現する、「テンソルネットワーク状態」を用いると、種々の量子模型の基底状態が高精度に計算できる [5]。本週中ゼミでは、主としてテンソルネットワーク状態を取り扱い、そのフラストレート磁性体研究への応用を紹介したい。

2 テンソルネットワーク表現の基礎

2.1 ベクトル、行列、テンソル

一言でテンソルネットワークと言った場合、複数のテンソルの積（縮約と呼ぶ）を用いて、スカラー、ベクトルなどを表現したものを指すことが多い。ここで考えている、スカラー、ベクトル、行列、(3階の)テンソルは、それぞれ、 s 、 v_i 、 M_{ij} 、 $T_{ijk\dots}$ のように表せるもので、物理の諸分野で出てくる座標変換に対する変換性の要請などは必ずしも満たしてはいない。以降は、スカラー、ベクトルなどを高階のテンソルとは区別せず、全てテンソルと呼ぶことにする。

テンソル間の重要な演算の一つは、縮約

$$A_{ijk} = \sum_l B_{ijl} C_{lj} \quad (3)$$

である。この縮約により、複数のテンソルの“積”を使ってより大きな(多階の)テンソルを表現できる。テンソルネットワークでは、沢山のテンソルが無数の縮約演算を通して繋がっており、縮約の構造がネットワークに対応する。テンソルネットワーク表現では、テンソルの各足の大きさ(行列の行や列の数)のことを「ボンド次元 (bond dimension)」と呼ぶことが多い。この用語は、今後も出てくるので覚えておいてほしい。

おそらく、ほとんどの方が統計力学の講義で学んだように、一次元イジング模型の分配関数は、転送行列

$$M = \begin{pmatrix} \exp[\beta(J+h)] & \exp[-\beta J] \\ \exp[-\beta J] & \exp[\beta(J-h)] \end{pmatrix} \quad (4)$$

を用いて、

$$Z = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} M_{i_1 i_2} M_{i_2 i_3} \cdots M_{i_N i_1} = \text{Tr} (MM \cdots M) \quad (5)$$

と書きあらわすことができる(ここでは周期境界条件を仮定した)。これは、スカラーである分配関数を2階テンソル(行列) M の縮約(行列積)で表現した形になっていて、テンソルネットワークの一つと見ることができる。後で紹介するように、この転送行列を拡張することで二次元以上のイジング模型の分配関数もテンソルネットワークで表現することができる。

2.2 テンソルネットワークのグラフ表記

テンソルネットワーク表現には多数のテンソルと縮約演算が現れるため、数式をそのまま書いていたのでは紙面がいくらあっても足りないし、分かりにくい。そこで、図(ダイアグラム)を用いてテンソルネットワークを表記することが有用である。ここではまず、広く使われているテンソルネットワークのダイアグラム表記を導入する。図1に示すように、スカラー、ベクトルなどを丸などのオブジェクトと、それから出ている“足”で表現することにする。スカラーは0階のテンソル

