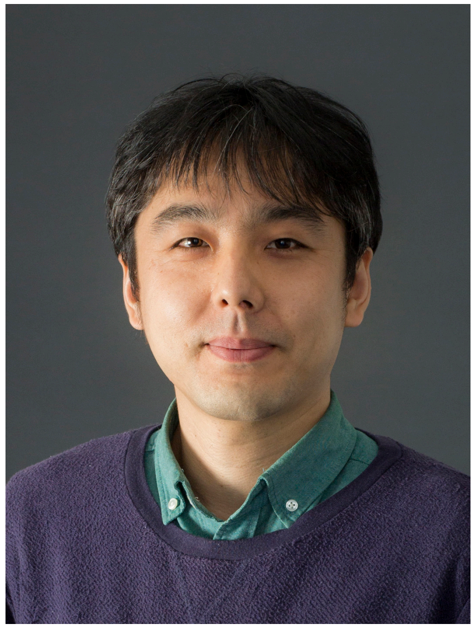
テンソルネットワーク法入門

東大理　大久保毅

Introduction: 大久保　毅（おおくぼ　つよし）



経歴

- **1999-2008**
  - 九州大学理学部物理学科、大学院理学府凝縮系科学専攻
- **2002-2008**
  - 物性理論研究室所属（指導教員：小田垣孝先生）
  - 研究テーマ：ランダムパッキング、境界摂動問題、社会物理学
- **2008-2012**
  - 大阪大学大学院理学系研究科　特任研究員（Supervisor: 川村光先生）
  - 研究テーマ：フラストレート磁性体（古典スピン模型の秩序化・ダイナミクス）
- **2012-2017**
  - 東京大学物性研究所　特任研究員（Supervisor: 川島直輝先生）
  - 研究テーマ：脱閉じ込め量子相転移、テンソルネットワーク法の量子スピン模型への適用等
- **2017-2021.10**
  - 東京大学大学院理学系研究科　特任講師（東京大学計算科学アライアンス）
  - 研究テーマ：テンソルネットワークを中心とした種々のトピック、フラストレート磁性体
- **2019-**
  - JST さきがけ「量子情報処理」領域　さきがけ研究者（兼任）
  - 研究テーマ：テンソルネットワークを活用し、量子コンピュータで量子多体問題を解きたい
- **2021.7-**
  - 東京大学大学院理学系研究科　量子ソフトウェア寄付講座 特任准教授

研究の興味：多体系の協力現象一般、統計物理学など。

キーワード：相転移、新奇秩序、非平衡ダイナミクス、テンソルネットワーク、…

コンテンツ

- はじめに：テンソルとテンソルネットワーク
- 格子模型で使えるテンソルネットワーク法
    - テンソル繰り込み群
    - 行列積状態を用いた縮約
    - （角転送繰り込み群）
- まとめ

テンソル？

- ベクトル　$\vec{v} : v_i$ → 1次元的な数字の並び
- 行列　$M : M_{i,j}$ → 2次元的な数字の並び

↓ 一般化

- (n階の）**テンソル**　$T : T_{i,j,k}$ → n次元的な数字の並び

【基本的な演算＝**縮約**】

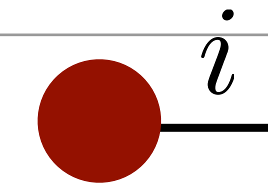
行列積：　$C_{i,j} = (AB)_{i,j} = \sum_k A_{i,k} B_{k,j}$

縮約：　$D_{i,j,k} = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} A_{i,j,\alpha,\beta} B_{\beta,\gamma} C_{\gamma,k,\alpha}$

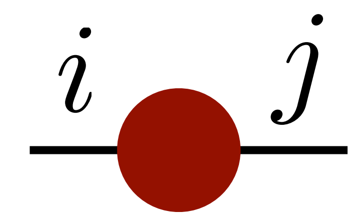
"足"が多くなると
表記が複雑...

ダイアグラムを用いたテンソル表記

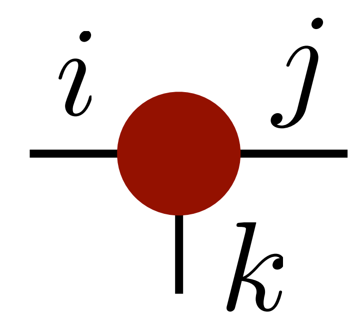
- ベクトル　$\vec{v} : v_i$



- 行列　$M : M_{i,j}$



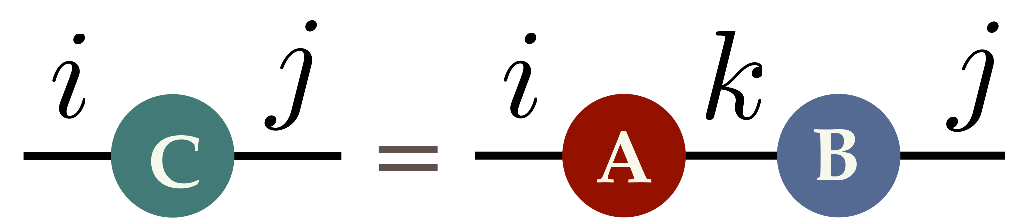
- テンソル　$T : T_{i,j,k}$



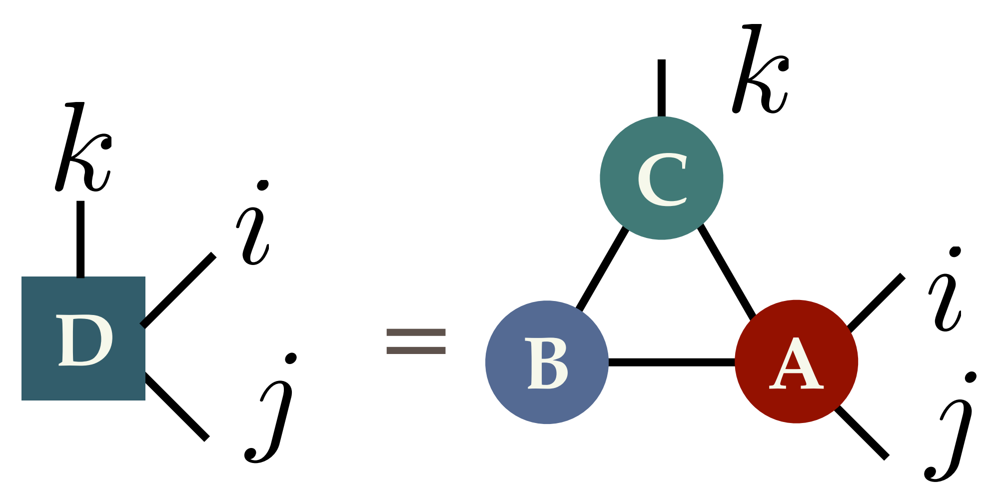
＊n階のテンソル＝n本の足

テンソルの積（縮約）の表現

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



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

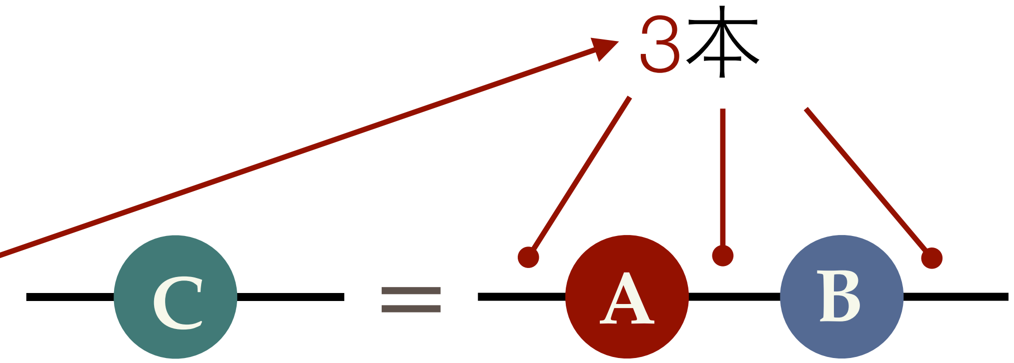


縮約の計算量

行列積： $A, B = \ \chi \times \chi$

$$C = AB$$

の計算量= $O(\chi^3)$

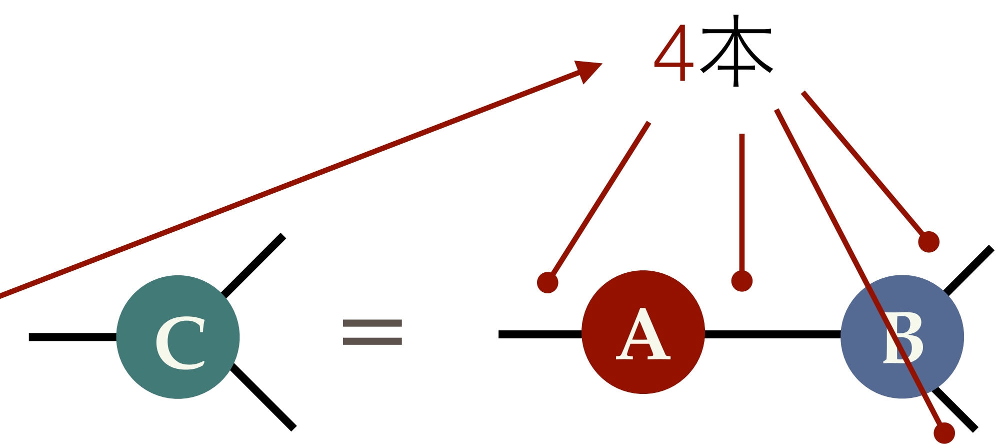


テンソル縮約： $A = \ \chi \times \chi$

$B = \chi \times \chi \times \chi$

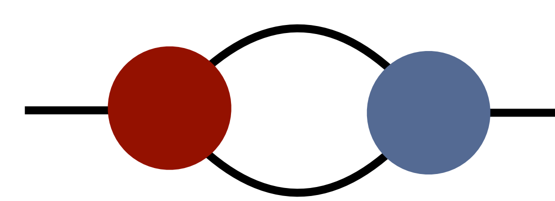
$$C = \sum_{\alpha} A_{:,\alpha} B_{\alpha,:,:}$$

の計算量= $O(\chi^4)$



ダイアグラムとの対応

- 縮約の計算量はダイアグラムの足の数で分かる
- （メモリ使用量も分かる）



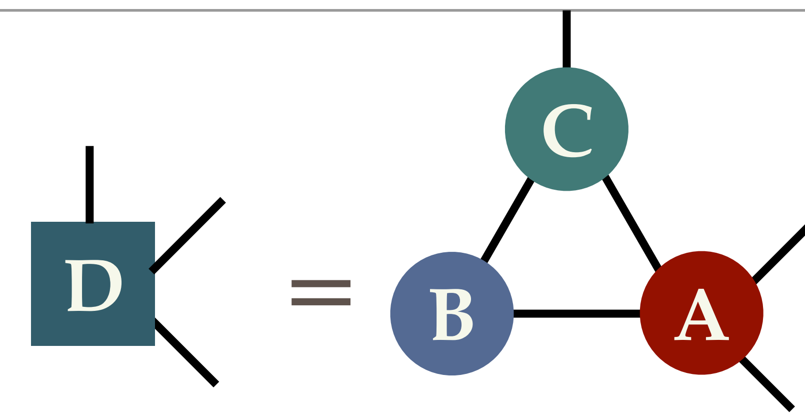
4本 $\longrightarrow$ $O(\chi^4)$

縮約の計算量と計算順

テンソル縮約：

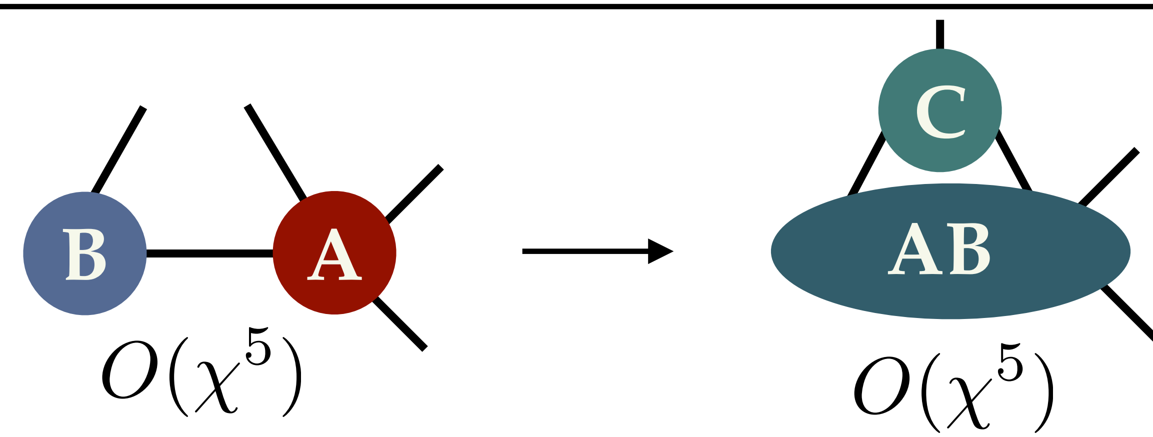
$$A = \chi \times \chi \times \chi \times \chi$$
$$B = \chi \times \chi$$
$$C = \chi \times \chi \times \chi$$

$$D = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} A_{:,:,\alpha,\beta} B_{\beta,\gamma} C_{\gamma,:,\alpha}$$



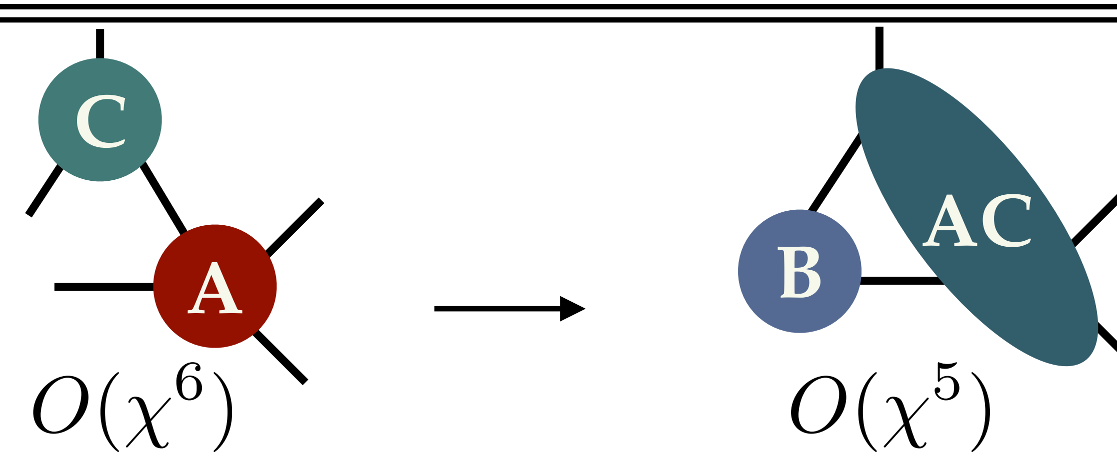
Case 1: $D = (AB)C$

の計算量= $O(\chi^5) + O(\chi^5)$



Case 2: $D = (AC)B$

の計算量= $O(\chi^6) + O(\chi^5)$



縮約の評価順で計算量が変わる！

＊最適順序の決定はNP困難。実用的なアルゴリズム例

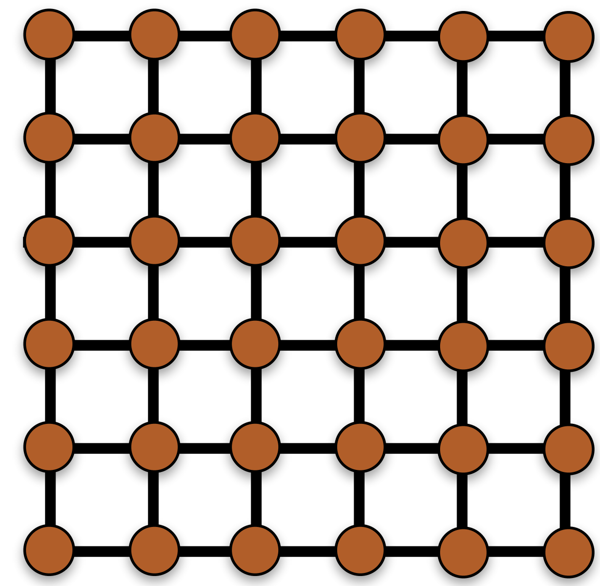
R.N.C. Pfeifer, *et al.*, Phys. Rev. E **90**, 033315 (2014).

