

テンソルネットワーク形式の進展と応用



西野 友年

神戸大学大学院理学研究科
nishino@kobe-u.ac.jp



大久保 毅

東京大学大学院理学系研究科
t-okubo@phys.s.u-tokyo.ac.jp

原子・分子スケールの微視的な物理は、我々が目にする巨視的な測定量に、どう現れるのだろうか。微視的なものとして、例えば磁性体を構成するスピン自由度を考えてみよう。結晶格子中で、幾つかのスピン自由度を含む“ブロック”に着目すると、これを新たに「1つの有効的な自由度」とみなすことが可能だ。このような「自由度の抽出」はカダノフによって半世紀前に提唱されたもので、**ブロックスピン変換**と呼ばれている。この変換を繰り返せば1つのブロックに対応する領域が指数的に大きくなり、やがて巨視的な大きさへと到達する。このように物理系を粗く眺める**粗視化**や、**逐次的なスケール変換**のアイデアはウィルソンによって整理され、**繰り込み群**の概念が生まれた。

巨視系には普遍的に現れる相転移と臨界現象を、繰り込み群は定量的に説明する。ただ、ブロックスピン変換を用いる**実空間繰り込み群**によって、相転移を特徴付ける臨界指数を正確に求めることは困難であった。粗視化に伴う相互作用の変化である「有効ハミルトニアンの流れ (flow)」を、精密には追えなかったのだ。実は、ブロックから抽出する自由度の選び方に問題が潜んでいたのである。

本稿で紹介する**テンソルネットワーク形式**では、隣接するブロック間の結合に着目し、相互の連絡に「物理の本質」を見出す。ブロックの境界 (辺や面) に並んでいるスピン自由度をまとめ、1つの多状態自由度として取り扱うのだ。例えば立方体のブ

ロックを考えるなら、それぞれの面に i, j, k, ℓ, m, n の、合計6つの多状態自由度を割り当てる。他方、境界に面していないブロック内のスピンは、配位和を取り消去してしまう。このような手続きを経て粗視化を行うと、系が持つ相互作用や相関を全て、局所的な重率テンソル A_{ijklmn} へと押し込んでしまえるわけだ。この自由度抽出を、系の持つ**エンタングルメント**を保ちつつ、行列の**特異値分解 (SVD)** によって効率的に行うことが、テンソルネットワーク形式の特徴である。本稿では、磁性体のモデルであるイジング模型を例に取り、同形式の概要を紹介し、最近のマルチスケールな発展についても触れる。

テンソルネットワーク形式は**行列積状態 (MPS)** に、その原型を見ることができる。イジング模型の相転移を導出するクラーマース・ワニエ近似に端を発し、菊池の近似を経て、半世紀前にバクスターが確立した角転送行列 (CTM) の手法は、実質的には3脚テンソル A_{ijl}^k の縮約で転送行列の固有ベクトルを近似する**変分法**だ。1次元スピン鎖の**AKLT状態**、デリダによる非平衡定常状態の記述、**密度行列繰り込み群 (DMRG)** による数値計算など、MPSは何度も「再発見的に」用いられて来た。近年では、高次元系への拡張である**テンソル積状態 (TPS/PEPS)** が、2次元量子系の基底状態解析に応用されつつある。テンソルネットワーク形式は、数値解析に適した物理系の表現手段なのだ。

—Keywords—

繰り込み群：

小さなスケールでの物理的自由度が、より大きなスケールの物理現象に与える影響を、逐次的なスケール変換と、それに伴う主要な自由度の抽出を通じて記述する理論形式。

特異値分解：

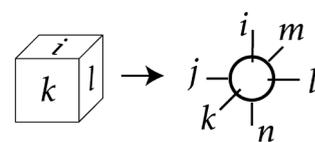
要素が負でない対角行列の両側から (一般化された) ユニタリー行列をかけた形で、任意の行列を表現する線形計算の手法。データの圧縮などに、よく使われる。

エンタングルメント：

おおまかには、量子力学系が内在する相関を指す用語。本稿では「ユニタリーではない局所的な量子操作が、操作を受けない部分 (環境) へと瞬間的に及ぼし得る影響を測る指標」と、限定的に考える。比較的新しい物理概念であり、対象となる物理系や問題の設定によって、意味する所が微妙に異なることもある。

AKLT 模型, AKLT (または VBS) 状態：

スピン1の、量子ハイゼンベルグスピン鎖の模型。提案者4名の頭文字 A, K, L, T を並べて呼ばれる。基底状態が行列積状態の形で厳密に表せ、これを AKLT 状態あるいは VBS 状態と呼ぶ。



局所的な重率を表す6脚テンソル。