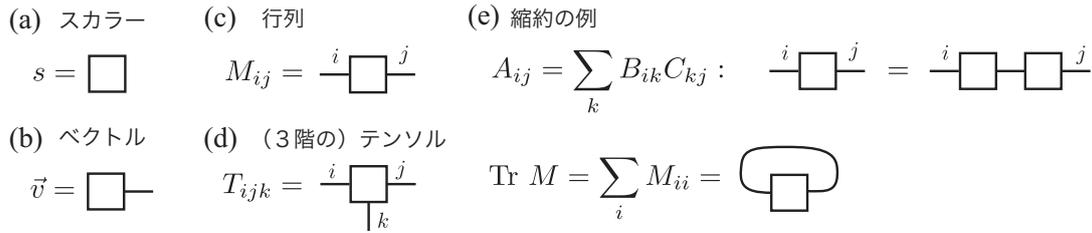


図1 テンソルネットワークダイアグラム。(a-d) スカラー、ベクトル、行列、テンソルを表すダイアグラム。(e) 縮約を表すダイアグラム。

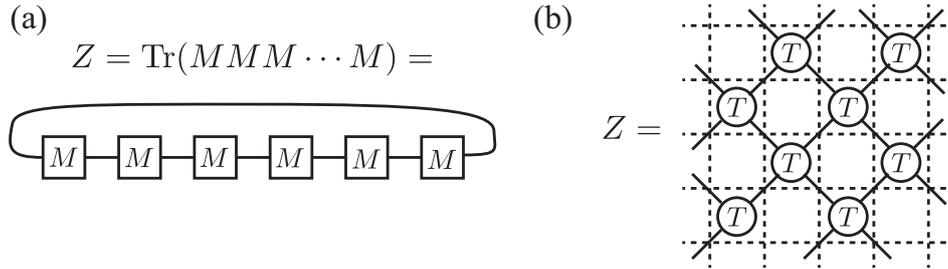


図2 分配関数のテンソルネットワーク表現。(a) 1次元イジング模型。(b) 二次元正方格子イジング模型。破線は元の正方格子を表している。

なので、足がなく、ベクトルは1本、行列は2本の足を持っている。また、場合によっては、足に添字 i などを付けることによって、テンソルの成分を表す場合もある。

テンソルの縮約は、テンソルの足をつないだダイアグラムを用いて、図1(e)のように表現される。この縮約の表記を用いると、式(5)の分配関数は、図2(a)のように書くことができ、一次元イジング模型の分配関数を表すテンソルネットワークは一次元鎖になっていることが分かる。

ダイアグラムを用いることで、表記が簡略化されるだけでなく、テンソルネットワークの構造を直感的に理解できるようになる。一次元イジング模型の分配関数のダイアグラムを見ると、二次元イジング模型の分配関数は、きっと、二次元ネットワークで描けそうだというイメージが広がるのではないだろうか。実際、二次元イジング模型の分配関数は、図2(b)のように4階のテンソル

$$T_{S_1 S_2 S_3 S_4} = \exp(\beta J(S_1 S_2 + S_2 S_3 + S_3 S_4 + S_4 S_1)) \tag{6}$$

($S_i = \pm 1$) を用いた正方格子ネットワークで記述することができる。(同じやり方で3次元イジング模型の分配関数がどのようなテンソルネットワークになるか考えてみると面白いかもしれない。)

2.3 特異値分解と低ランク近似

上で見てきた分配関数のテンソルネットワーク表現は、厳密なものであり、縮約の演算数は 2^N と変わっていない。計算の順番を工夫することで、計算量は $O(e^{L^{d-1}})$ までは減らせるが、 $d = 1$ の1次元系を除いて、依然として、指数的に大きな計算コストが必要なままである。計算コストをこれ以上減らすためには、何らかの近似が必要である。

テンソルネットワークを用いた計算で頻繁に用いられる最も基本的な近似は、特異値分解による低ランク近似である。特異値分解について線形代数の知識を復習しておこう。任意の $M \times N$ 行

列 A は、

$$A = U\Sigma V^\dagger \quad (7)$$

の形に（自明な変換を除いて一意に）特異値分解できる。ここで、 U は $M \times M$ 、 V は $N \times N$ のユニタリ行列で、 Σ は、

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{r \times r} & 0_{r \times (N-r)} \\ 0_{(M-r) \times r} & 0_{(M-r) \times (N-r)} \end{pmatrix} \quad (8)$$

と表せ、 $0_{m \times n}$ は $m \times n$ の要素がゼロの行列、 $\Sigma_{r \times r}$ は対角行列

$$\Sigma_{r \times r} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \sigma_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sigma_r \end{pmatrix} \quad (9)$$

である。また、対角成分 σ_i は正であり、慣例にしたがって、

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0 \quad (10)$$

と順番をつけておくことにする。この対角成分 σ_i は特異値と呼ばれ、特異値の数 r が行列の階数（ランク）と一致している。 $r \leq \min(M, N)$ であるため、 $\sigma_i \geq 0$ とゼロを含めることにして、行列のランクによらず、 $\min(M, N)$ 個の特異値を考える場合もある。この集中ゼミでは、後者の考え方を採用することにする。この場合、行列のランクは、「正の特異値の数」と一致する。