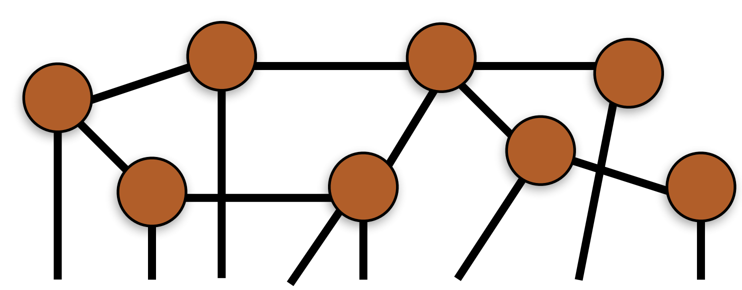
テンソルネットワーク

テンソルネットワーク（TN）：テンソルの縮約で構成されたネットワーク

【（ざっくりした）分類】

- Openな足：**あり** or **なし**
  - Openな足があり：TN自身が大きなテンソル
  - Openな足がなし：TNは数字
- ネットワーク構造：**規則的** or **不規則**
  - ネットワーク構造は問題に応じて変わる
    - 例：スピン模型の分配関数は規則的
    - 例：分子の多体電子状態は不規則
- ネットワークサイズ：**有限** or **無限**
  - 基本的に有限だが、場合によっては無限系も取り扱える

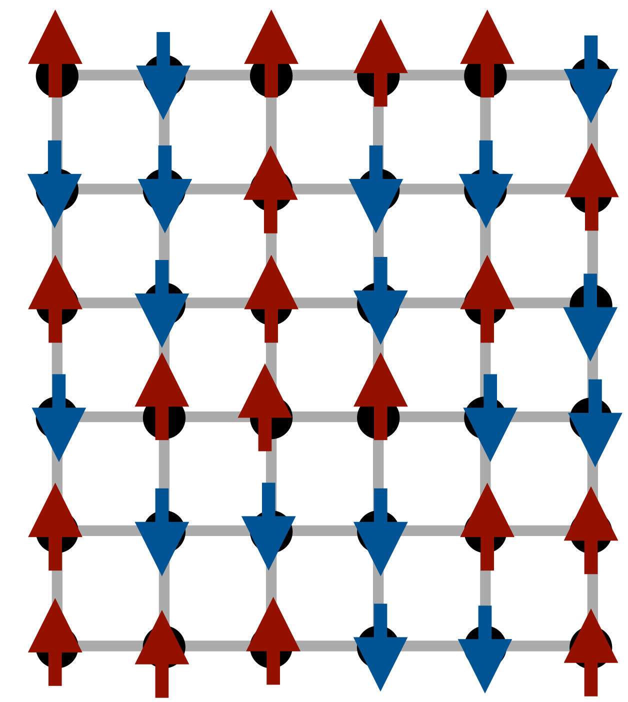




（今回はこの例を扱います）

テンソルネットワークの例1：統計物理学

古典イジング模型（磁性体のモデル）



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

温度Tでの確率分布：ボルツマン分布

$$P(\Gamma) = \frac{1}{Z} e^{-\beta \mathcal{H}(\Gamma)}$$

状態 :$\Gamma = \{S_1, S_2, \ldots, S_N\}$

逆温度 :$\beta = 1/k_\mathrm{B} T$

分配関数： $Z = \sum_{\Gamma} e^{-\beta \mathcal{H}(\Gamma)}$ (2^Nの和)

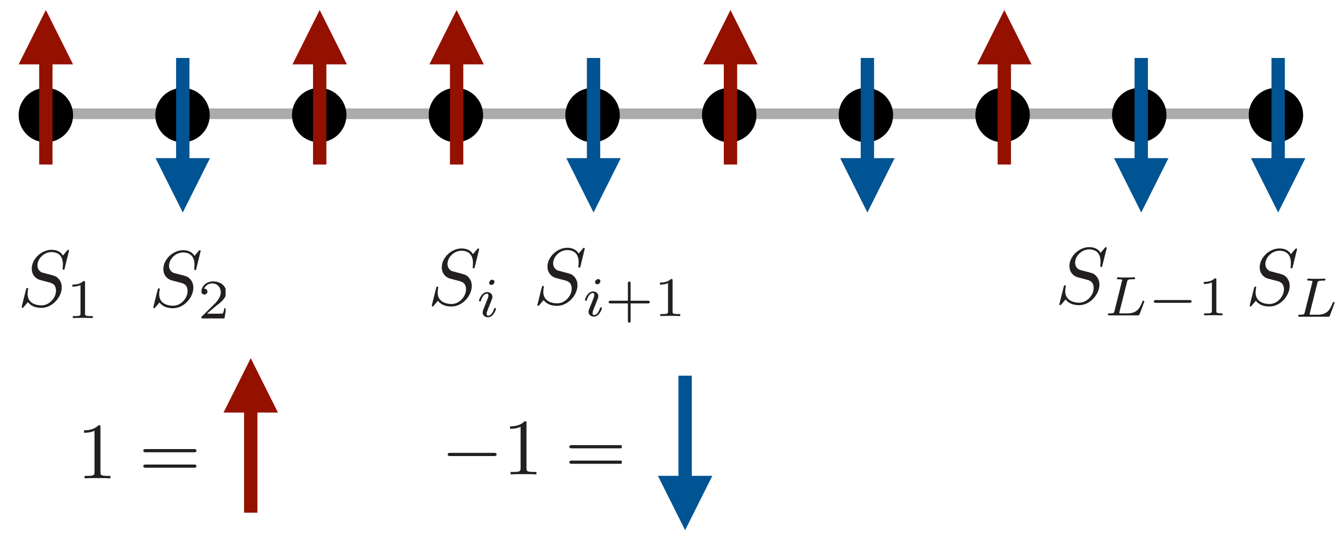
熱力学自由エネルギー

$$F = -k_B T \ln Z$$

1次元イジング模型の転送行列

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{L-1} S_i S_{i+1}$$

$$S_i = 1, -1$$



分配関数

$$Z = \sum_{\{S_i = \pm 1\}} e^{\beta J \sum_i S_i S_{i+1}}$$

$$= \sum_{\{S_i = \pm 1\}} \prod_{i=1}^{L-1} e^{\beta J S_i S_{i+1}}$$

$$= \sum_{S_1 = \pm 1, S_L = \pm 1} \left(T^{L-1}\right)_{S_1, S_L}$$

転送行列

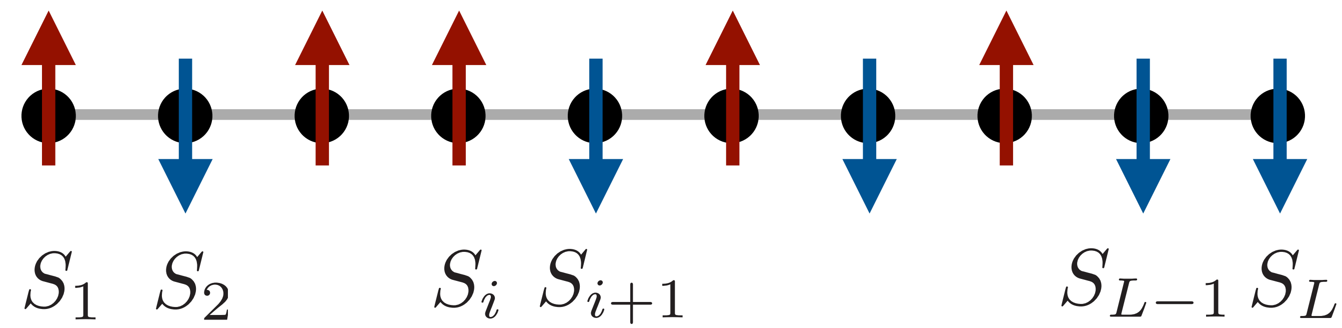
$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} +1 & -1 \end{array} \\ T = & \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix} \begin{array}{c} +1 \\ -1 \end{array} \end{array}$$

$$T_{S_i, S_{i+1}} = e^{\beta J S_i S_{i+1}}$$

分配関数は転送行列の積でかける

分配関数のダイアグラム

例：１次元イジング模型

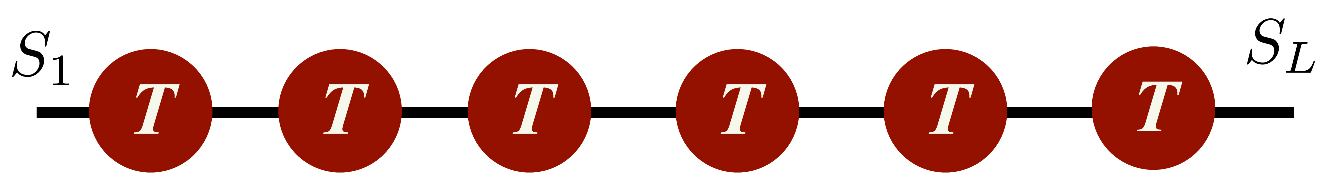


転送行列

$$T_{S_i,S_{i+1}} = e^{\beta J S_i S_{i+1}}$$

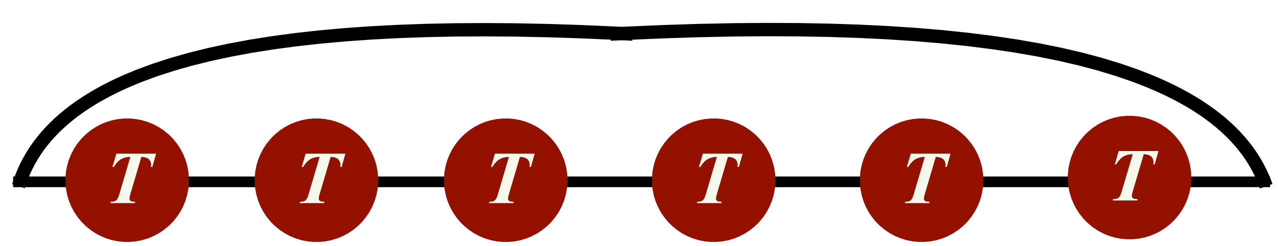
$$Z = \sum_{S_1=\pm 1, S_L=\pm 1} \left(T^{L-1}\right)_{S_1,S_L}$$

$$= \sum_{S_1=\pm 1, S_L=\pm 1}$$



*周期境界条件の場合

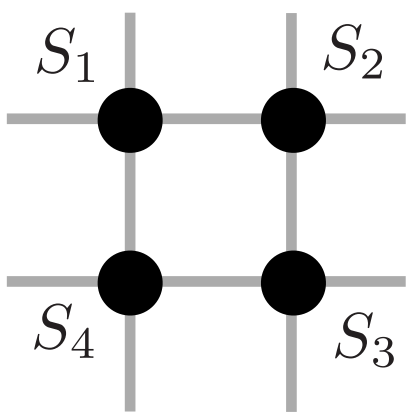
$$Z = \mathrm{Tr}\, T^L =$$



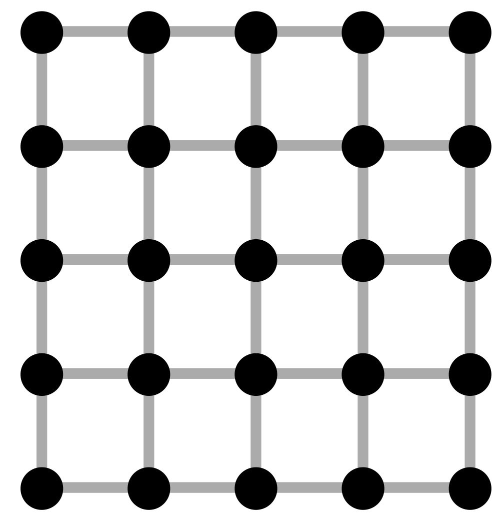
転送行列表現の拡張

２次元正方格子模型の分配関数

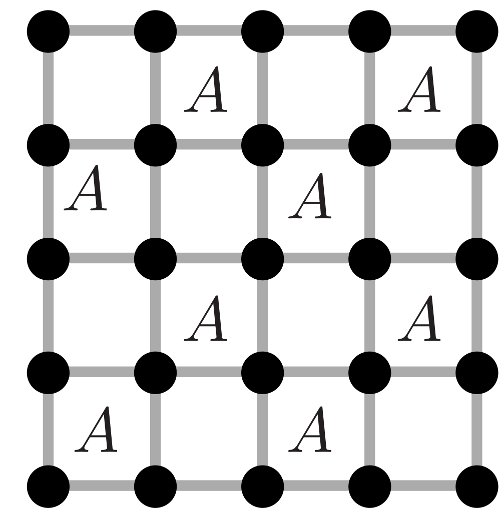
一つの正方形に注目



正方格子



Aの配置



各辺のボルツマン重みの積：４階の“テンソル”

$$A_{S_1,S_2,S_3,S_4} = e^{\beta J(S_1S_2+S_2S_3+S_3S_4+S_4S_1)}$$

イジング模型

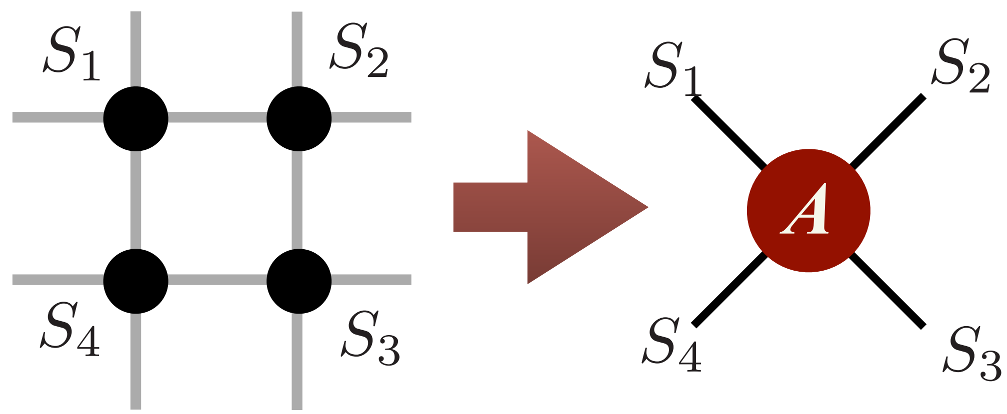
Aは2×2×2×2のテンソル

分配関数＝テンソルの"掛け算"

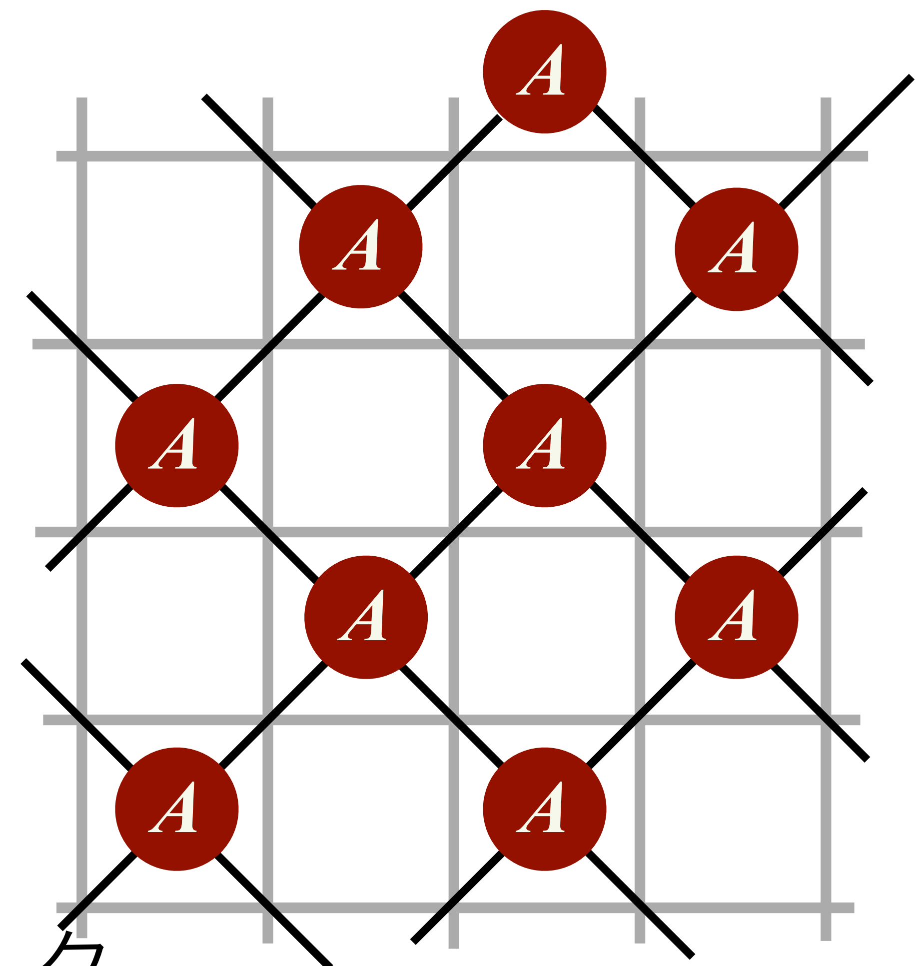
$$Z = \sum_{\{S_i=\pm 1\}} A_{S_1,S_2,S_3,S_4} A_{S_2,S_5,S_6,S_7} \cdots A_{S_i,S_j,S_k,S_l} \cdots$$

分配関数のテンソルネットワーク表現

$$A_{S_1,S_2,S_3,S_4} = e^{\beta J(S_1S_2+S_2S_3+S_3S_4+S_4S_1)}$$



$Z =$



分配関数＝テンソルAの積のネットワーク

$\boxed{\text{テンソルネットワーク}}$

正方格子イジング模型→45度傾いた正方格子ネットワーク

＊元の格子点と同じ場所にテンソルが配置される正方格子ネットワークで分配関数を表現することもできる。

テンソルネットワークの例2：量子回路

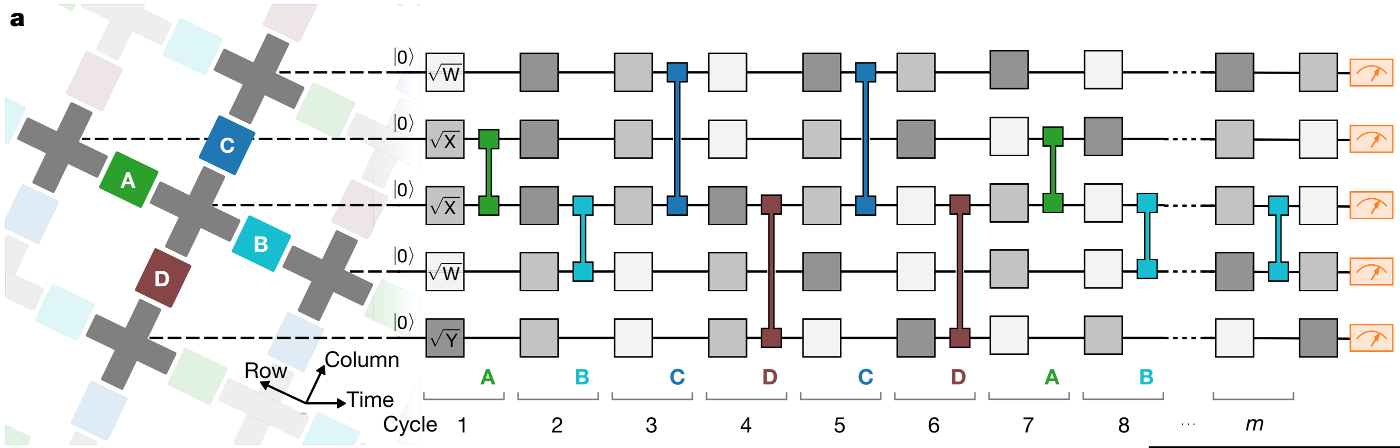
量子回路：

量子ビットに演算する**ゲート操作**の回路図

2次元のベクトル。
適当な基底、（$|0\rangle, |1\rangle$）で
表現すると2次元の複素ベクトル

適当な基底の元では、ユニタリ
行列（or "テンソル"）

googleの"量子超越" 回路　F. Arute, *et al.*, Nature 574, 505 (2019)



