

# 格子フェルミオン系に対する ボンド重み付きテンソル繰り込み群

秋山進一郎 a), b)

a) 筑波大学 計算科学研究センター

b) 東京大学 量子ソフトウェア寄附講座(藤堂研)

Based on SA, JHEP11(2022)030

熱場の量子論とその応用@KEK

2023.8.30

# テンソルネットワーク (TN) とは?

Orús, APS Physics 1(2019)538-550

- ・ 物理系をテンソルの縮約で表現することで得られる解析手法
- ・ 演算子形式・経路積分形式いずれの格子理論でも応用可能  
Bañuls-Cichy, Rep. Prog. Phys. 83(2020)024401, Okunishi-Nishino-Ueda, J. Phys. Soc. Jap. 91(2022)062001
- ・ 従来とは異なる切り口から格子理論を調べることができる
  - ・ TN計算には符号問題がない
  - ・ TN計算は量子計算の文脈でも重要な役割を担っている
    - ・ 問題設定によっては, 量子回路を効率よくシミュレートできる  
→ いわゆる量子回路のTNシミュレーション
    - ・ 「連続自由度をどう離散化するか」は量子計算と共通の問題  
→ TNによる古典計算の知見が量子計算にも活かせる可能性  
(もちろん逆も期待できる)

Cf. Hayataさんのtalk (8/29)

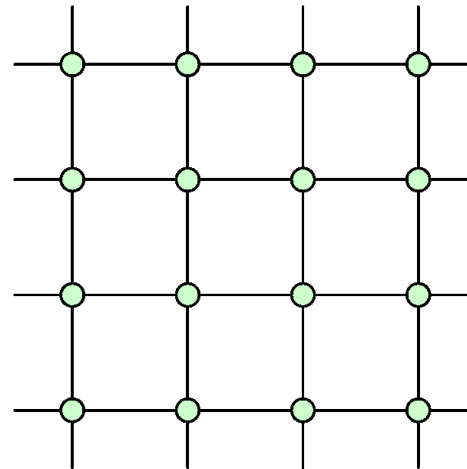
# 経路積分形式の理論での応用

Meurice+, Rev. Mod. Phys. 94(2022)025005

- ・ TNに対する実空間繰り込み群的手法(テンソル繰り込み群)に基づく

## 1. 格子理論の経路積分をTNで表現する (あとで具体例で説明)

$Z =$



## 2. 縮約を近似的に実行する

- ・ 多数のアルゴリズムが存在する
- ・ (1+1)次元のTNの場合, 演算子形式に基づくTNアルゴリズムの応用も可能
- ・ 演算子形式でのTN手法は経路積分形式でも有用 Cf. SA, arXiv:2304.01473 (To appear in PRD)

# Status of (3+1)D TN calculations

演算子形式	経路積分形式
<ul style="list-style-type: none"> <li>• QED at finite density <a href="#">Magnifico+</a></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Ising model <a href="#">SA+</a></li> <li>• Staggered fermion w/ strongly coupled U(N) <a href="#">Milde+</a></li> <li>• Complex <math>\phi^4</math> theory at finite density <a href="#">SA+</a></li> <li>• NJL model at finite density <a href="#">SA+</a></li> <li>• Real <math>\phi^4</math> theory <a href="#">SA+</a></li> <li>• <math>\mathbb{Z}_2</math> gauge-Higgs at finite density <a href="#">SA-Kuramashi</a></li> <li>• <math>\mathbb{Z}_3</math> gauge-Higgs at finite density <a href="#">SA-Kuramashi</a></li> </ul>

▪ 現状だと(3+1)次元系のTN計算では経路積分形式に基づくものが主流

▪ 個別のTNアルゴリズムに特化した並列計算手法の開発による恩恵

[SA+](#), [PoS\(LATTICE2019\)138](#), [Yamashita-Sakurai](#), [CPC278\(2022\)108423](#)

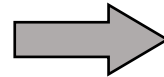
▪ 機械学習で発展してきた手法の応用やGPUによる加速も見込まれる

[Liao+](#), [PRX9\(2019\)031041](#), [Raghav+](#), [arXiv:2306.00358](#)