ユニタリ行列を $U = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_M)$ 、 $V = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N)$ と縦ベクトルを使って表すと、特異値分解は、

$$A = \sum_{i=1}^{\min(M, N)} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\dagger \quad (11)$$

と表すことができる。ここで、 \mathbf{u}^\dagger 、 \mathbf{v} は行列の左特異ベクトル、右特異ベクトルと呼ばれている。この表式から特異値は、その大きさにより、対応する特異ベクトルの“重要度”を表していると解釈できるため、「特異値が大きな方から D 個だけ残して、残りをゼロに置き換える」という近似

$$A \simeq \sum_{i=1}^D \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^\dagger \equiv \tilde{A} \quad (12)$$

を考えることができる。この近似は、行列のランクを r から D に減らす「低ランク近似」の一つになっており、重要でない情報を削り落とす「情報圧縮」が行なわれている。特異値分解を用いたこのような低ランク近似は、 A と \tilde{A} の差のノルム、 $\|A - \tilde{A}\|$ 、を最小にするという意味で、最適な近似であることが知られている（行列のノルムとしては、作用素ノルム（最大の特異値）やフロベニウスノルム（要素の二乗和の平方根）がよく用いられる）。

特異値が正であることに注目すると、特異値分解は

$$A = \sum_{i=1}^{\min(M, N)} (\sqrt{\sigma_i} \mathbf{u}_i) (\sqrt{\sigma_i} \mathbf{v}_i)^\dagger \quad (13)$$

と変形できる。したがって、 $\sqrt{\sigma_i} \mathbf{u}_i$ を列ベクトルに持つ $M \times \min(M, N)$ 行列 X と $\sqrt{\sigma_i} \mathbf{v}_i$ を列ベクトルに持つ $N \times \min(M, N)$ 行列 Y を定義すると、 $A = XY^\dagger$ と二つの行列の積に分解できることが分かる。ランク D の低ランク近似は、上位 D 個の特異値だけを残した、 $M \times D$ 行列 \tilde{X} と $N \times D$ 行列、 \tilde{Y} を用いて、 $A \simeq \tilde{X} \tilde{Y}^\dagger$ と分解することに対応する。この分解は、テンソルネットワークのダイアグラムを用いて図 3(a) のように表現することができる。

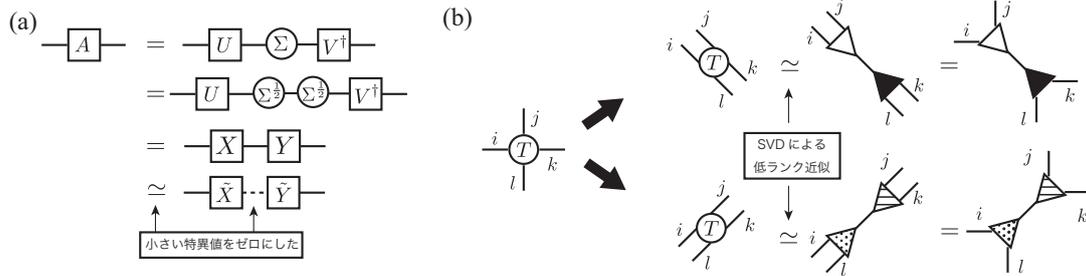


図3 特異値分解のダイアグラム。(a) 行列の特異値分解と低ランク近似。近似した足を破線で示した。(b) テンソルの特異値分解。行列に変形することでテンソルにも特異値分解を適用できるが、行列への変形は一意ではない。