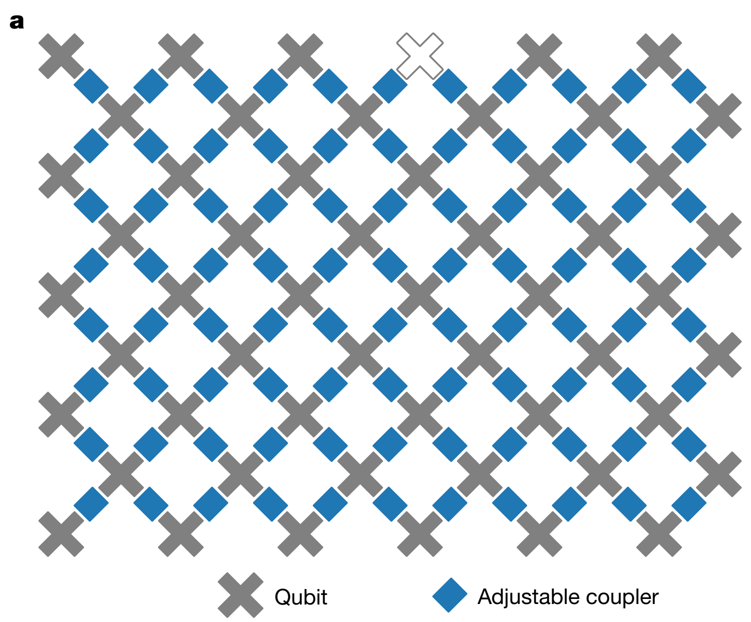
量子回路=テンソルネットワーク

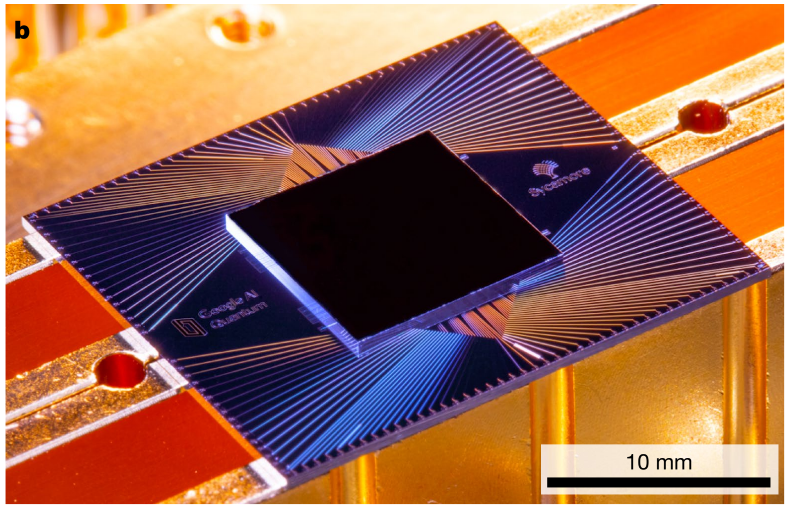
量子コンピュータの古典シミュレーション
＝テンソルネットワークの縮約

・Openな足は"あり"
・"なし"もある
・不規則
・有限

googleの"量子超越" 回路

F. Arute, *et al.*, Nature 574, 505 (2019)





（この例も少し関連します）

テンソルネットワークの例3：量子多体状態

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：　$i = \uparrow, \downarrow = |0\rangle, |1\rangle$

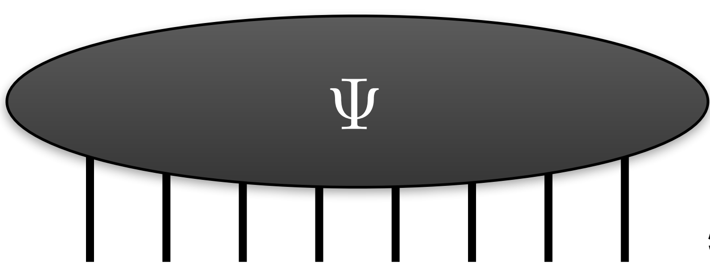
$|010100\cdots 0\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle \otimes \cdots$

量子化学：

i = 原子軌道・分子軌道の占有数

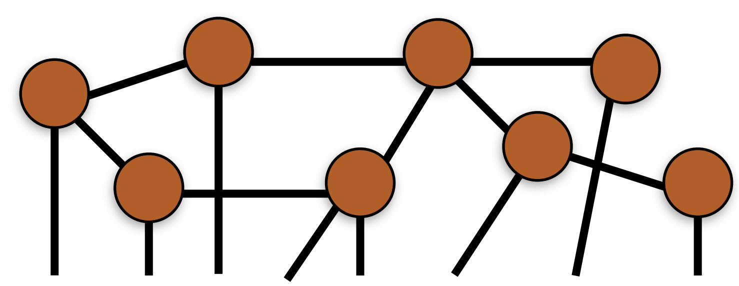
係数はテンソル

量子多体状態



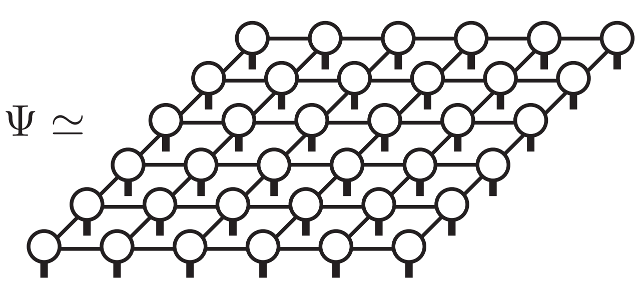
量子相関の
特徴を利用した近似

テンソルネットワーク分解



PEPS (for 2d system)

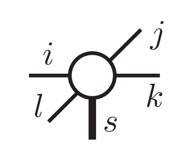
$\Psi \simeq$



$\sim e^N$の独立要素

$\sim O(N)$の独立要素

$T_{ijkl}[s] =$



量子多体系の低エネルギー状態：

- 一般の状態（ランダムベクトル）に比べて、少ない量子相関
  - c.f. エンタングルメントエントロピーの面積則

テンソルネットワークによる高精度の近似

- Openな足は"あり"
- 規則・不規則
- 有限・無限

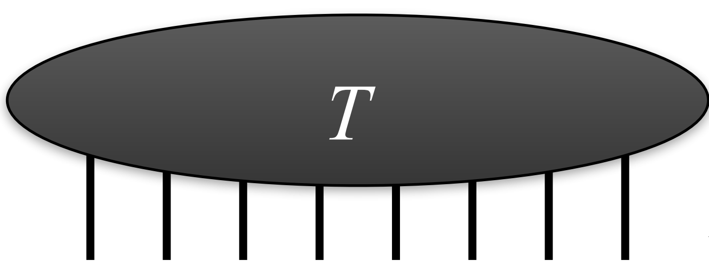
テンソルネットワークの例4：テンソル型データ

任意のテンソル型データ

- Openな足は"あり"
- 規則・不規則
- 有限

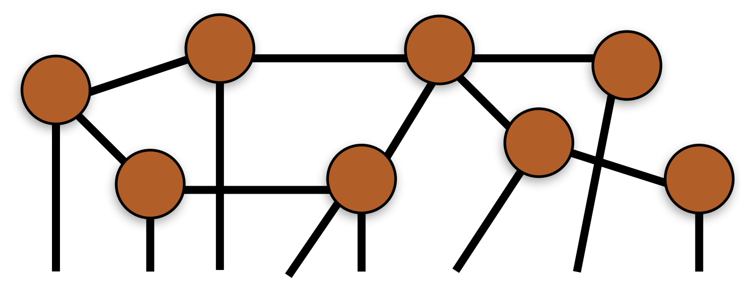
$T_{i_1,i_2,\ldots,i_N}$ ：量子多体状態と同様にして分解可能

テンソル型データ



情報の相関構造の
特徴を利用した近似

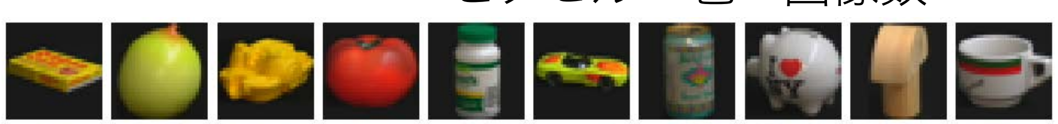
テンソルネットワーク分解



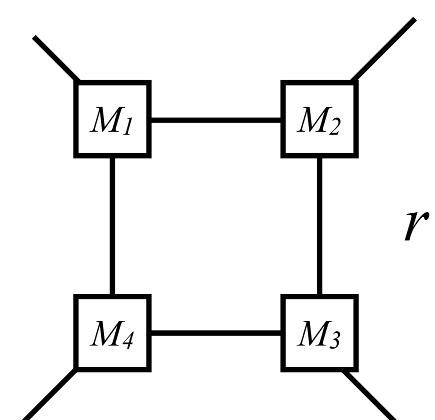
例1：画像データセット
(Q. Zhao, et al arXiv:1606.05535)

COIL-100 dataset = 32 x 32 x 3 x 7200 テンソル

ピクセル　色　画像数



テンソルリング分解

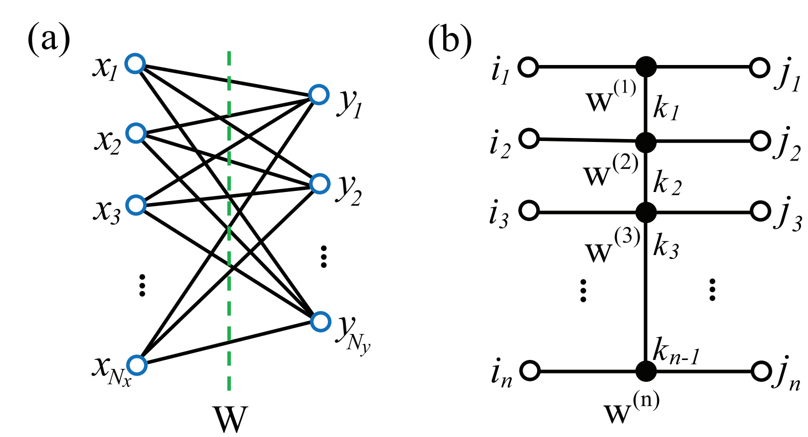


例２：ニューラルネットワークの重み行列
(Z.-F. Gao et al, Phys. Rev. Research **2**, 023300 (2020).)

x_i: input neuron (pixel)

y_i: output neuron

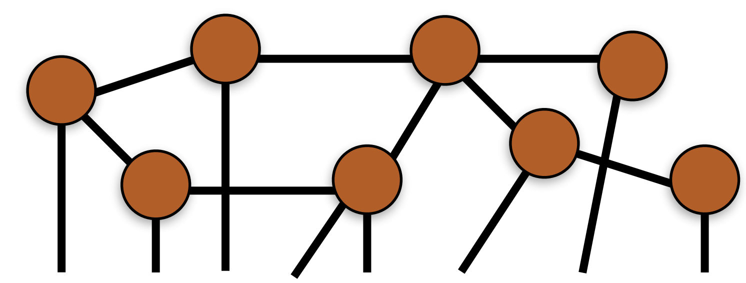
W_{ij}: weight matrix connecting x and y



テンソルネットワーク計算の基礎

テンソルネットワークの数値計算

テンソルネットワークを用いた応用の基本計算要素



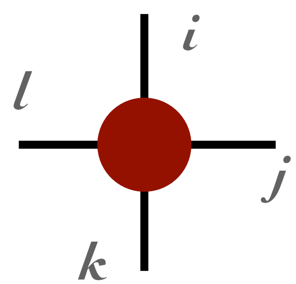
- **テンソルの縮約**
  - 基本的に、2つずつ縮約計算をする
  - テンソルを行列に変形し、BLASなどを用いる
- **テンソルの低ランク近似**
  - 特異値分解による低ランク近似の拡張
  - 近似的な縮約を行う目的などに用いられる
  - 多くの場合、テンソルを行列に変形し、行列の特異値分解を用いる
- **テンソルの線形問題**
  - テンソルから構成される行列の（一般化）固有値問題
  - 量子多体問題、テンソル分解などの"最適化"で使用

テンソルの基本演算は、（現状は）行列に変形して行われる

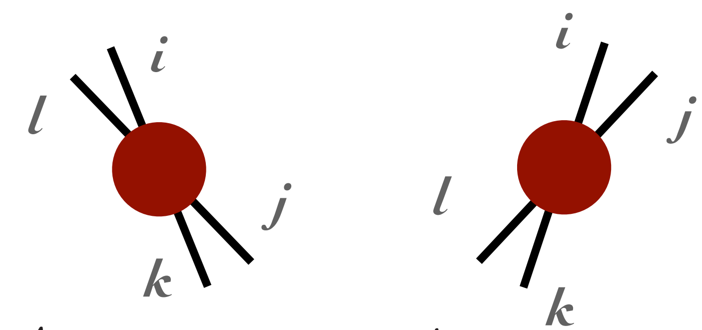
テンソルの行列への変形

テンソルの足をまとめて行列とみなす

ダイアグラム



$A_{i,j,k,l}$ →



$A_{\underline{(i,l)},(j,k)}$　$A_{(i,j),(k,l)}$

$i,\ l = 0,\ 1$のとき

$(0,0) \to 0$
$(0,1) \to 1$
$(1,0) \to 2$
$(1,1) \to 3$

テンソル	$A_{i,j,k,l}$	→	$A_{(i,l),(j,k)}$	$A_{(i,j),(k,l)}$
形状	$\chi \times \chi \times \chi \times \chi$	→	$\chi^2 \times \chi^2$	$\chi^2 \times \chi^2$

- テンソル用のライブラリで簡単に行える。（例：numpy.reshape)
- 行列への変形は一般に、一意ではない
  - どの様に行列化するかは、目的に合わせる

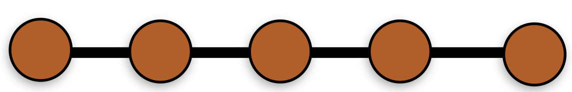
テンソルネットワークの縮約

テンソルネットワーク縮約の計算量

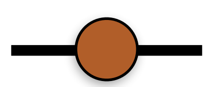
ループのないツリー型の構造以外では、

計算量はテンソル数に関して、指数関数的に増大する

長さNのchain



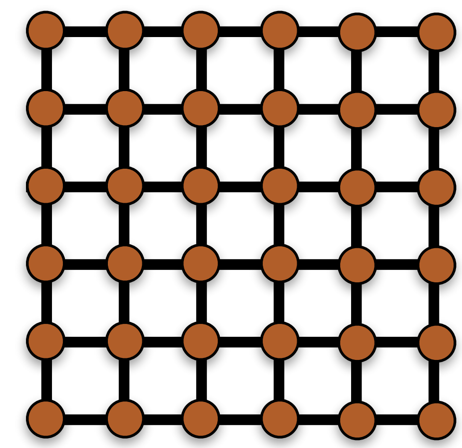
局所テンソル：



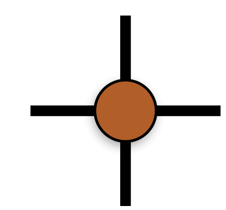
$\chi \times \chi$

端から順に縮約：$O(N\chi^2)$

$L{\times}L$のsquare lattice



局所テンソル：



$\chi \times \chi \times \chi \times \chi$

端から順に縮約：$O(L^2\chi^L)$

大規模なテンソルネットワーク縮約は近似的に評価

2d 規則TNに対する汎用的アプローチ：

- テンソル繰り込み
- 行列積状態法
- 角転送繰り込み群

＊不規則でも同種の近似は可能

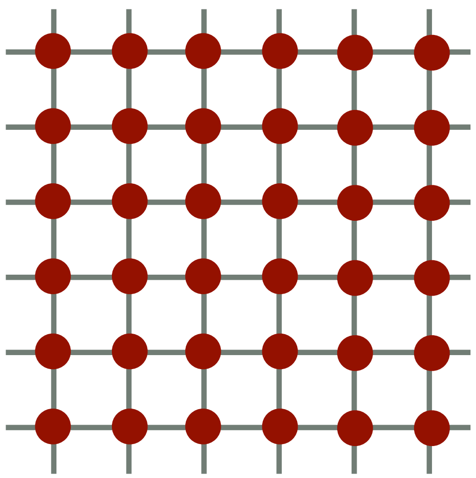
テンソル繰り込み群

テンソル繰り込み群

- M. Levin and C. P. Nave, PRL (2007)によるTensor network Renormalization Group (TRG)から始まった比較的新しい流れ
- 分配関数のテンソルネットワーク表現を粗視化していくことで、近似的に分配関数を計算する
    - 粗視化⟷実空間繰り込み群
- 種々の格子模型に適用可能
    - 物性分野だけでなく、素粒子・原子核分野でも近年研究が進んでいる
    - 経路積分表示により、D次元の量子系とD+1次元の古典系が対応

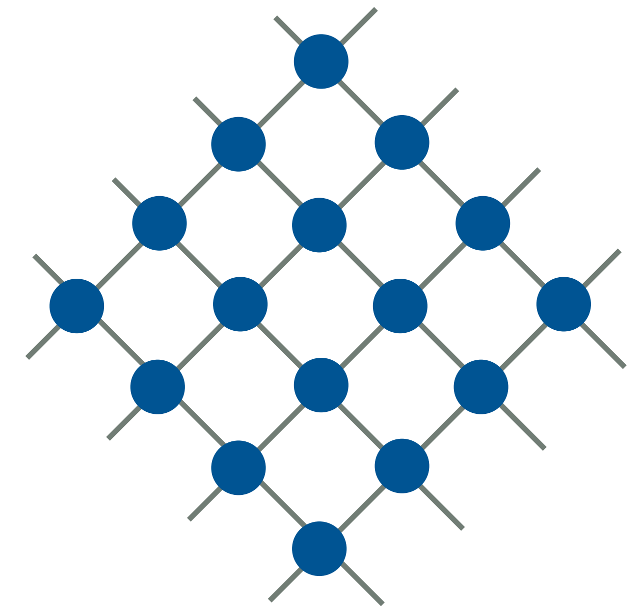
TRGでやりたいこと

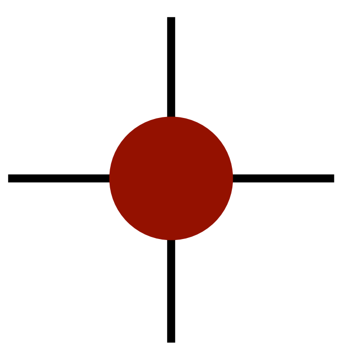
分配関数



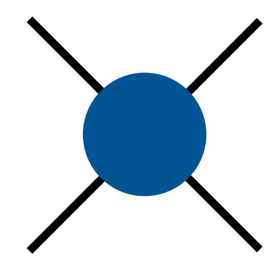
繰り込み

(長さスケールが$\sqrt{2}$倍)





(近似)