# TN表現の作り方（一例）

- 2次元正方格子上的古典Ising模型の場合

$$Z = \sum_{\{\sigma=\pm 1\}} \prod_{n,\mu} \exp[\beta J \sigma_n \sigma_{n+\hat{\mu}}]$$



$$Z = \text{tTr}[\prod_n T_{x_n y_n x'_n y'_n}]$$

$T_{x_n y_n x'_n y'_n}$  specifies the details of the model

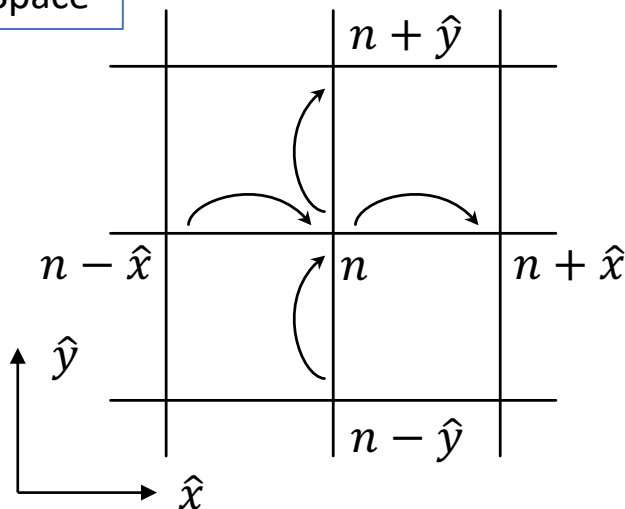
$$\exp[\beta J \sigma_n \sigma_{n+\hat{\mu}}] = \sum_{l_n} \sqrt{\lambda_{l_n}} U(\sigma_n, l_n) \sqrt{\lambda_{l_n}} U(\sigma_{n+\hat{\mu}}, l_n) = \sum_{l_n} W(\sigma_n, l_n) W(\sigma_{n+\hat{\mu}}, l_n)$$

$$W(a, b) := \sqrt{\lambda_b} U(a, b)$$

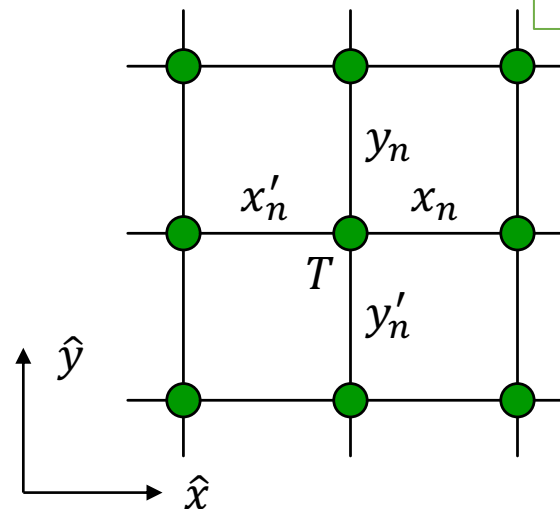
$$T_{x_n y_n x'_n y'_n} := \sum_{\sigma_n = \pm 1} W(\sigma_n, x_n) W(\sigma_n, y_n) W(\sigma_n, x'_n) W(\sigma_n, y'_n)$$

$x'_n := x_{n-\hat{x}}, y'_n := y_{n-\hat{y}}$

Real Space

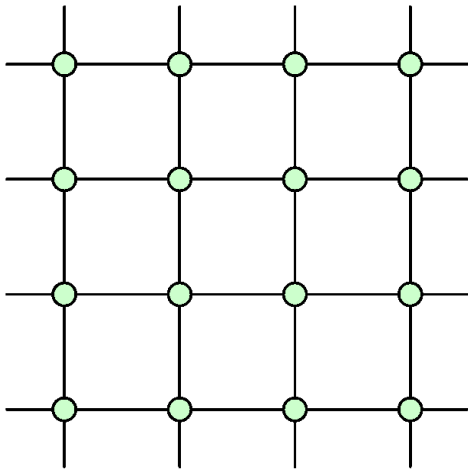


TN rep. for Z



# テンソル繰り込み群のidea

TNの縮約を厳密に  
実行するのは不可能



## 実空間繰り込み群の思想

容易に反復可能な粗視化変換を構成し  
それを何回も反復することで熱力学極限を得る

+

## 特異値分解(SVD)による情報圧縮

$$A_{ij} = \sum_k U_{ik} \sigma_k V_{jk} \approx \sum_{k=1}^D U_{ik} \sigma_k V_{jk}$$