2.4 低ランク近似のテンソルネットワークへの応用例

テンソルネットワークの基礎の最後として、この低ランク近似を用いて、二次元正方格子イジング模型の分配関数を近似的に計算する方法、テンソル繰り込み群 [1,2] を紹介しておこう。先ほど導入した特異値分解による低ランク近似は、2階のテンソルである行列に対して定義されているが、3階以上のテンソルについても、添字をグループにまとめることにより、行列とみなして適用することができる。例えば、2次元イジング模型のテンソルネットワークに出てきた4階のテンソル T_{ijkl} は (ij) と (kl) のようにグループにまとめ

$$T_{(ij),(kl)} = T_{ijkl} \tag{14}$$

とすることで、行列とみなせ、特異値分解を適用できる (図 3(b) も参照)。

今、各足のボンド次元が D_c であるような4階のテンソル T が正方格子のネットワークを作っているとする (図 4(a))。図 3(b) のように、二種類のグループ分けを考えて、テンソル T を特異値分解で二つに分解 a してみる。ここで、行列とみなした時の T のランクは最大 D^2 個であるが、低ランク近似を適用して、 D 個の特異値だけ残すことにする。このような分解で出てきた新しいテンソルが作るネットワークは図 4(b) のようになる。ここで、図 4(c) のように、4つのテンソルをまとめて、新しいテンソル T' を定義しよう。この新しいテンソル T' の各足のボンド次元は D であり、最初と同様に正方格子のネットワークを構成している (図 4(d))。正方格子は元のネットワークから見て45度傾いているが、元のテンソル2つ分で新しいテンソル1つを構成する“粗視化”を行ったので、テンソルの数が半分になっている。

このような特異値分解による近似と粗視化は、局所的な計算であり、 D を一定に保ったままで計算を繰り返して行くと、 D の多項式時間の計算を $O(\log_2 N)$ 回繰り返すだけで分配関数が計算できることが分かる。特異値分解と低ランク近似により、指数関数的に大きかった計算コストを劇的に下げることが出来たのである。さらに、テンソル繰り込み群は単に計算コストを下げるだけでなく、適切に拡張することにより、臨界現象の繰り込み群を表現出来るようにもなっている [4]。

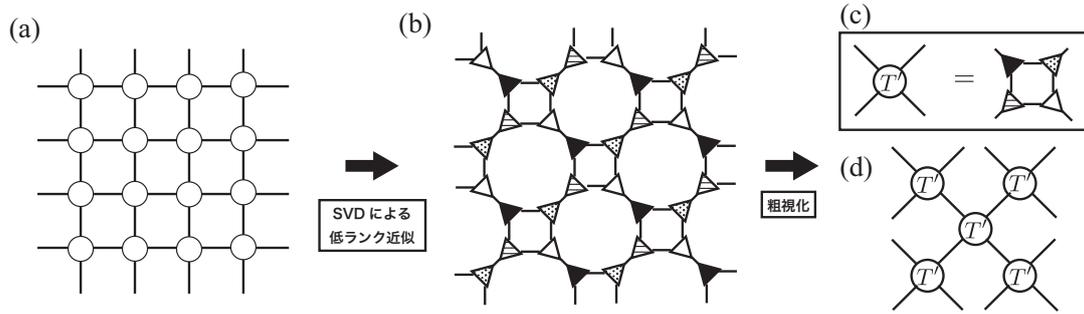


図4 2次元の正方格子テンソルネットワークに対するテンソル繰り込み群。(a) 繰り込む前のテンソルネットワーク。(b) SVD による低ランク近似を行い変形されたネットワーク (c) 4つの小さいテンソルをまとめて一つのテンソルに粗視化。(d) 新しいテンソル T' によるネットワーク。