A: $D\times D\times D\times D$

L×L の正方格子

$\tilde{A}$: $D\times D\times D\times D$

(L×L)/2 の正方格子

テンソルの大きさを変えずに
テンソルの数を減らす

TRGの準備：行列の低ランク近似

行列の階数（rank）：

行列の行（or 列）ベクトルのうち線形独立なものの数

A: N×M行列 ➡ $\mathrm{rank}(A) \leq \min(N, M)$

低ランク近似：

行列Aの低ランク行列での近似　$\mathrm{rank}(\tilde{A}) = R < \mathrm{rank}(A)$

$\boxed{\text{いらない情報をそぎ落として、重要な情報だけを残す}}$

近似の精度

$$\epsilon = ||A - \tilde{A}|| \quad ||X|| \equiv \sqrt{\sum_{i,j} X_{ij}^2}$$

➡ $\displaystyle \min_{\tilde{A}_{ij};\mathrm{rank}\tilde{A}=R} ||A - \tilde{A}||$ を満たす最適な低ランク近似は

特異値分解（SVD）から得られる

TRGの準備：特異値分解

特異値分解

任意の行列N×M行列Aは以下の形に一意に分解できる

$$A_{i,j} = \sum_{k=1}^{\min(N,M)} U_{ik}\lambda_k V^*_{jk}$$

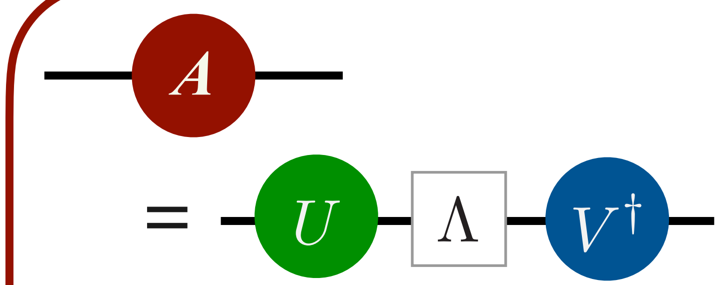
λ_k は非負の実数。$\lambda_k \geq 0$

$\boxed{\text{rank(A) = 非ゼロの特異値の数}}$

$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \cdots$ と並べると便利

U_{ik}, V^*_{jk} 一般化ユニタリ行列

$$\sum_i U_{ik}U^*_{il} = \delta_{kl} \quad \sum_i V_{jk}V^*_{jl} = \delta_{kl}$$



$$A = U\Lambda V^\dagger$$

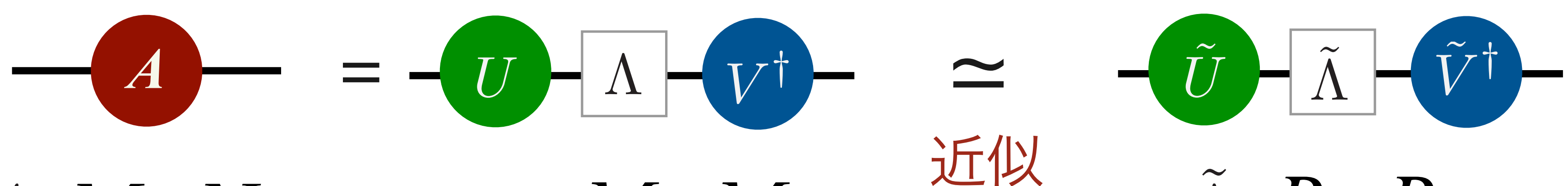
Λ 対角成分がλの対角行列

$$U^\dagger U = I$$
$$VV^\dagger = I$$

Aの最適なRランク近似：　特異値を大きい方からR個だけ残し、残りをゼロで置き換える

TRGの準備：特異値分解による近似

Aの最適なRランク近似：　特異値を大きい方からR個だけ残し、
残りをゼロで置き換える

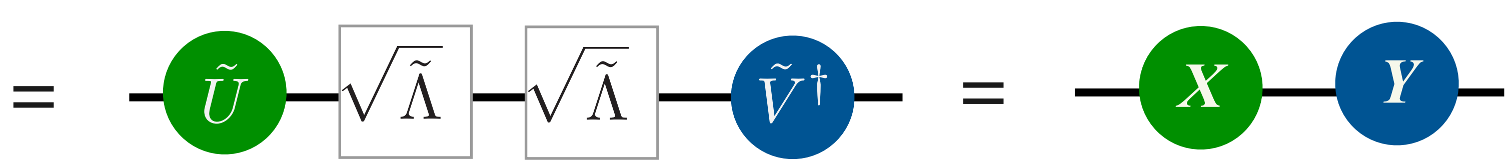


$A:M\times N$　(M ≦ N)

$\Lambda:M\times M$
$U,V:(\mathrm{M,N})\times M$

$\tilde{\Lambda}:R\times R$
$\tilde{U},\tilde{V}:(\mathrm{M,N})\times R$

さらに



$\sqrt{\tilde{\Lambda}}$: 対角成分が$\sqrt{\lambda}$の対角行列

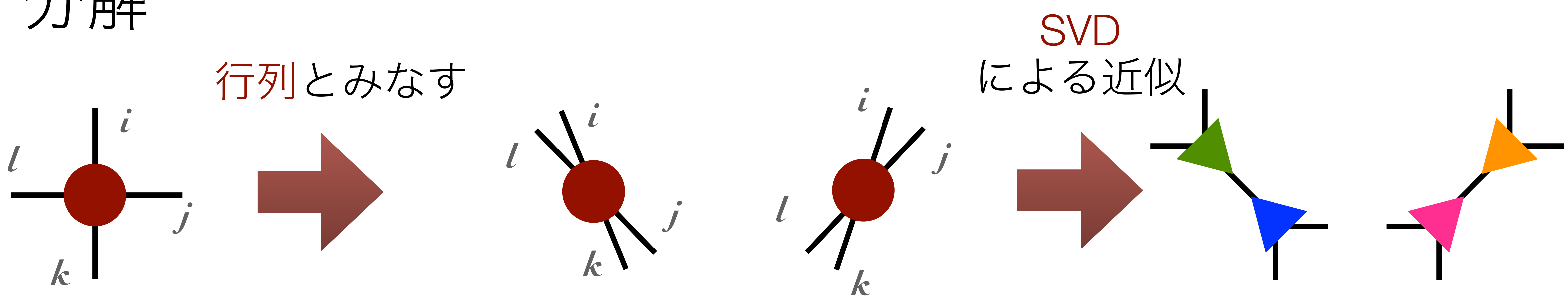
$X=\tilde{U}\sqrt{\tilde{\Lambda}}$　$:\mathrm{M}\times R$

$Y=\sqrt{\tilde{\Lambda}}\tilde{V}^\dagger$　$:\mathrm{R}\times N$

SVDを使うと
Aを小さい行列の積
に分解できる

テンソル繰り込みのレシピ

1．分解

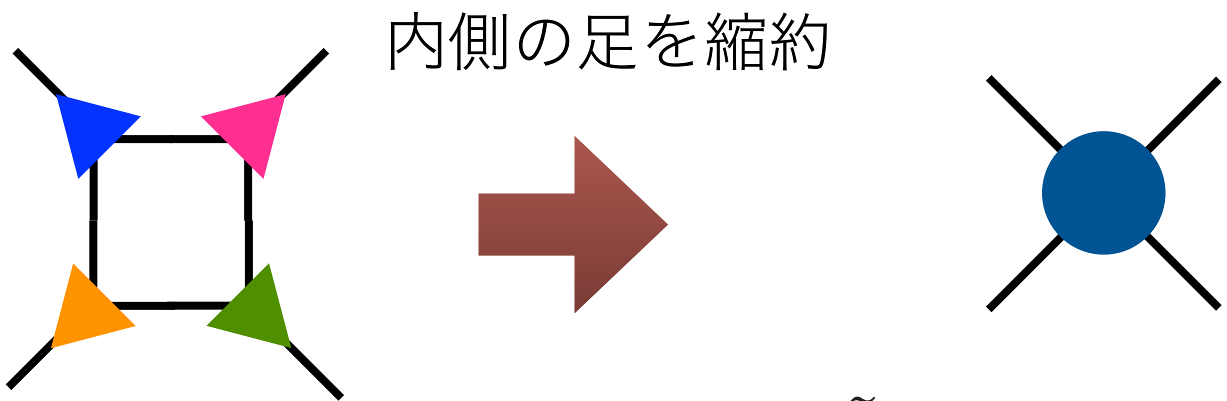


$A_{i,j,k,l}$　　$A_{(i,l),(j,k)}$　　$A_{(i,j),(k,l)}$　　rank(A)=Dに近似

A: $D\times D\times D\times D$　　　$A: D^2\times D^2$

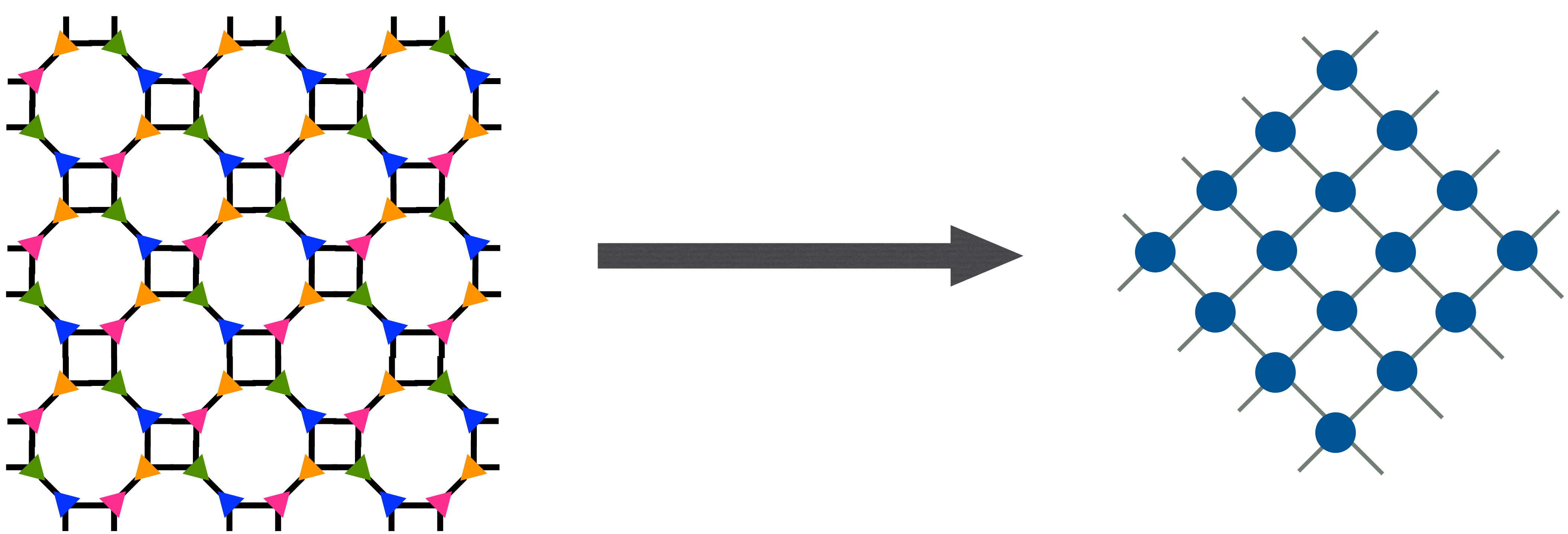
テンソル繰り込みのレシピ

2．粗視化



$$\tilde{A} : D \times D \times D \times D$$

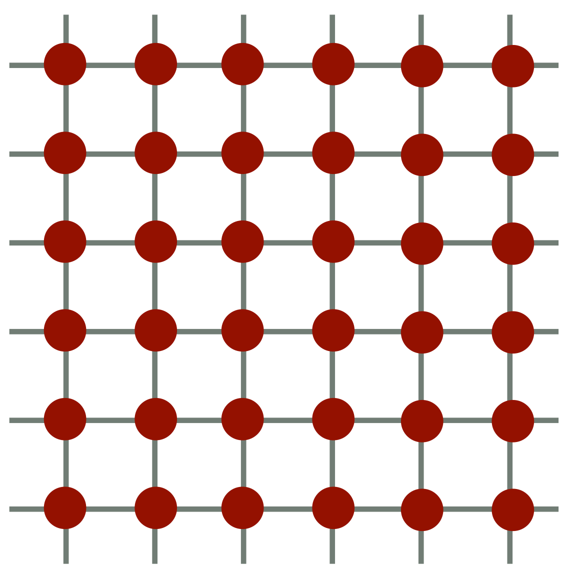
元のテンソル２つが
新しいテンソル１つに
粗視化された



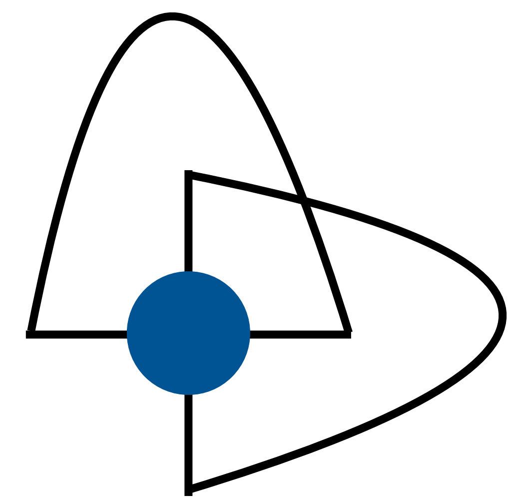
テンソル繰り込みのレシピ

分配関数

（周期境界条件）

$Z =$ 

１つになるまで
前述の操作を繰り返す



簡単に計算できる物理量

自由エネルギー： $F = -k_B T \ln Z$

エネルギー： $E = -\dfrac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$ （微分を差分で近似）

比熱： $C = \dfrac{1}{k_B T^2} \dfrac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}$ （微分を差分で近似）

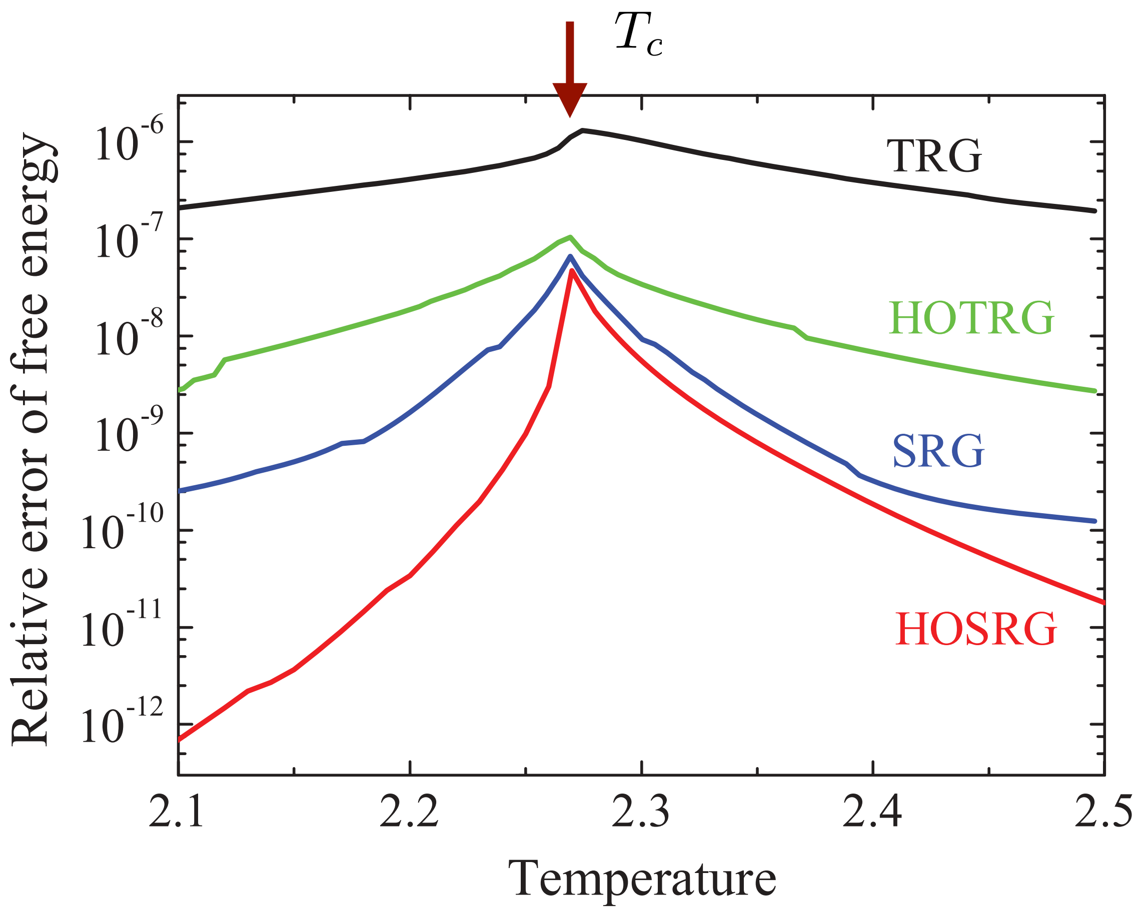
テンソル繰り込みでの計算例

イジング模型

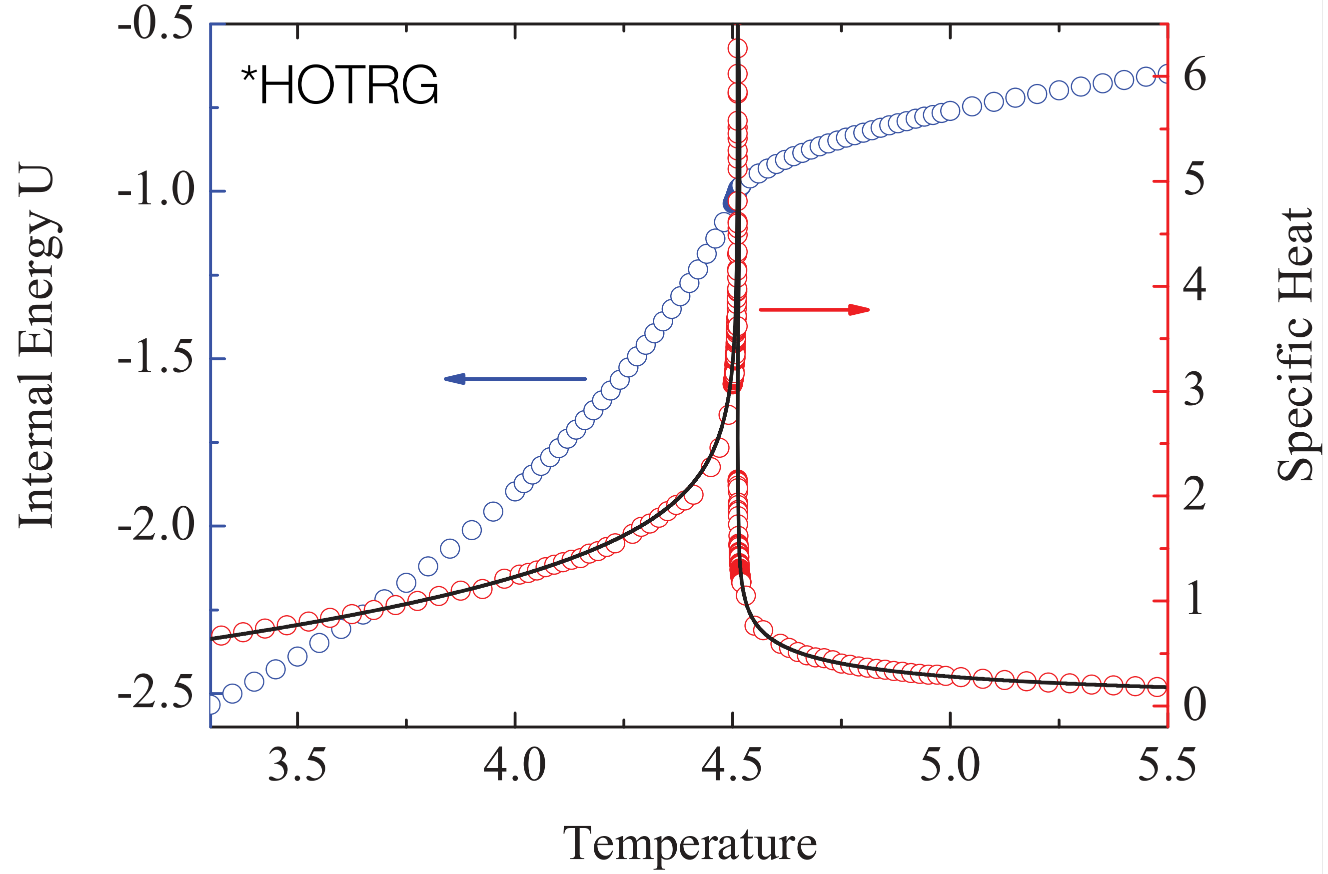
$$\mathcal{H} = -J\sum_{\langle i,j\rangle} S_i S_j$$