$$w/ \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_{\min(m,n)} \geq 0$$

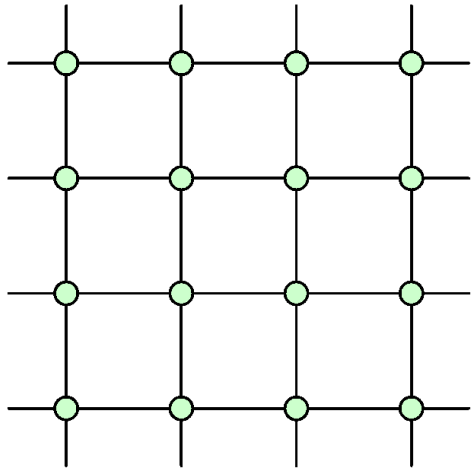
(  $A$ :  $m \times n$  matrix,  $U$ :  $m \times m$  unitary,  $V$ :  $n \times n$  unitary )

↓

TN上での実空間繰り込み群を構成できる  
→ テンソル繰り込み群(TRG)

# Levin-Nave TRG

Levin-Nave, PRL99(2007)120601

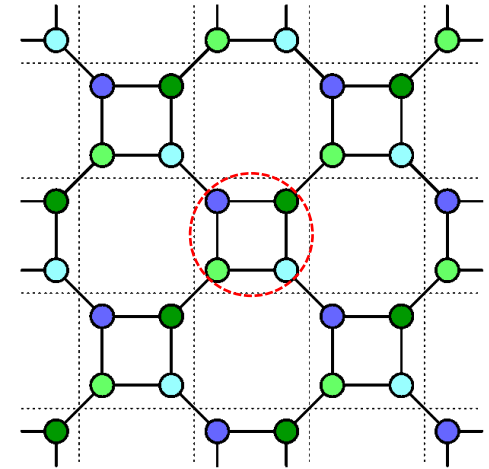


SVDで3脚テンソルを定義



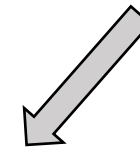
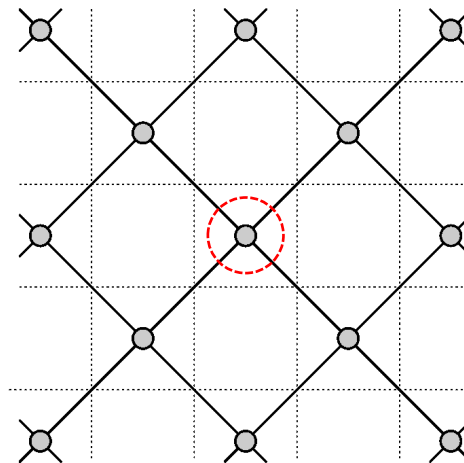
$$T_{IJ}^{(n)} \approx \sum_{\alpha=1}^D U_{I\alpha}^{(n)} \sqrt{\sigma_{\alpha}^{(n)}} \sqrt{\sigma_{\alpha}^{(n)}} V_{J\alpha}^{(n)*}$$

※  $I, J$ : 局所テンソルの脚2つを一纏めにした表記.  
格子点の偶奇に応じて纏め方が異なる.



反復

$n$ 回反復すれば,  $2^n$ 個のテンソルを近似的に縮約したことになる.  
→ 熱力学極限に匹敵する格子サイズの取り扱いが可能.