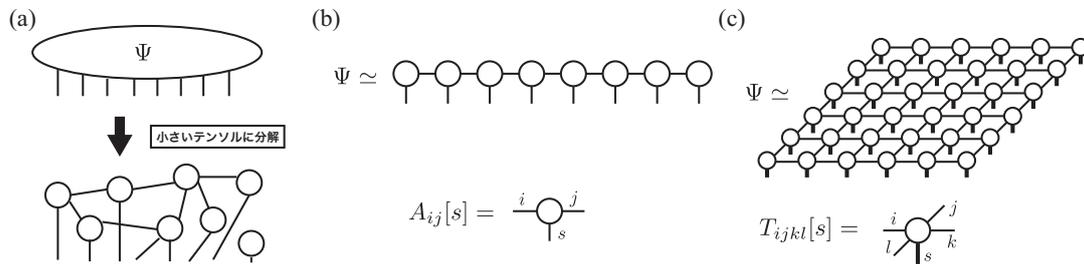


図5 テンソルネットワーク状態のダイアグラム。(a) 波動関数 Ψ を小さなテンソルの積で表現した。(b) 行列積状態 (MPS) のダイアグラム。(c) テンソル積状態 (TPS 又は PEPS) のダイアグラム。

3 テンソルネットワーク状態 (TNS)

前節までで導入した基礎知識を用いて、本節では、量子多体系の波動関数への適用を取り扱う。以降では、格子上的量子スピン多体系を例としながら説明を行うが、テンソルネットワークを用いた考え方自体は、量子スピン模型に限らず、電子などのフェルミ粒子系や量子開放系にも適用可能である。これらの系への適用に興味をお持ちの方は参考文献を参照してほしい [6–11]。

冒頭で触れたように、 N 個の $S = 1/2$ 量子スピンからなる多体系の波動関数は式 (2) のようにかける。ここで、右辺に現れた展開係数 $\Psi_{s_1 s_2 \dots s_N}$ は N 階のテンソルだと見なすことができ、 2^N と指数的に大きな成分数を持っている。テンソルネットワーク状態 (Tensor Network State (TNS)) とは、図5にダイアグラムで示したように、この巨大な N 階のテンソル Ψ を小さなテンソルの積、テンソルネットワークで (近似的に) 表現したものである。

このような TNS を用いることで、指数的に多かった成分数は、場合によっては $O(N)$ にまで減らせ、大幅な情報圧縮が可能になる。しかし、問題は、TNS はどれくらい良い近似であるかという点である。以下で見るように、TNS はどのような波動関数に対しても、良い近似になっているわけではないが、物理的に興味のある状態、例えば基底状態、だけに注目すると、(あるカテゴリの) TNS で非常によく近似でき、大幅な情報圧縮が可能であることが分かる。この性質から、TNS を変分波動関数とすれば、基底状態が高精度で計算できることになり、近年の物性研究に応用が広

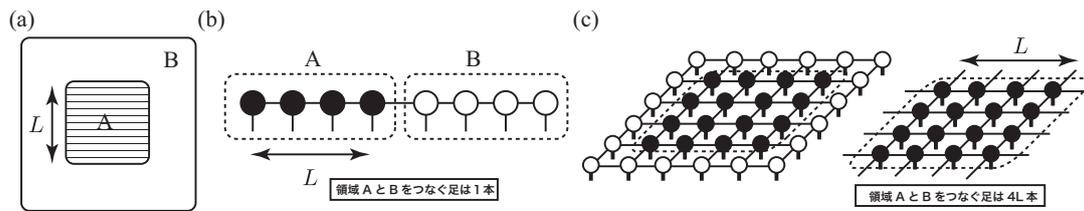


図6 (a)系を二つの領域 A、B に分割する。領域 A の大きさを L とする。(b) 行列積状態の分割。領域の大きさ L に依存せず、二つの領域をつなぐ足の本数は 1 本。(c) (2次元) テンソル積状態の分割。領域の大きさが L の時、二つの領域をつなぐ足の本数は $4L$ 本になる。

がってきている。

3.1 エンタングルメントエントロピーの面積則

波動関数を持っている性質、相関構造、を特徴付けるために、二つの領域の間の“エンタングルメント”に注目してみよう。図6のように、物理系を二つの領域 A と B に分けることを考え、領域 B の自由度について対角和（トレース）をとった縮約密度行列

$$\rho_A = \text{Tr}_B |\Psi\rangle\langle\Psi| \quad (15)$$

に注目する。この縮約密度行列から定義されるフォン・ノイマンエントロピー

$$S_A \equiv -\text{Tr}(\rho_A \log \rho_A) \quad (16)$$

をエンタングルメントエントロピーと呼ぶ。領域 B の自由度についてトレースを取らない全系の密度行列から定義されるエントロピーは、(純粋状態であるため) ゼロになるが、エンタングルメントエントロピーは、領域 A と B の量子的な相関により、一般には有限の値をとり、その大きさは二つの領域の相関の強さを表す。