Z. Y. Xie *et a*l, Phys. Rev. B **86**, 045139 (2012)

二次元イジング模型の自由エネルギー



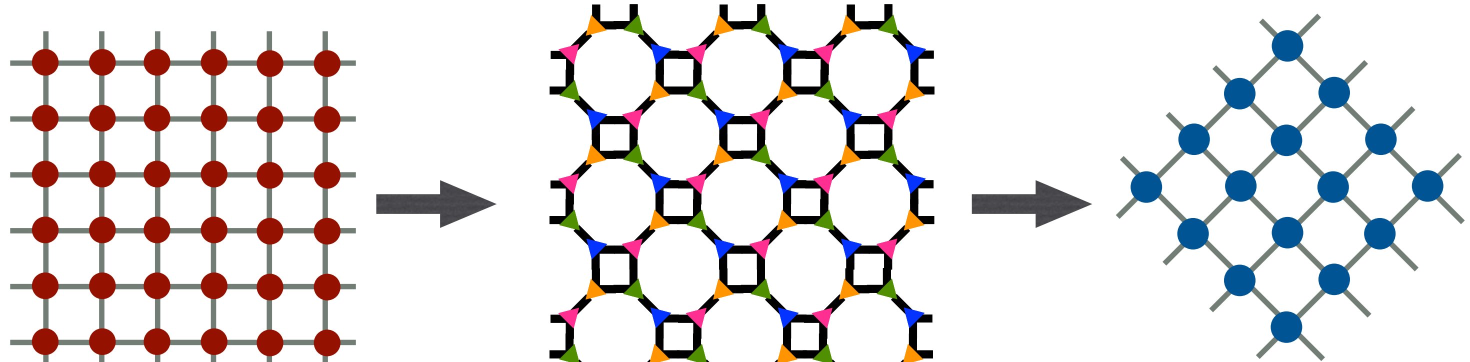
３次元イジング模型のエネルギー・比熱



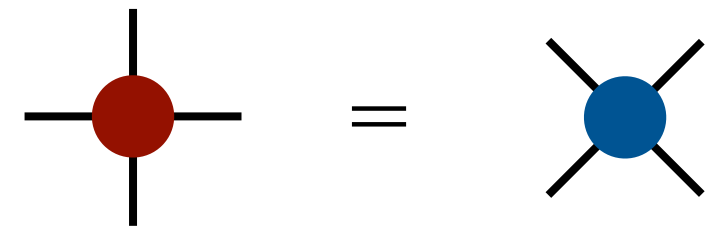
$$T_c/J = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \simeq 2.269$$

テンソル繰り込みと臨界現象

テンソル繰り込みでは、臨界現象（臨界指数など）も計算可能



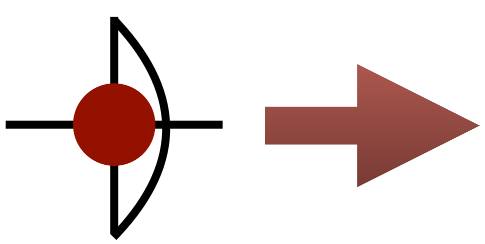
テンソルの固定点：



繰り込み変換で不変なテンソル

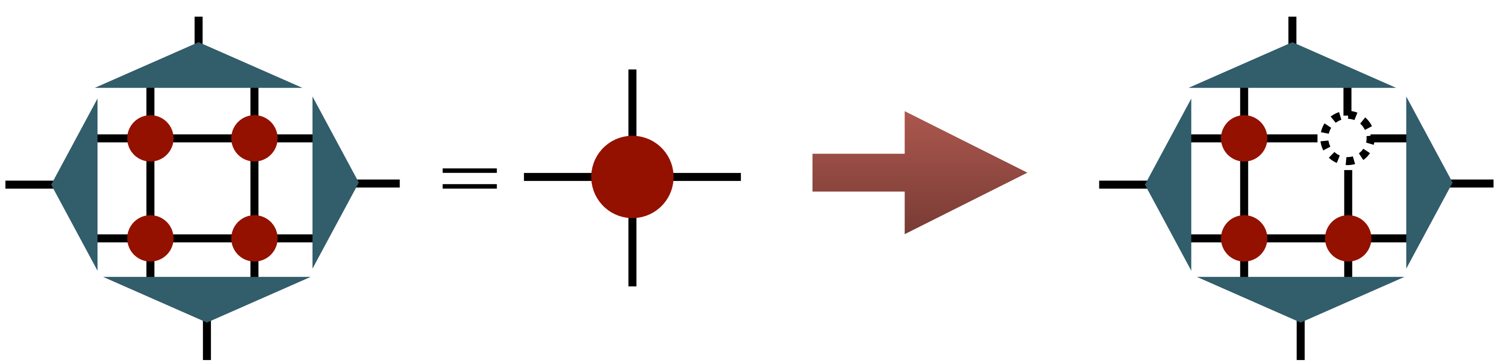
固定点テンソルと臨界指数

・転送行列の固有値から臨界指数を得る (Z. C. Gu and X. G. Wen, Phys. Rev. B **80**, 155131 (2009).)



$$\Delta_i = -\log \frac{\lambda_i}{\lambda_1}$$

・繰り込み操作から臨界指数を得る (cf. X. Lyu, R. G. Xu, and N. Kawashima, Phys. Rev. Research 3, 023048 (2021))

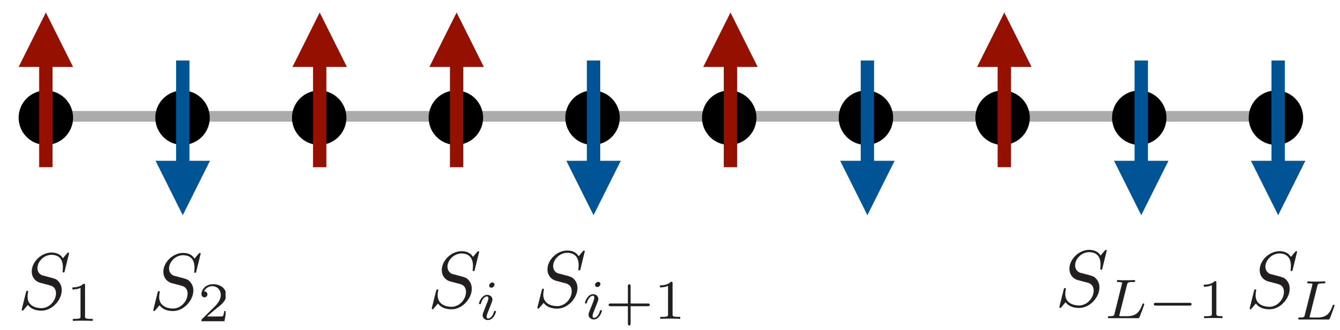


の固有値=スケーリング指数

行列積状態による縮約

転送行列（再掲）

例：１次元イジング模型



$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{L-1} S_i S_{i+1}$$

$$S_i = 1, -1$$

$$1 = \uparrow \qquad -1 = \downarrow$$

分配関数

$$Z = \sum_{\{S_i=\pm 1\}} e^{\beta J \sum_i S_i S_{i+1}}$$

$$= \sum_{\{S_i=\pm 1\}} \prod_{i=1}^{L-1} e^{\beta J S_i S_{i+1}}$$

$$= \sum_{S_1=\pm 1, S_L=\pm 1} \left(T^{L-1}\right)_{S_1, S_L}$$

転送行列

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{cc} +1 & -1 \end{array} \\ T = & \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix} \begin{array}{c} +1 \\ -1 \end{array} \end{array}$$

$$T_{S_i, S_{i+1}} = e^{\beta J S_i S_{i+1}}$$

分配関数は転送行列の積でかける

転送行列の対角化

転送行列

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix}$$

転送行列は実対称行列

固有値は実で、直行行列で対角化可能

$$T = P^t \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} P$$

$$\lambda_+ = 2\cosh \beta J$$
$$\lambda_- = 2\sinh \beta J$$

$$|\lambda_+| > |\lambda_-|$$

$$P^t P = P P^t = I$$

分配関数

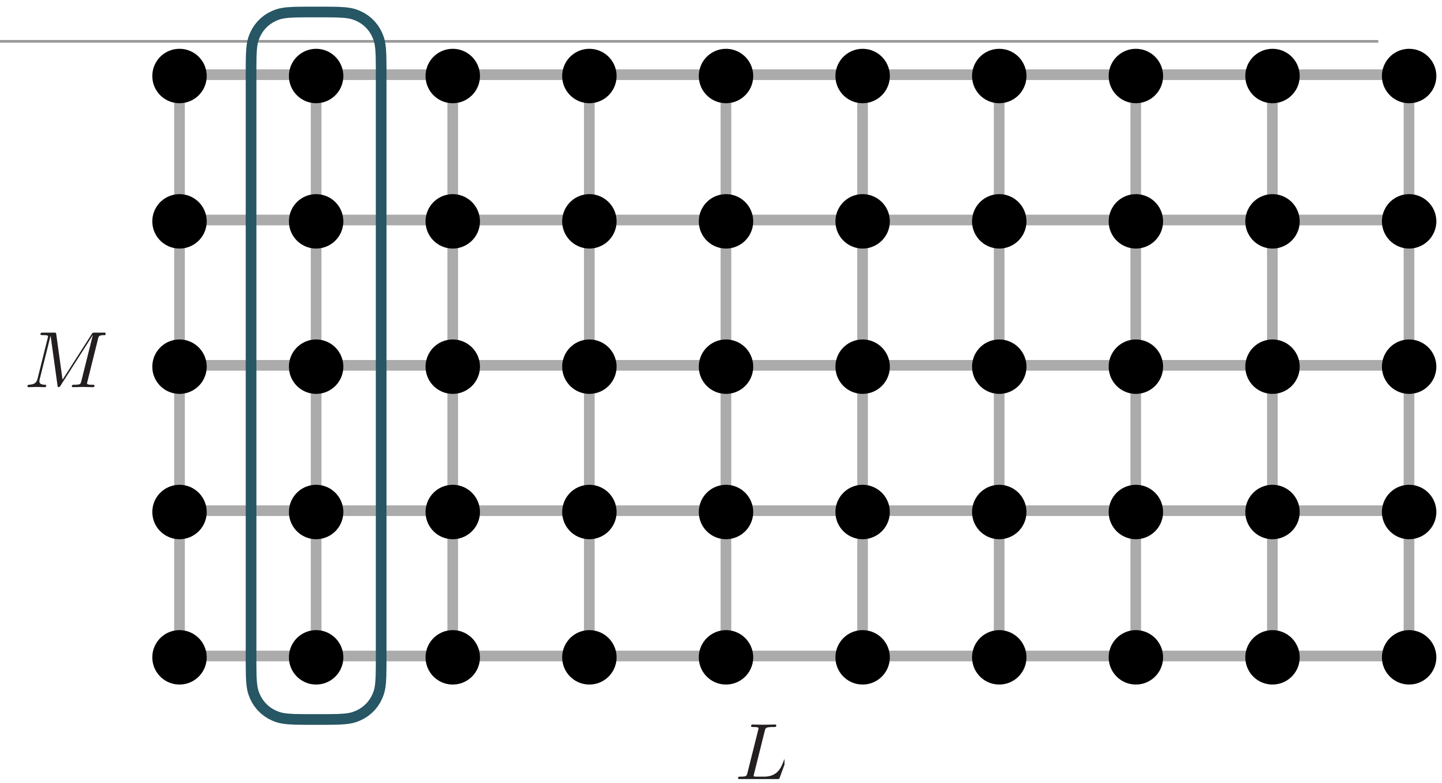
$$Z = \sum_{S_1=\pm 1, S_L=\pm 1} \left[P^t \begin{pmatrix} \lambda_+^{L-1} & 0 \\ 0 & \lambda_-^{L-1} \end{pmatrix} P \right]_{S_1, S_L}$$

分配関数の計算→転送行列の対角化

＊L が大きな時は、（絶対値）最大の固有値が支配的

２次元系の転送行列

$L{\times}M$の２次元系



M個のスピンを1セットで考えると１次元系と同等

転送行列の大きさ

1次元系：2×2

$L{\times}M$の２次元系：$2^M{\times}2^M$ (or $2^L{\times}2^L$)

２次元以上では転送行列が系サイズに関して指数的に大！

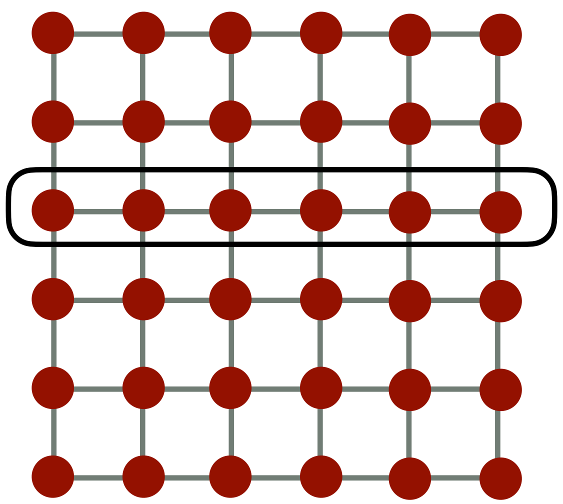
厳密な計算はすぐに破綻する

２次元イジング模型だったら、M=50程度が限界
（疎行列の対角化問題）

転送行列の演算を近似的に計算？

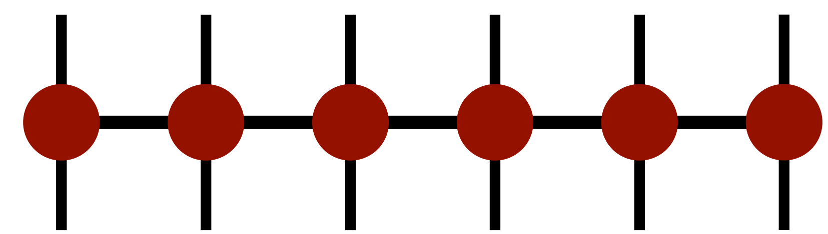
TNの縮約での転送行列と固有値問題

二次元のTN（例：イジング模型の分配関数）

$Z =$ 

1行を取り出す

“転送行列”

$T =$ 

（＊簡単のため、同じ転送行列が繰り返されているとする）

絶対値最大の固有値λと対応する右・左固有ベクトル

$$T\vec{v} = \lambda\vec{v}$$
$$\vec{u}^t T = \lambda\vec{u}^t$$

$$Z \simeq \lambda^M (M \to \infty)$$

固有ベクトルの計算：初期ベクトルに何度も転送行列をかける

$$\vec{v} \propto \lim_{m\to\infty} T^m \vec{v}_0$$
$$\vec{u} \propto \lim_{m\to\infty} (T^t)^m \vec{u}_0$$