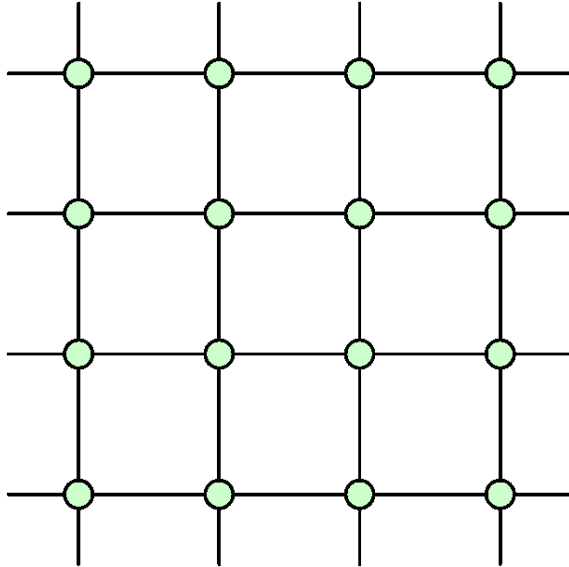
4つの3脚テンソルを縮約

# Bond-weighted TRG (BTRG)

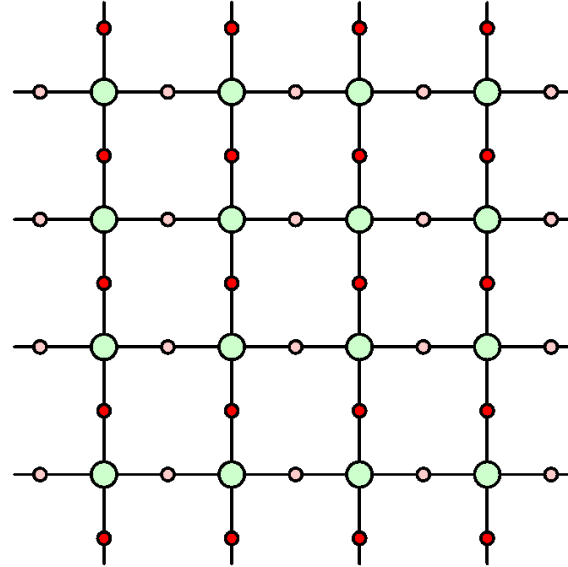
Adachi-Okubo-Todo, PRB105(2022)L060402

- ・ TNのボンド上に重率(bond weight)を導入する → 重率によるTRGの一般化
- ・ 重率を含めた粗視化変換を構成する

LN TRGの場合

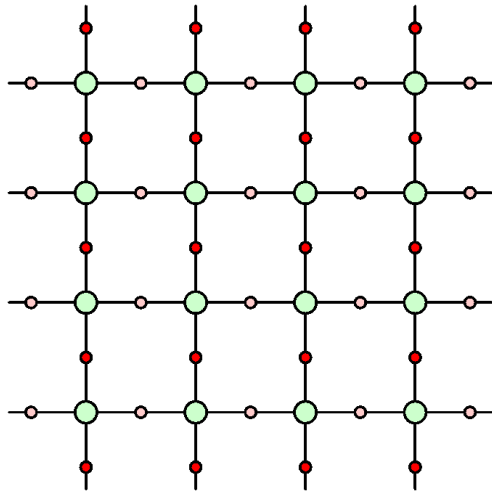


BTRGの場合





# Schematic Picture of TRG w/ bond weights



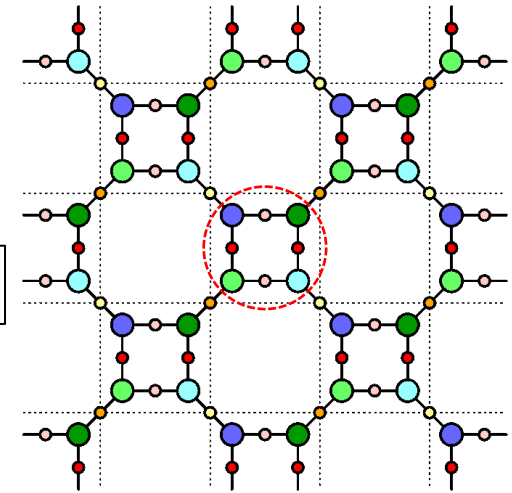
SVDで3脚テンソルと  
新しい重率を定義



$$T_{IJ}^{(n)} \approx \sum_{\alpha=1}^D U_{I\alpha}^{(n)} (\sigma_{\alpha}^{(n)})^{\frac{1-k}{2}} (\sigma_{\alpha}^{(n)})^k (\sigma_{\alpha}^{(n)})^{\frac{1-k}{2}} V_{J\alpha}^{(n)*}$$

※  $I, J$ : 局所テンソルの脚2つを一纏めにした表記.  
格子点の偶奇に応じて纏め方が異なる.