エンタングルメントエントロピーは、縮約密度行列 ρ_A が

$$\rho_A = \sum_i \lambda_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \quad (17)$$

と対角化される時、

$$S_A = -\sum_i \lambda_i \log \lambda_i \quad (18)$$

と書くことができる。一方、波動関数 $|\Psi\rangle$ はシュミット分解により、領域 A、B それぞれでの特別な正規直交基底 $|\alpha_i\rangle$ 、 $|\beta_j\rangle$ を、正のシュミット係数 σ_i で重ね合わせた形、

$$|\Psi\rangle = \sum_i \sigma_i |\alpha_i\rangle \otimes |\beta_i\rangle \quad (19)$$

に分解できる。このシュミット分解を縮約密度行列の定義に代入すれば、直ちに、固有値とシュミット係数が $\lambda_i = \sigma_i^2$ の関係で結ばれていることが分かる。シュミット分解は、波動関数を表す N 階のテンソル Ψ の N 本の足を、領域 A と領域 B の二つに分けて、行列とみなした場合の特異値分解に相当しており、シュミット係数は特異値に対応する。

ここで導入したエンタングルメントエントロピーを一般の波動関数 (例えば、式 (2) で係数 Ψ がランダムな複素数で表されるもの) で計算すると、それは、領域 A の体積に比例する「体積則」、 $S_A \propto L^d$ に従うことが分かる。ここで、 L は領域の長さであり、 d は空間次元である。一方で、物理系の基底状態では、短距離相互作用の場合、エンタングルメントエントロピーは領域 A と領域 B の境界の面積に比例する「面積則」 $S_A \propto L^{d-1}$ に多くの場合、従うことが知られている [12]。すなわち、基底状態波動関数は、体積則に従う一般の波動関数と比べて、“小さい” 相関しか持たず、その事実を積極的に利用することで情報を大幅に圧縮できる可能性があるのである。

エンタングルメントエントロピーは、縮約密度行列の固有値がすべて同じ値をとる時に最大値 $\log D$ (D は領域 A のヒルベルト空間の次元) をとり、同様の計算から、縮約密度行列のランクを r とすると、エンタングルメントエントロピーは $\log r$ を超えられないことも分かる。縮約密度行列のランクは、上記の特異値分解で現れる正の特異値の数に等しいことから、面積則の存在は、体積則ではなく、面積則を満たす程度まで低ランク近似を行って良いことを意味する。以降で紹介するいくつかの TNS テンソルネットワーク状態は、まさにそのような視点で、エンタングルメントエントロピーの面積則を満たし、基底状態波動関数を効率的に表現できるように構成されている。

3.2 行列積状態 (MPS)

テンソルネットワーク状態の最も基本的な例は、波動関数を行列の積で表現した、行列積状態 (Matrix Product State (MPS)) であり、状態 s ($S = 1/2$ のスピンだと、 $s = \uparrow, \downarrow$) に依存する行列 $A[s]$ を使って

$$\Psi_{s_1 s_2 \dots s_N} \simeq A_1[s_1] A_2[s_2] \cdots A_N[s_N] \quad (20)$$

と書ける [13]。この MPS をダイアグラムで示したものが図 5(b) である。この MPS は、その形から想像されるように、一次元系の波動関数を表すことに優れており、非常に強力な手法である密度行列繰り込み群の背後にある変分波動関数になっている他 [14, 15]、Time-Evolving Block Decimation (TEBD) と呼ばれる時間発展の計算手法とも関連している [16]。