固有値は簡単な演算で取り出せる

$$\lambda = \vec{u}^t T \vec{v}$$

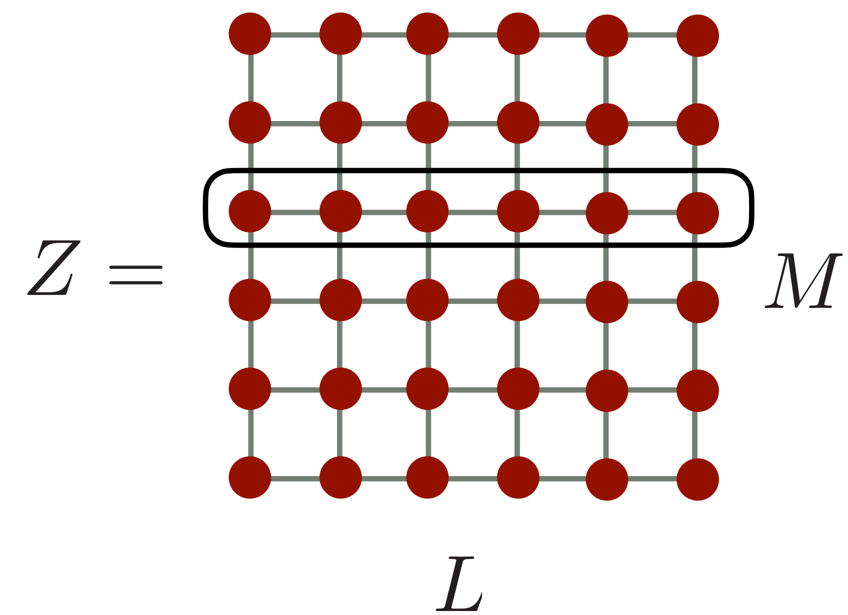
＊規格化：$\vec{u}^t\vec{v} = 1$

ベクトルのデータ圧縮：テンソルネットワーク分解

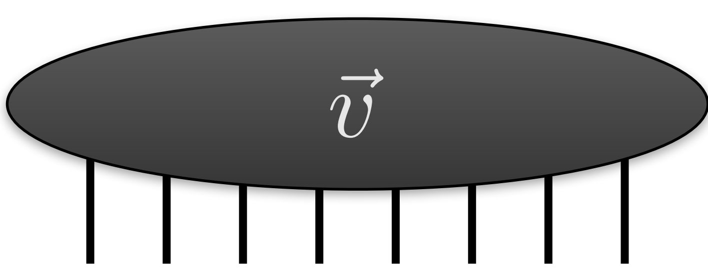
転送行列の固有ベクトルの次元：a^L

指数関数的に大きい！

a: 足の次元
（イジング模型では*a*=2）

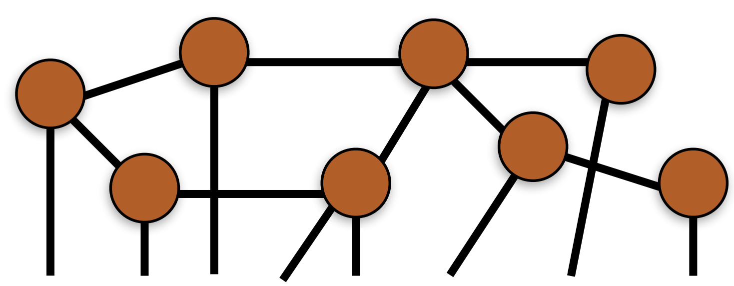


- 量子多体状態と同じ内部構造
- 同様にテンソルネットワーク分解が使える！



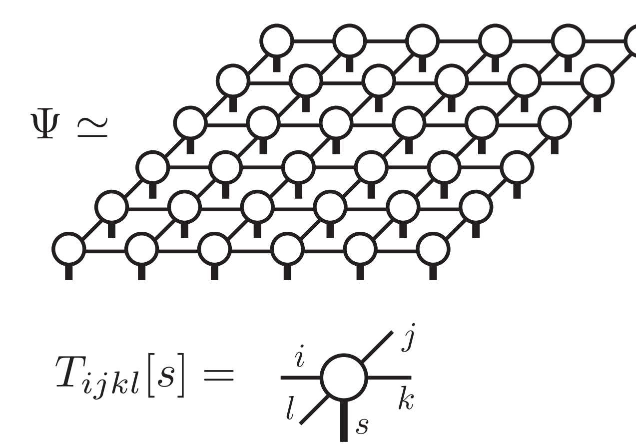
相関の
特徴を利用した近似

テンソルネットワーク分解



~$O(N)$の独立要素

PEPS (for 2d system)



テンソルネットワーク状態を使った固有ベクトル計算

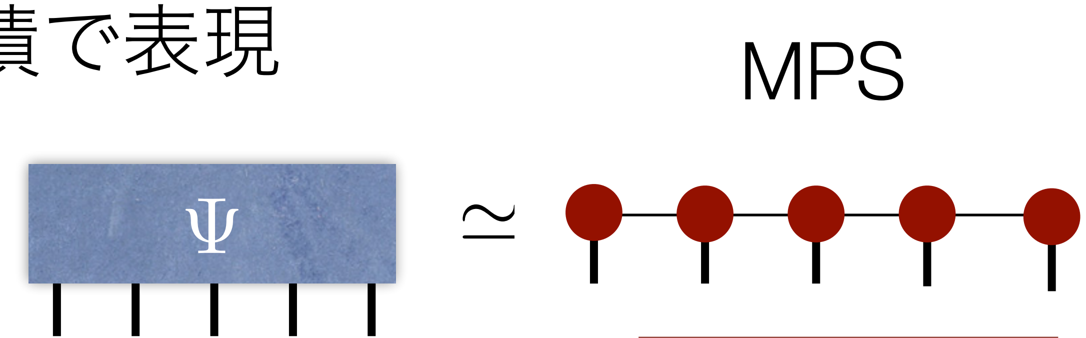
行列積状態 (MPS)

Good reviews:

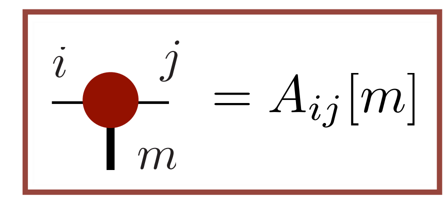
(U. Schollwöck, Annals. of Physics **326**, 96 (2011))
(R. Orús, Annals. of Physics **349**, 117 (2014))

N本足のテンソル（ベクトル）を行列の積で表現

$$\Psi_{i_1 i_2 \ldots i_N} \simeq A_1[i_1]A_2[i_2]\cdots A_N[i_N]$$



$A[i]$: index i の行列



注：

- MPS は量子多体状態で広く用いられてきた

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

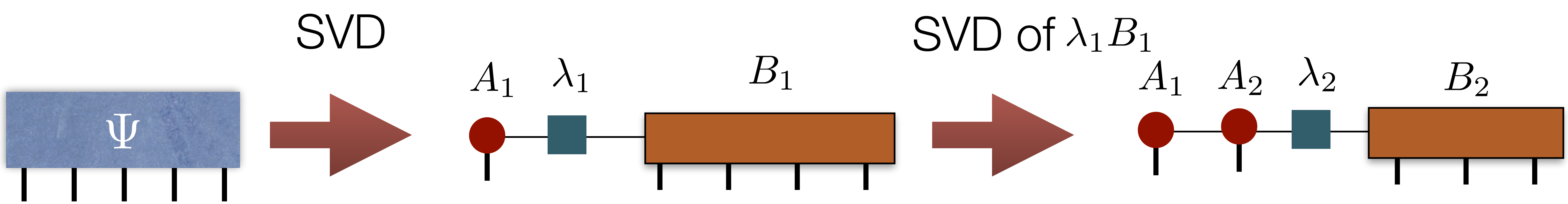
- MPS は応用数理では"tensor train decomposition" とも呼ばれている

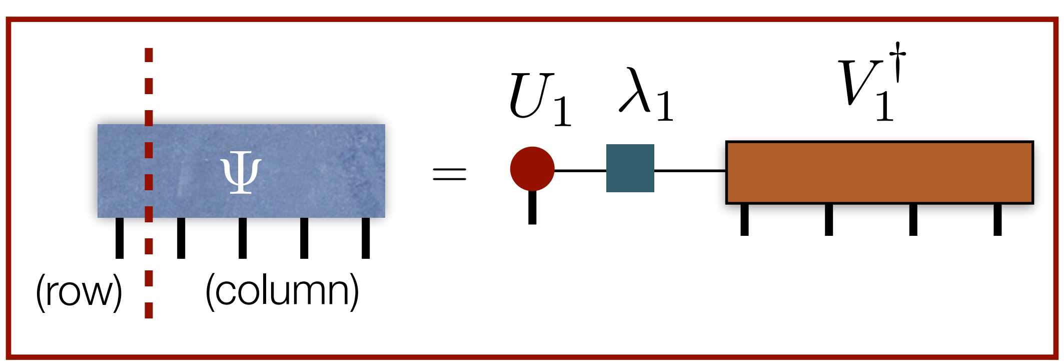
(I. V. Oseledets, SIAM J. Sci. Comput. **33**, 2295 (2011))

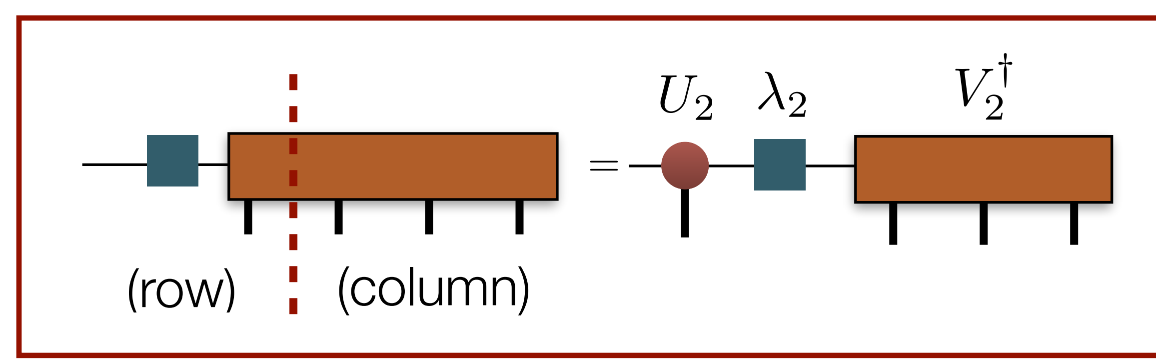
行列積状態への厳密な変換

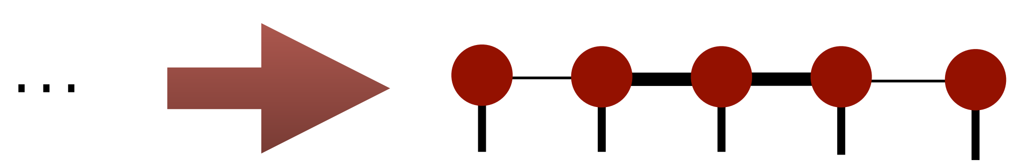
任意のテンソル（ベクトル）は特異値分解を繰り返すことで

厳密なMPS表現に常に変換できる







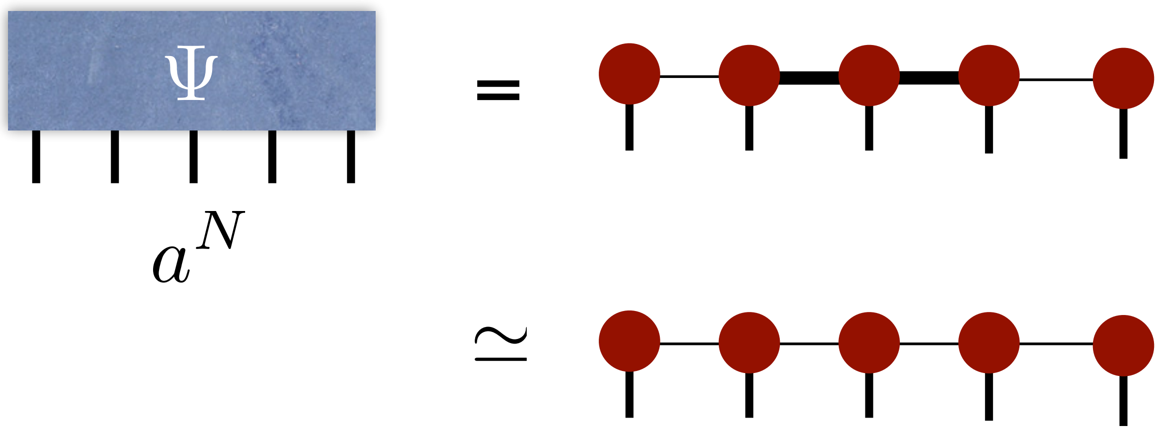


この構成では行列の次元は場所に依存

最大のボンド次元 = $a^{N/2}$

a:各足の次元

行列積状態における低ランク近似



最大ボンド次元 = $a^{N/2}$

a^N

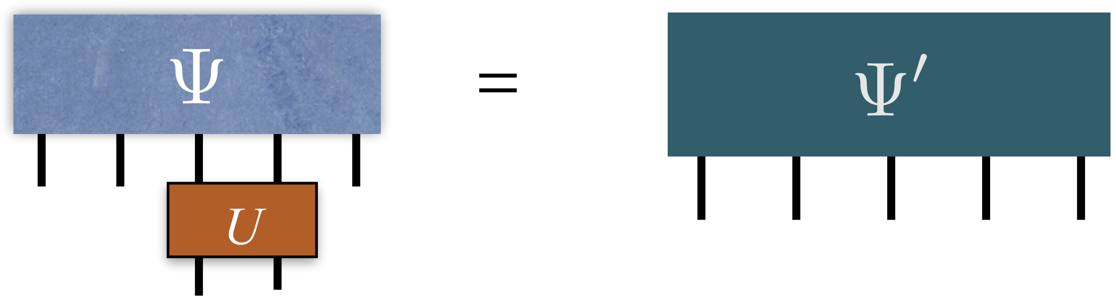
最大ボンド次元 = χ

$\propto Na\chi^2$

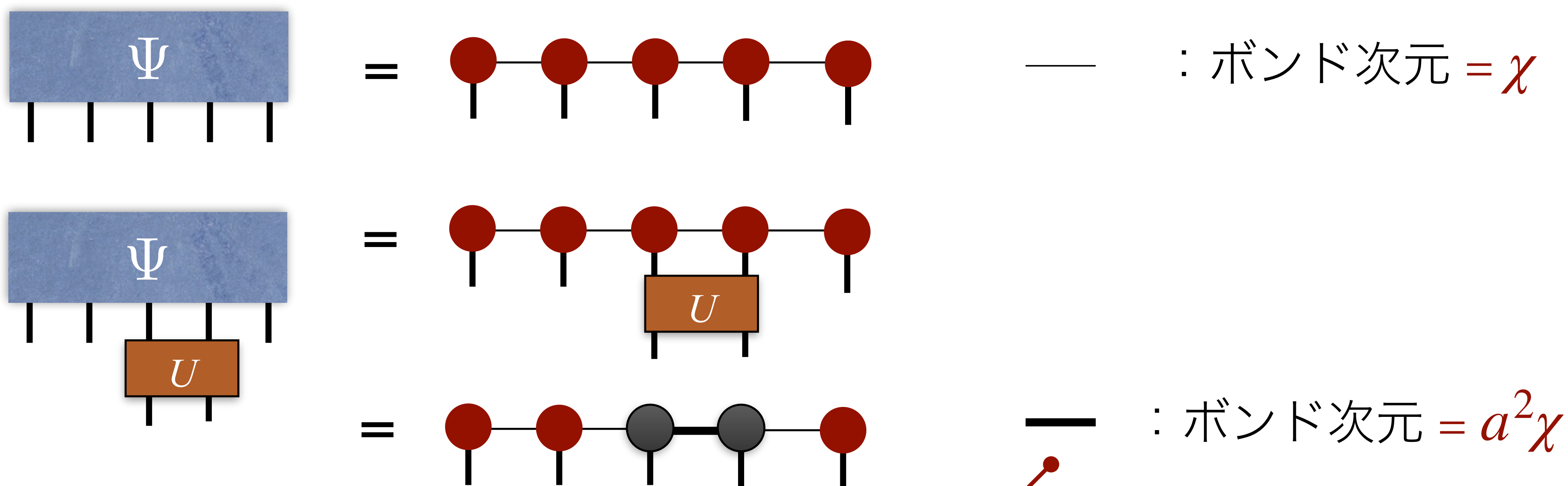
もし、もとのテンソルがボンド次元 χ の行列積状態で精度良く近似できれば、Nの指数関数のデータ量をNの多項式にまで大幅に減らせる！

- ここでは、χ が N に依存しないことを暗黙のうちに仮定した
  - 1次元量子多体系で励起エネルギーにギャップがある基底状態では仮定は正当化できる。
    - これは、２次元イジング模型の臨界温度以外に相当。
  - 一般のテンソルでは、この性質が必ずしも成立はしない。（cf. 面積則）
- 仮に χ が N と共に増大するとしても、実用的には、MPS を使ってテンソルを近似できる。