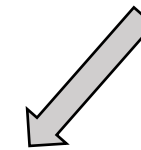
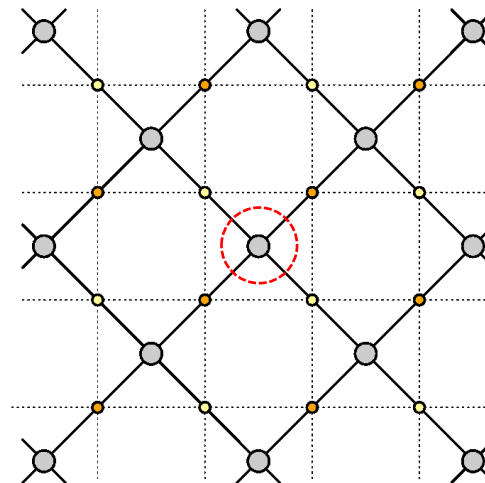
※  $k \in \mathbb{R}$ はハイパーパラメタ(後述)



※ 反復開始時の重率は単位行列とする

反復

$n$ 回反復すれば、 $2^n$ 個のテンソル  
を近似的に縮約したことになる。  
→ 熱力学極限に匹敵する格子  
サイズの取り扱いが可能.



4つの3脚テンソルと  
4つの重率を縮約

# 重率を決めるハイパーパラメタ

Adachi-Okubo-Todo, PRB105(2022)L060402

- 局所テンソルをSVDする際にハイパーパラメタ  $k \in \mathbb{R}$  を以下で導入

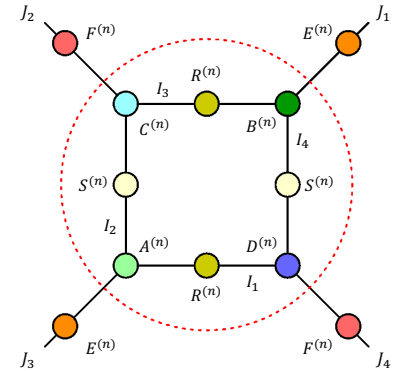
$$T_{IJ}^{(n)} \approx \sum_{\alpha=1}^D U_{I\alpha}^{(n)} \left(\sigma_{\alpha}^{(n)}\right)^{\frac{1-k}{2}} \left(\sigma_{\alpha}^{(n)}\right)^k \left(\sigma_{\alpha}^{(n)}\right)^{\frac{1-k}{2}} V_{J\alpha}^{(n)*}$$

※  $k = 0$  でLevin-Nave TRGと一致する.  $n$  はiteration number.

- $k$  の決め方: 特異値に対するpower counting

BTRGによる繰り込み  $\rightarrow T^{(n+1)} \sim \left[ \left(\sigma_{\alpha}^{(n)}\right)^{\frac{1-k}{2}} \left(\sigma_{\alpha}^{(n)}\right)^k \right]^4$

$T^{(n+1)}$  のSVD(次のBTRGステップ)  $\rightarrow T^{(n+1)} \sim \sigma_{\alpha}^{(n+1)}$