さて、MPS のエンタングルメントエントロピーがどうなっているか見てみよう。ここでは簡単のため、すべての行列 $A[s]$ のボンド次元が D であると仮定する。この場合、図 6(b) のように系を「左」と「右」の二つに分けて特異値分解 (シュミット分解) をすると、正の特異値の数は最大でも D 個しかないと容易に分かる。したがって、前節での一般論から、MPS のエンタングルメントエントロピーは、

$$S_{\text{MPS}} \leq \log D \quad (21)$$

と上限を持つことが分かる。上限 $\log D$ は領域のスピン数に依存しないため、体積則は満たしていないが、 $d = 1$ の一次元系の面積則は満たしている。このことから、MPS が一次元系で面積則を満たす波動関数に対して、良い近似になることが期待出来る。

MPS が面積則を満たすことから、 D を有限に保ったまま、システムサイズを大きくしても近似精度が保たれることが予想される。特に、波動関数に並進対称性が存在する場合には行列 $A[s]$ の場所依存性をなくして、無限につなげることで「無限系の波動関数」を良い精度で構成することができる。このような無限系の MPS は infinite の頭文字を i を付けて、iMPS と呼ばれている。

3.3 テンソル積状態 (TPS)

行列積状態は一次元系の波動関数を表現することには適しているが、エンタングルメントエントロピーが領域のサイズに依存しないため、2次元以上の系の面積則は満たしていない。そのため、高次元系の波動関数を MPS で表現しようとする、面積則を満たすように、 $\log D \sim L^{d-1}$ とする必要があり、システムサイズに対して指数的に大きくなるボンド次元が必要になってしまう。

MPS を高次元の面積則を満たすように自然に拡張したものが、テンソル積状態 (Tensor Product State (TPS)) である。MPS では一次元的なつながりだったテンソルネットワークが、図 5(c) に示した 2次元の TPS では、二次元的なテンソルネットワークになっている。この TPS は高次元のバレンスボンド固体を表現するものとして古くから知られていたが [17]、量子情報の分野で Projected Entangled Pair State (PEPS) として注目され [18]、近年では PEPS という名前で呼ぶ人も多い。

さて、MPS の場合と同様に、テンソルのボンド次元がすべて D であると仮定して、TPS (PEPS) のエンタングルメントエントロピーを見てみよう。MPS の例から分かるように、テンソルネットワーク状態を二つの領域に分けてシュミット分解をする場合、そこに現れる正の特異値の最大数は、二つの領域をつなぐ合計のボンド次元になる。今、図 6(c) のように領域を分割することになると、二つの領域をつなぐ足が $4L$ 本あることから、合計のボンド次元は D^{4L} であり、以前の議論から、(2次元) TPS のエンタングルメントエントロピーは

$$S_{\text{TPS}} \leq 4L \log D \quad (22)$$

と抑えられることが分かる。右辺の上限は、MPS の場合とは異なって L に比例しており、この TPS は 2次元の面積則を満たしていることが確認できる。つまり、TPS は 2次元の波動関数に対して、1次元系の MPS と同様に、非常に良い近似になることが期待出来る。特に、系に並進対称性がある場合には、iTPS として無限系の波動関数を良い精度で構成できることを使って、近年では 2次元フラストレート磁性体の研究等に、iTPS が広く用いられるようになってきている。

4 おわりに

この講義ノートでは、テンソルネットワークの考え方の概略を示し、テンソルネットワーク状態が量子多体系の基底状態波動関数を効率良く圧縮して表現できることを紹介した。テンソルネットワーク状態の応用は、厳密に表現できる波動関数の解析の他、テンソルネットワーク状態を変分波動関数とすることで、興味のある物理系の基底状態を数値的に計算することにも使える。紙面が足りずに、この講義ノートには書ききれなかったが、テンソルネットワーク状態を構成する各テンソルを効率良く最適化する方法がいくつか提案されており [5]、それらを使うことで、基底状態の良い近似を数値的に得ることができる。また、二次元以上では、得られたテンソルネットワーク状態の縮約にも厳密計算には指数関数のコストがかかってしまうが、基礎の部分で紹介したテンソル繰り込み群等の近似手法により、多項式時間で精度の良い計算が可能になっている [5]。