行列積状態への “演算子” の適用と近似



行列積表現：

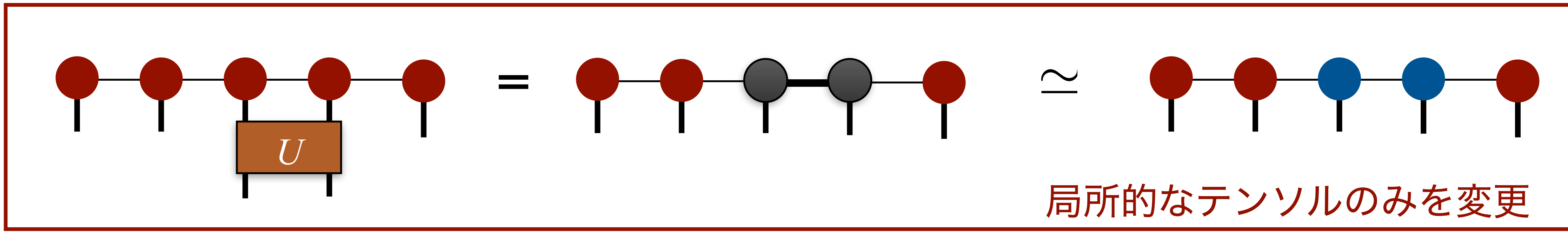


＊　演算子を適用する前のMPSと比べて、ボンド次元は一般には増大

繰り返し演算子を適用する場合、近似によりボンド次元を下げる必要

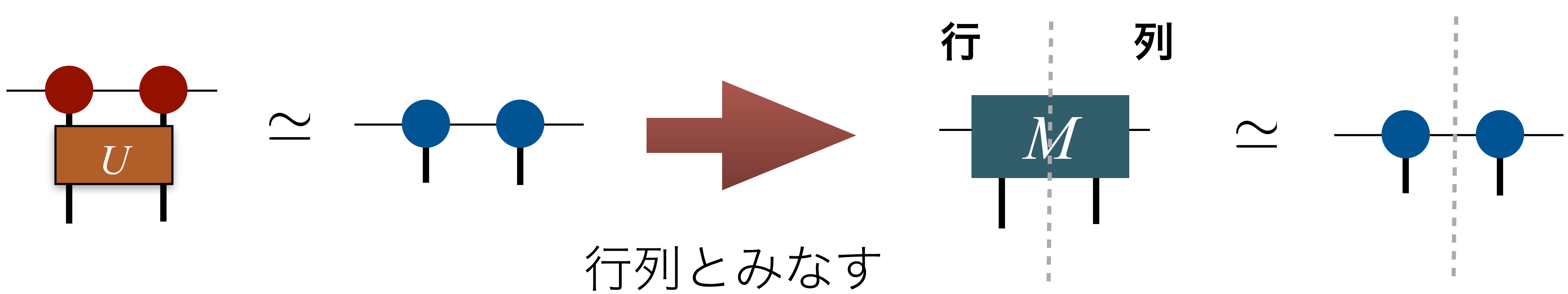
基本的な近似のアイデア

近似の例：



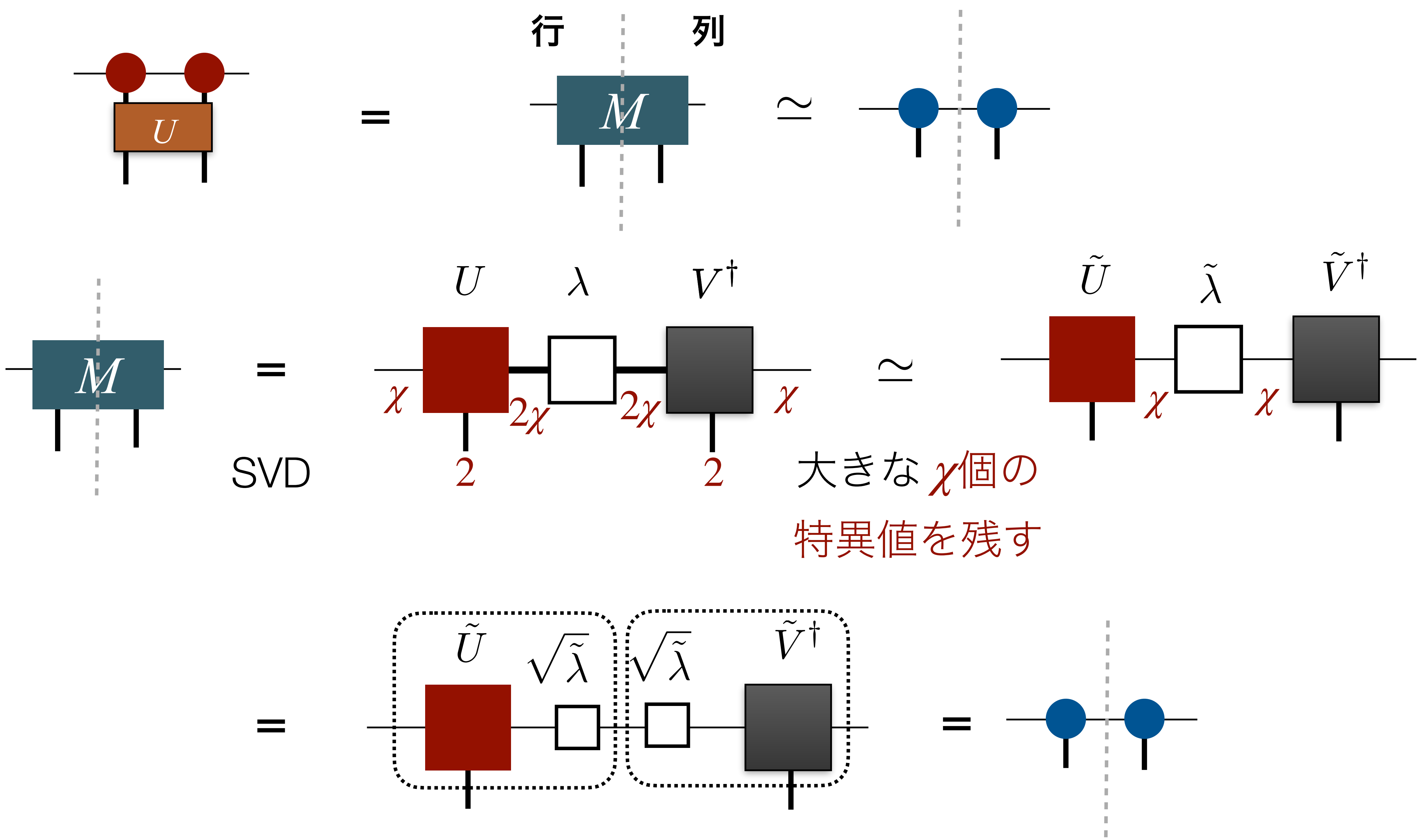
- この近似は、（同じボンド次元の範囲で）最適な近似ではないかもしれない
  - 一般には、局所的な演算子でもMPS全体のテンソルに影響を与える
  - U がユニタリ演算子の場合には、この近似はほぼ最適

周りの影響を無視した粗い近似



＊テンソル繰り込みの手続きと類似→SVD！

特異値分解による近似

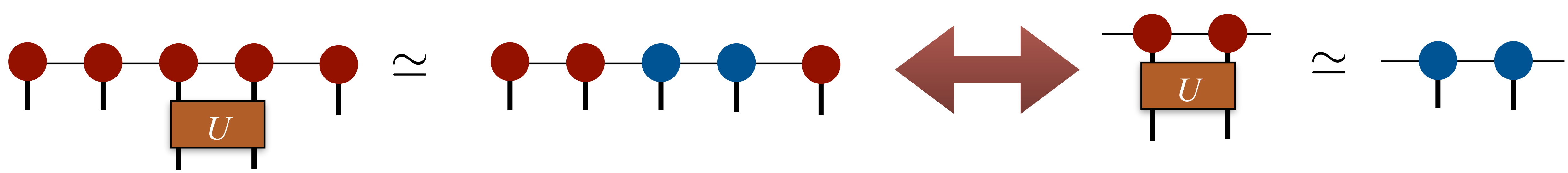


粗い近似の意味

ここでの近似は、局所的なテンソルのみを取り出している

一般的には、この局所近似は必ずしも
全体を見た時の最善な近似ではない

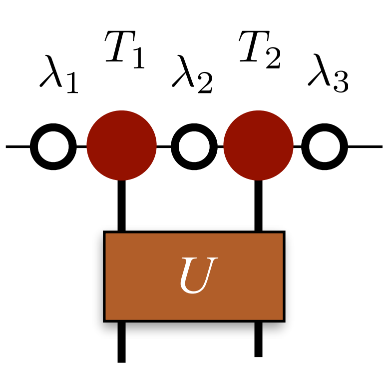
Global approximation **Local approximation**



MPS全体の影響を考える方法の例：TEBD法

Time evolving block decimation (G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **91**, 147902 (2003))

キーワード： Schmidt coefficient, canonical form, entanglement, ...



「環境テンソル」を含めたクラスターに対するSVD

厳密なMPSを構成した
ときの特異値と同じ

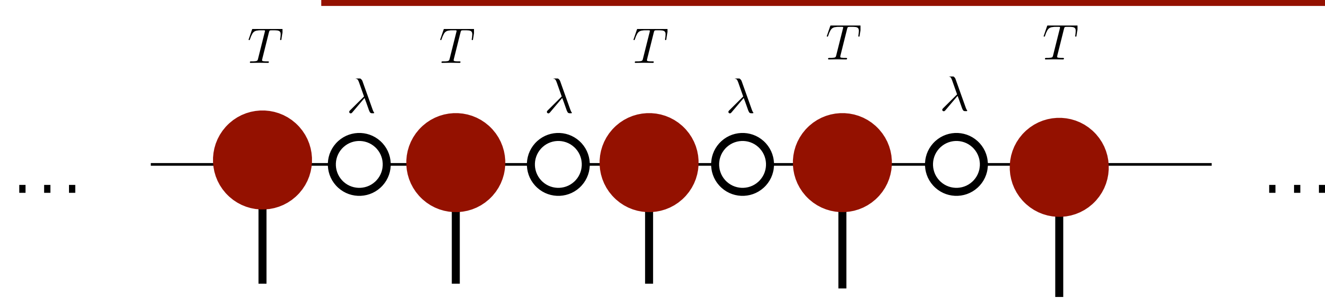
MPSの場合は、globalな最適化と等価！

テンソルネットワーク表現の利点：iMPS

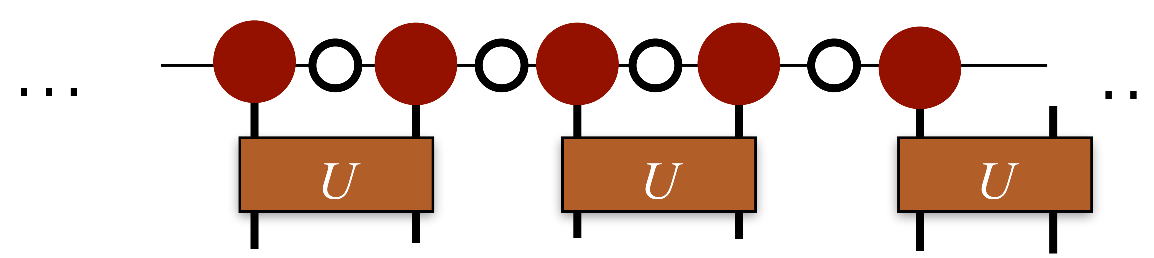
対象のテンソルが並進対象性を持つ場合

iMPS

同じテンソルを無限に繰り返すことで
無限に長いテンソルを表現可能



＊同じ演算子を全体に作用させる場合



iTEBD

- 並進対象性により近似の際のSVDは全て等価
- 局所的な計算1回だけで、無限系の計算ができる！

(G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **98**, 070201 (2007))

(R. Orús and G. Vidal, Phys. Rev. B **78**, 155117 (2008))

応用例：無限に大きな2次元イジング模型の分配関数計算

（おまけ）角転送繰り込み群

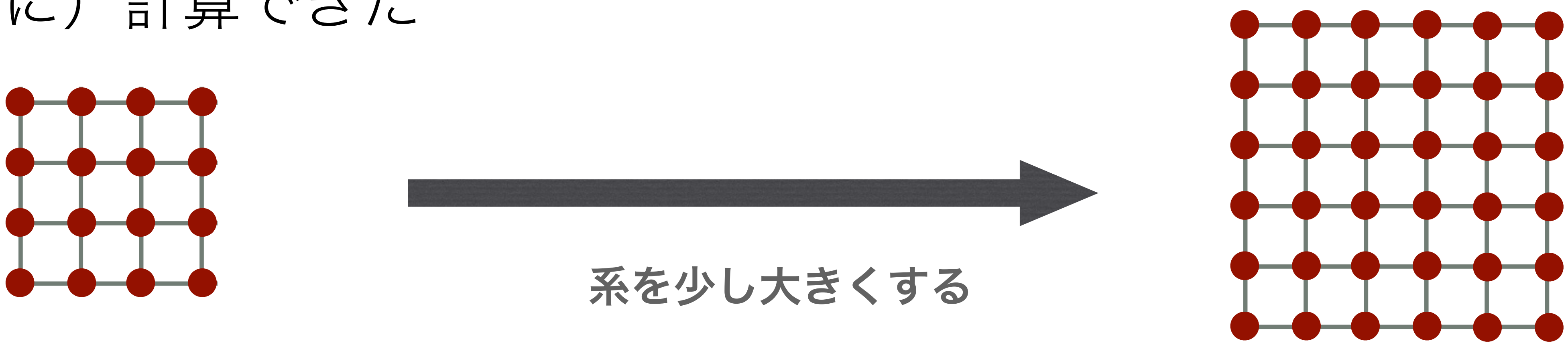
角転送行列繰り込み群（CTMRG）

- 奥西・西野ら (1995)による逐次的な“繰り込み”によるテンソルネットワークの計算方法
  - Corner Transfer Matrix Renormalization Group（CTMRG）
- 分配関数のテンソルネットワーク表現をL→L+2のように数サイトずつ大きくしていくことで、徐々に計算する
- 近年、２次元量子多体系の基底状態計算アルゴリズム（PEPS法、TPS法）の一部にも使われる