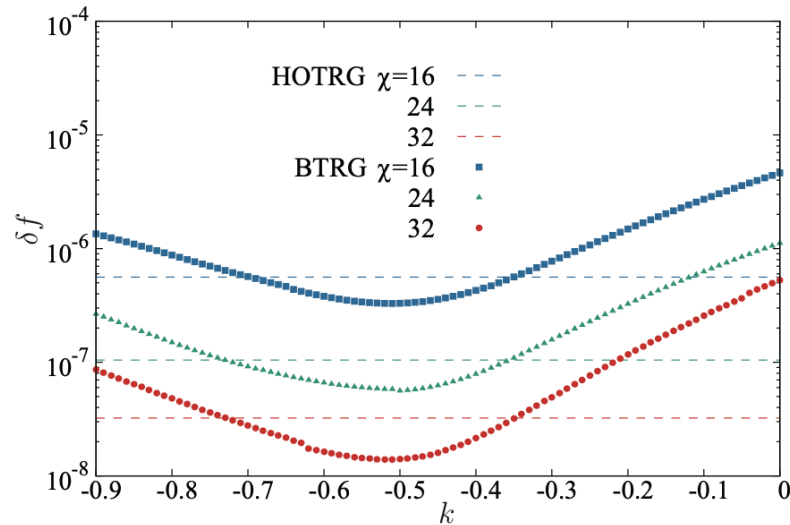
十分な回数繰り込んだ後, 特異値のpowerが一定になることを要求する

$$\left[ \left(\sigma_{\alpha}^{(n)}\right)^{\frac{1-k}{2}} \left(\sigma_{\alpha}^{(n)}\right)^k \right]^4 = \sigma_{\alpha}^{(n)} \Rightarrow \boxed{k = -0.5}$$

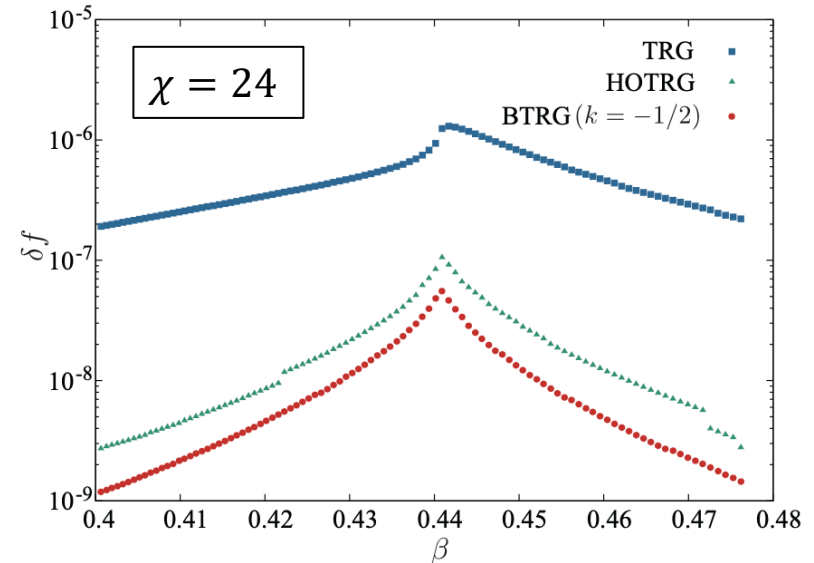
# 2次元Ising模型でのテスト

Adachi-Okubo-Todo, PRB105(2022)L060402

Relative error vs  $k$



Comparison w/ other TRGs



- 実際の数値計算からも  $k = -0.5$  が最適であることが分かる。
- 同じボンド次元で他のTRGアルゴリズムと比べてもBTRGは高精度。特に、オリジナルのLevin-Nave TRGの精度をオーダーで改善している。(両者の計算コストは同じなのでBTRGは上位互換)