テンソルネットワーク状態を用いた基底状態計算の重要な応用先はフラストレート磁性体である。フラストレート磁性体では相互作用のフラストレーションにより、非共線的 (ノンコリニア) 秩序、多重極秩序、スピン液体、など種々の興味深い基底状態が現れることが期待される。しかし、

フラストレーションが存在しない場合には非常に強力な数値計算手法であった量子モンテカルロ法が、フラストレート磁性体では、確率が正の実数でなくなる「負符号問題」により効率的に働かなくなるため、大きな系に数値的にアプローチすることが困難である。一方で、テンソルネットワーク状態を用いた計算では、フラストレートした相互作用があつたとしても、負符号問題のような困難が生じず、また、エンタングルメントエントロピーの面積則を満たしている場合、非常に大きな系、時には無限系までも、が効率的に計算できる。近年の計算機の成長とも合わさって、テンソルネットワーク状態によるフラストレート磁性体研究は、大きく発展してきている。[19–25]。

集中ゼミでは、ここで書ききれなかったテンソルネットワーク状態を用いた基底状態計算の手法や、そのフラストレート磁性体への応用例についても紹介し、テンソルネットワーク表現の今後の展望について話せればと考えている。

参考文献

- [1] M. Levin and C. P. Nave, Phys. Rev. Lett. **99**, 120601 (2007).
- [2] Z.-C. Gu, M. Levin and X.-G. Wen, Phys. Rev. B **78**, 205116 (2008).
- [3] Z. Y. Xie *et al.*, Phys. Rev. B **86**, 045139 (2012).
- [4] G. Evenbly and G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **115**, 180405 (2015).
- [5] (レビュー) R. Orús, Ann. Phys. **349**, 117 (2014).
- [6] F. Verstraete, J. J. García-Ripoll, and J. I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **93**, 207204 (2004).
- [7] M. Zwolak, G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **93**, 207205 (2004).
- [8] A. Kshetrimayum, H. Weimer, and R. Orús, Nat. Comm. **8**, 1291(2017).
- [9] P. Corboz, R. Orús, B. Bauer, and G. Vidal, Phys. Rev. B **81**, 165104 (2010).
- [10] P. Corboz, T. M. Rice, and M. Troyer, Phys. Rev. Lett. **113**, 046402 (2014).
- [11] P. Corboz, Phys. Rev. B **93** (2016) 045116.
- [12] (レビュー) J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio, Rev. Mod. Phys. **277**, 82 (2010).
- [13] (レビュー) U. Schollwöck, Ann. Phys. **326**, 96 (2011).
- [14] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).
- [15] F. Verstraete, D. Porras, and J. I. Cirac, Phys. Rev. Lett. **93**, 227205 (2004).
- [16] G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **91**, 147902 (2003). Phys. Rev. Lett. **59**, 799 (1987).
- [17] I. Affleck, T. Kennedy, E. Lieb, and H. Tasaki, Commun. Math Phys. **115**, 477 (1988).
- [18] F. Verstraete and J. I. Cirac, arXiv:cond-mat/0407066.
- [19] P. Corboz and F. Mila, Phys. Rev. B **87** (2013) 115144.
- [20] P. Corboz and F. Mila, Phys. Rev. Lett. **112** (2014) 147203.
- [21] Z. Y. Xie *et al.*, Phys. Rev. X **4** (2014) 011025.
- [22] H. J. Liao, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **118**, 137202 (2017).
- [23] T. Picot, M. Ziegler, R. Orús, and D. Poilblanc, Phys. Rev. B **93** 060407(R) (2016).
- [24] J. O. Iregui, P. Corboz, and M. Troyer, Phys. Rev. B **90** (2014) 239903.
- [25] T. Okubo, *et al.*, Phys. Rev. B **96**, 054434 (2017).