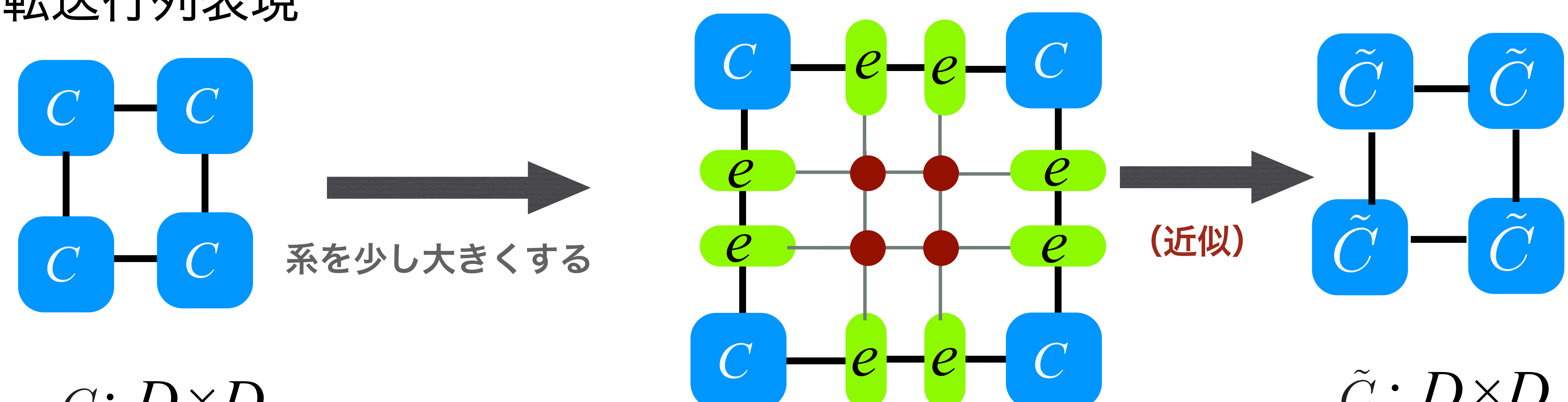
CTMRGでやりたいこと

L×Lの分配関数が
（近似的に）計算できた

(L+2)×(L+2)の分配関数を計算



角転送行列表現

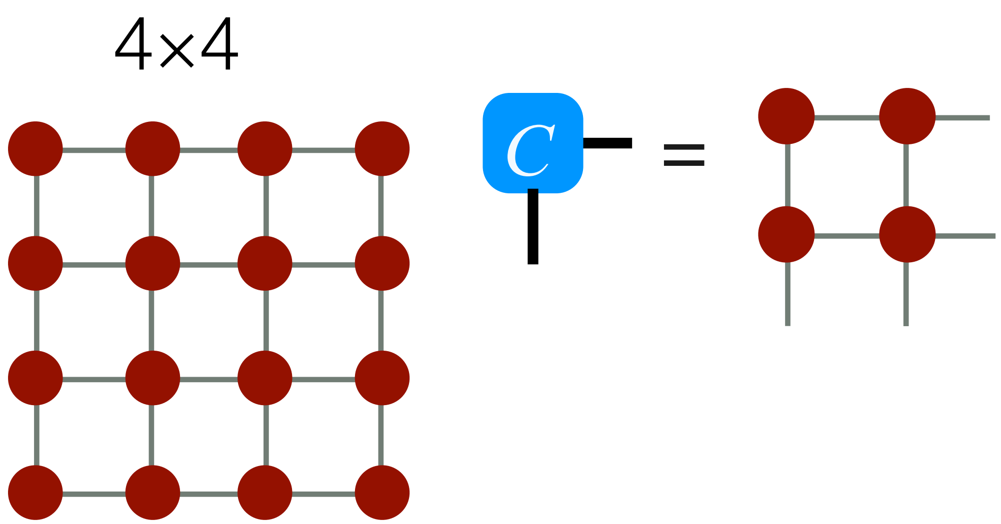


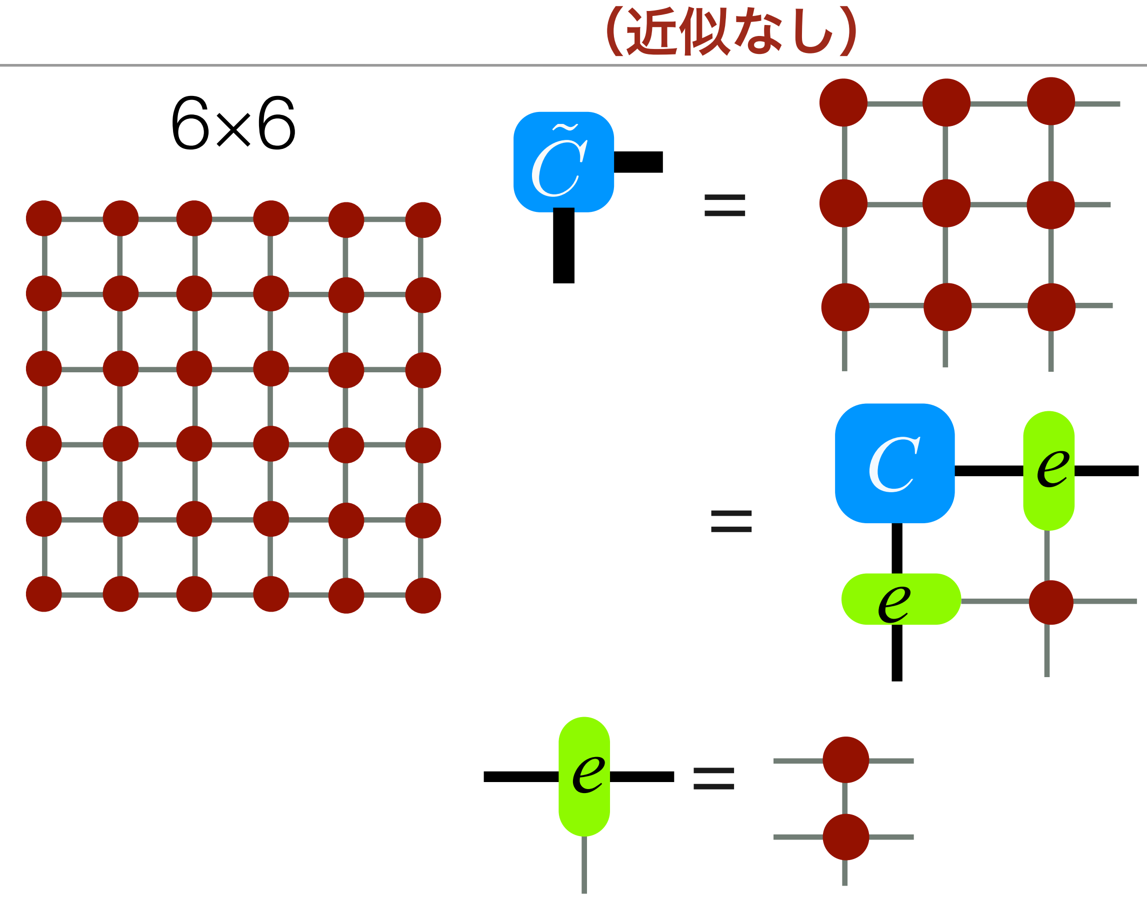
$C : D \times D$

$\tilde{C} : D \times D$

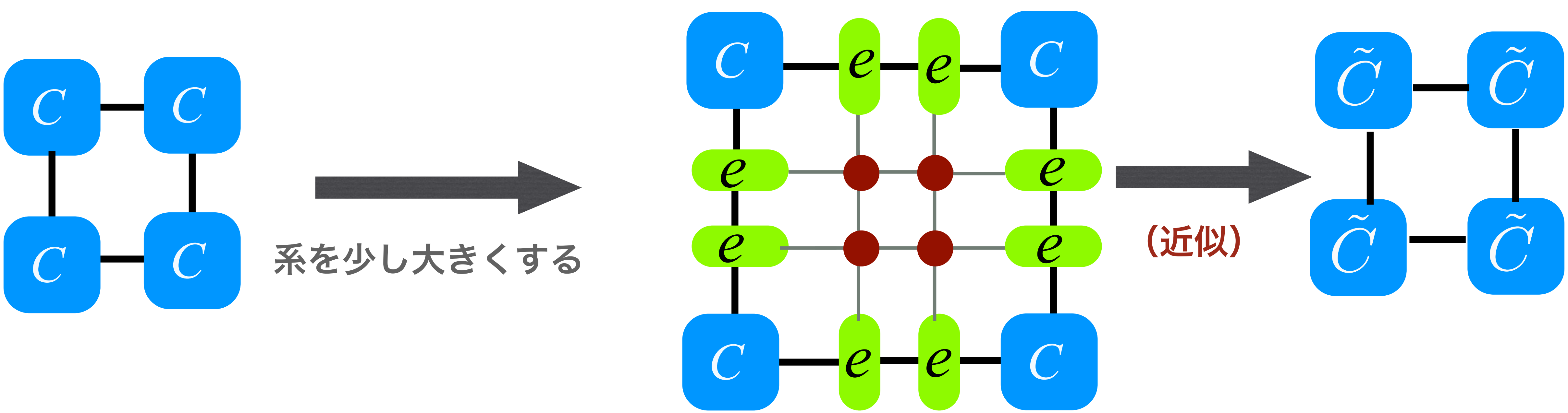
Cの大きさを変えずに
系を大きくする

角転送行列の意味





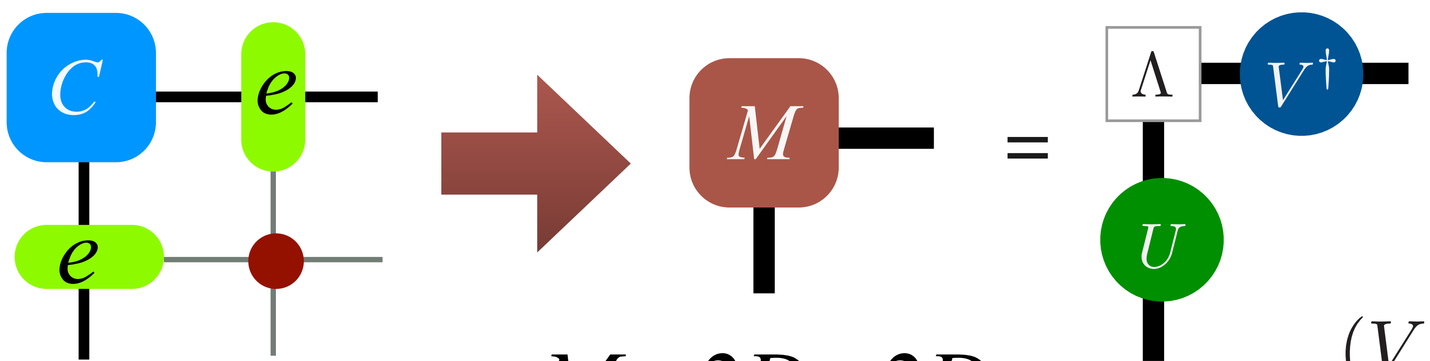
角転送行列表現



CTMRGのレシピ

1. SVDによる分解

行列と思ってSVD

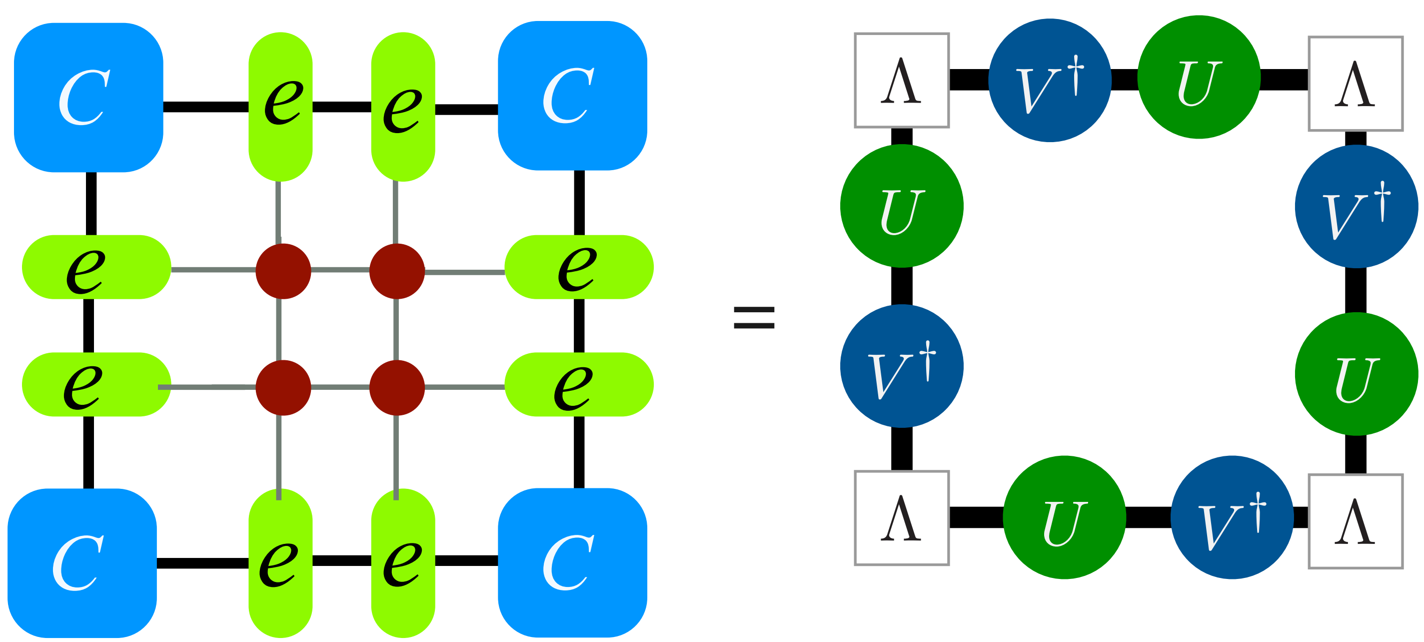


$M: 2D \times 2D$

Mは実対称（エルミート）行列

$$(V^\dagger U)_{i,j} = (U^\dagger V)_{i,j} = (-1)^{\eta_i}\delta_{i,j}$$

$$\eta_i = 0, 1$$



＊対称性を仮定

$$= \sum_i \lambda_i^4 (-1)^{4\eta_i}$$

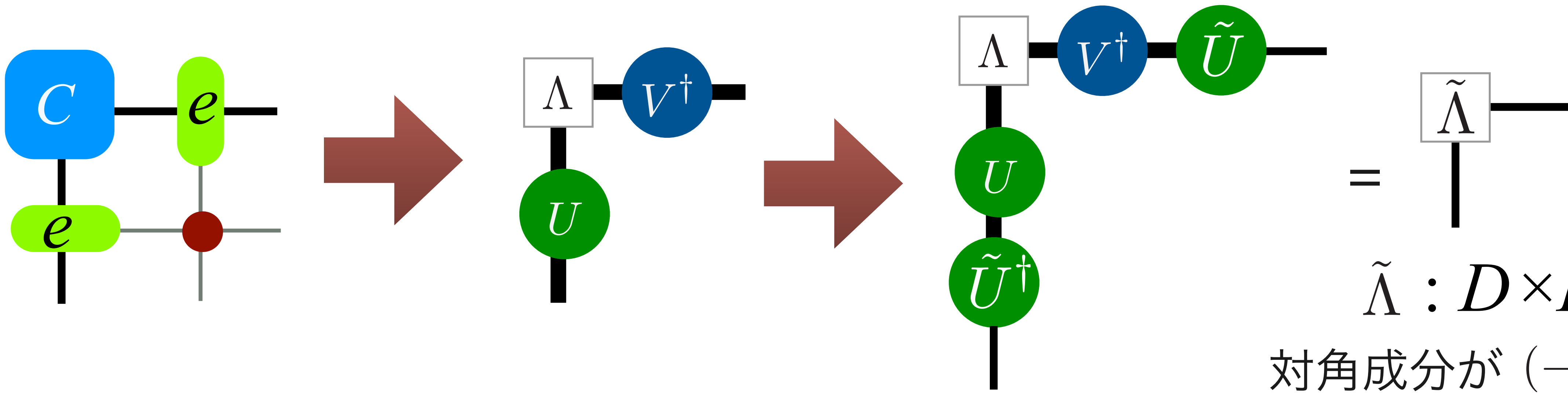
$$= \sum_i \lambda_i^4$$

特異値が大きいものD個を残せば良い近似！

CTMRGのレシピ

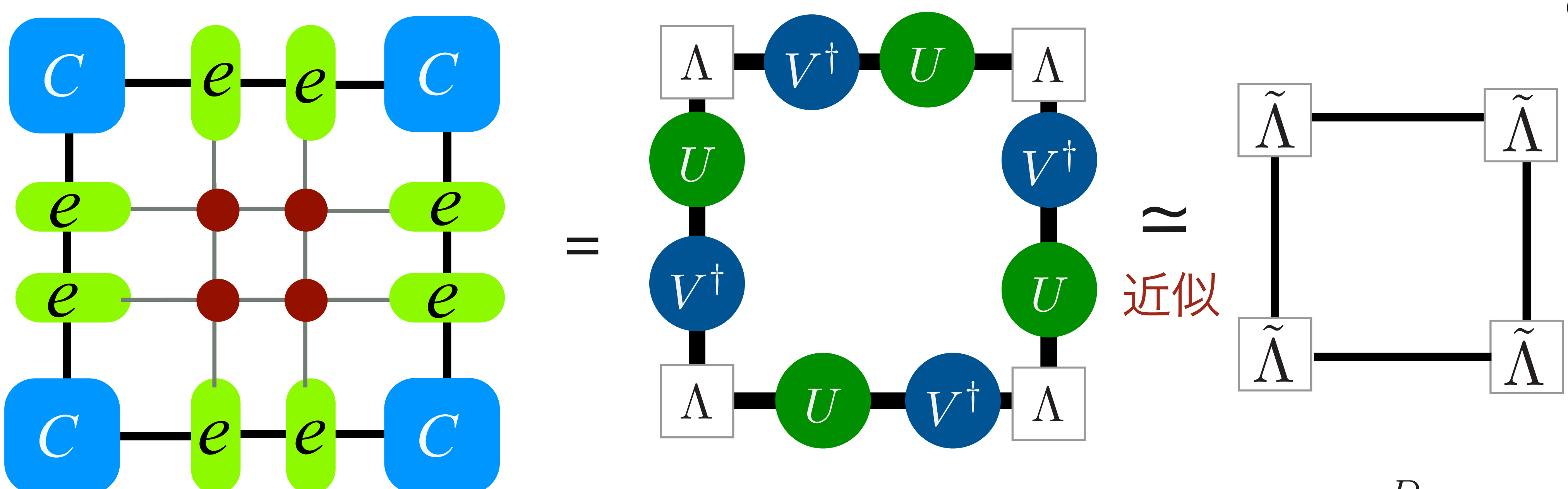
2. SVDを使って近似

$\tilde{U} : 2D \times D$



$\tilde{\Lambda} : D \times D$

対角成分が $(-1)^{\eta_i}\lambda_i$ の対角行列

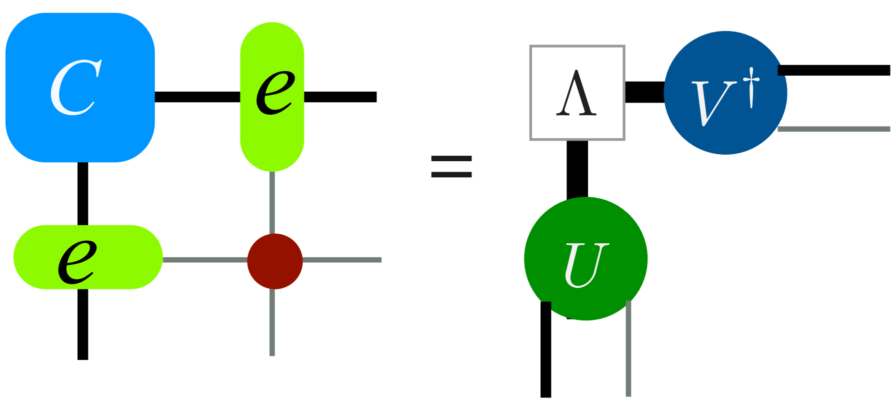


$$Z = \sum_i^{2D} \lambda_i^4 \qquad Z \simeq \sum_i^{D} \lambda_i^4$$

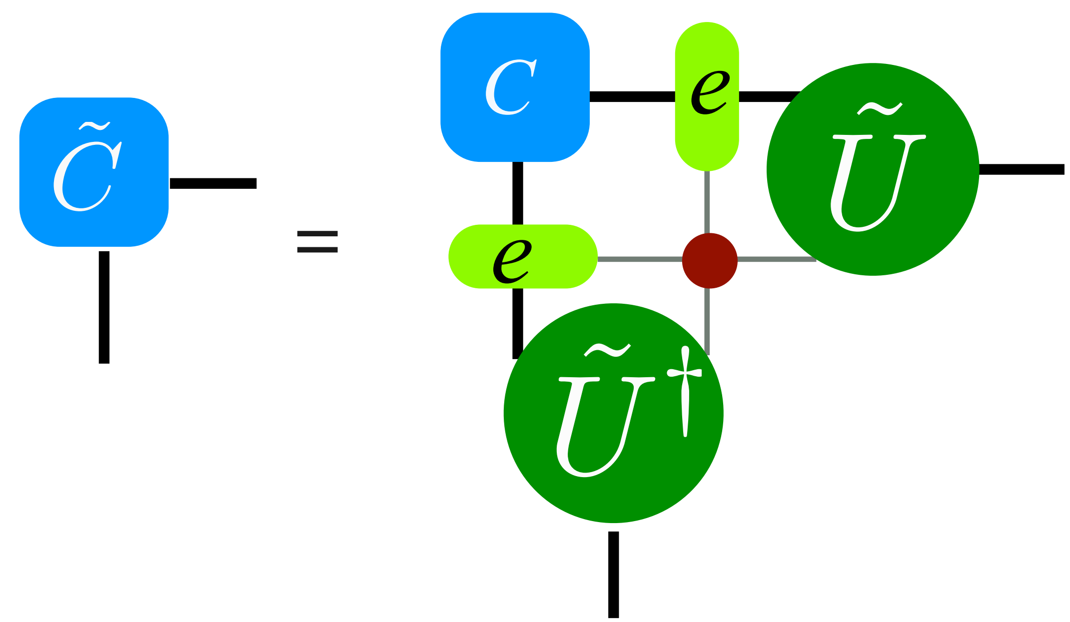
CTMRGのレシピ

くりこみ変換まとめ

1. LxL の系の角転送行列をSVD



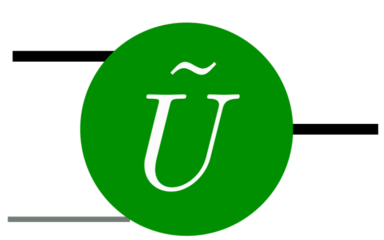
3. (L+2)×(L+2)の角転送行列を作成

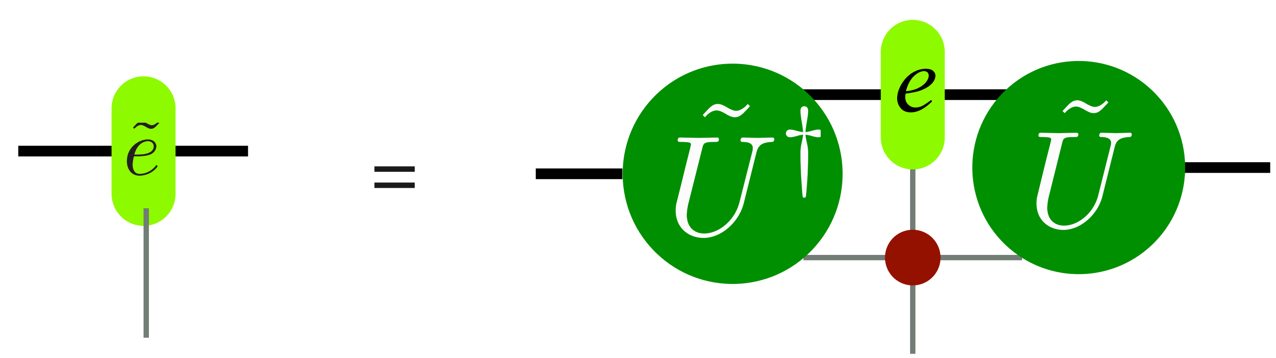


2. Projectorを作る

特異値が大きい方から

D個だけ残す





大きさLの系の分配関数が逐次求まる

参考文献

- テンソルネットワーク法解説記事
  - 数理科学 2022年2月号「特集：テンソルネットワーク法の進展」、サイエンス社
  - 数理科学 2022年11月号の一部「量子多体系とテンソルネットワーク」大久保毅、サイエンス社
  - 「テンソルネットワーク形式の進展と応用」西野友年，大久保毅，日本物理学会誌2017年10月号（https://www.jstage.jst.go.jp/article/butsuri/72/10/72_702/_article/-char/ja/）
  - 「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」大久保毅、物性研究 Vol. 7, No. 2 （物性若手夏の学校の講義テキスト）（http://mercury.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~bussei.kenkyu/archives/category/2018/vol07-2）
- テンソルネットワーク法テキスト
  - 「テンソルネットワークの基礎と応用　統計物理・量子情報・機械学習」西野友年、サイエンス社 SGCライブラリ168 (2021).
- テンソルネットワーク法による数値計算の（お勧め）Review
  - R. Orús, “A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states”, Annal. Phys. **349**, 117 (2014).