# フェルミオン系への拡張

- 任意のTRGアルゴリズムはGrassmann経路積分に拡張可能
- Grassmann経路積分は以下のようなGrassmannテンソルから構成可能

SA-Kadoh, JHEP10(2021)188

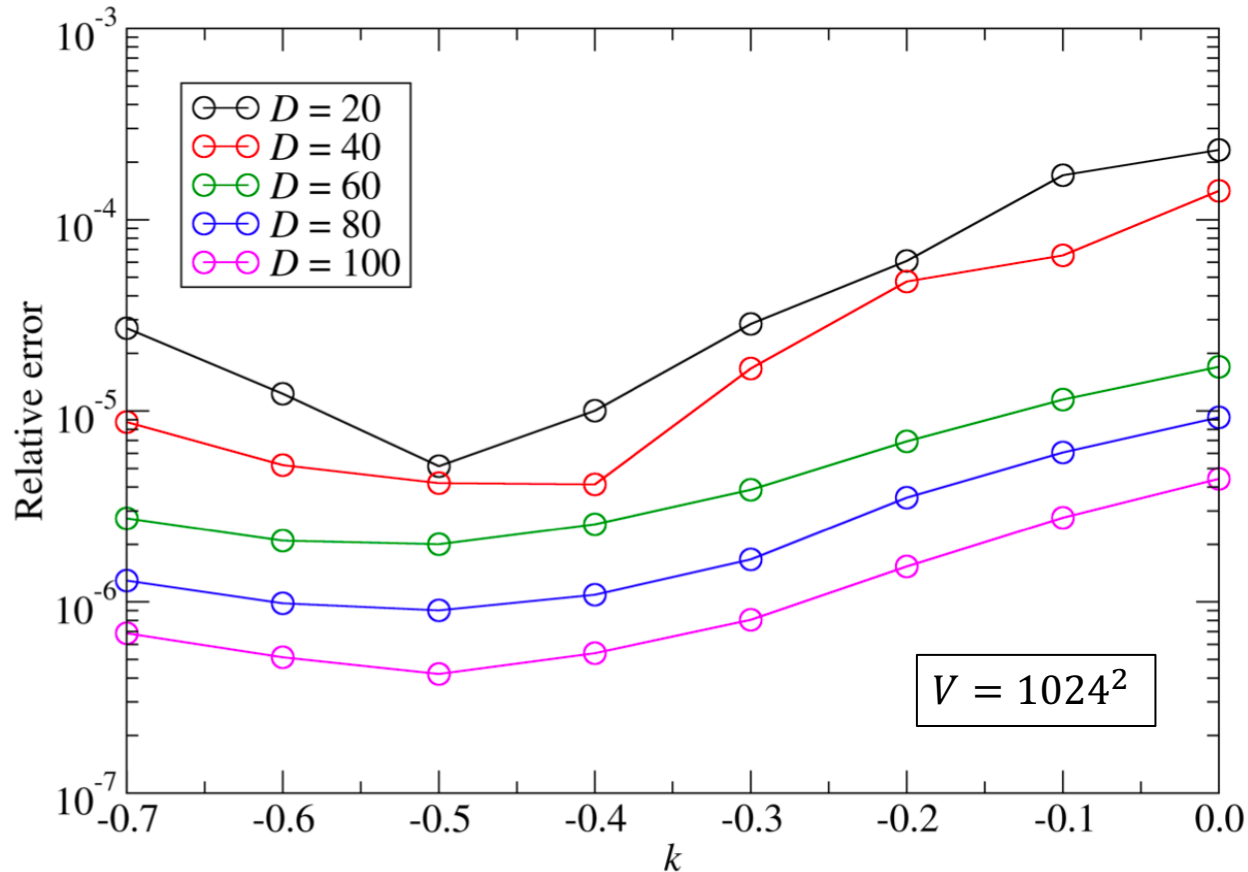
$$\mathcal{J}_{\eta_x \eta_t \bar{\eta}_x \bar{\eta}_t} = \sum_{x,t,x',t'} T_{xtx't'} \eta_x^x \eta_t^t \bar{\eta}_x^{x'} \bar{\eta}_t^{t'}$$

	テンソル	Grassmannテンソル
脚	整数値	Grassmann数
縮約	$\Sigma_i \dots$	$\int \int d\bar{\eta} d\eta e^{-\bar{\eta}\eta} \dots$
経路積分 (周期境界)	$\text{tTr}[\prod T]$	$\text{gTr}[\prod \mathcal{T}]$

- ボンド重率はフェルミオン系でも精度向上を実現するか? 最適な $k$ は?
- 以下, 2D massless free Wilson fermionを使って検証する

# 2次元自由Wilsonフェルミオンでの検証

- ・ フェルミオン系でも計算精度が向上
- ・ 最適値は $k = -0.5$  → 特異値のpower countingで最適な $k$ が決まっている



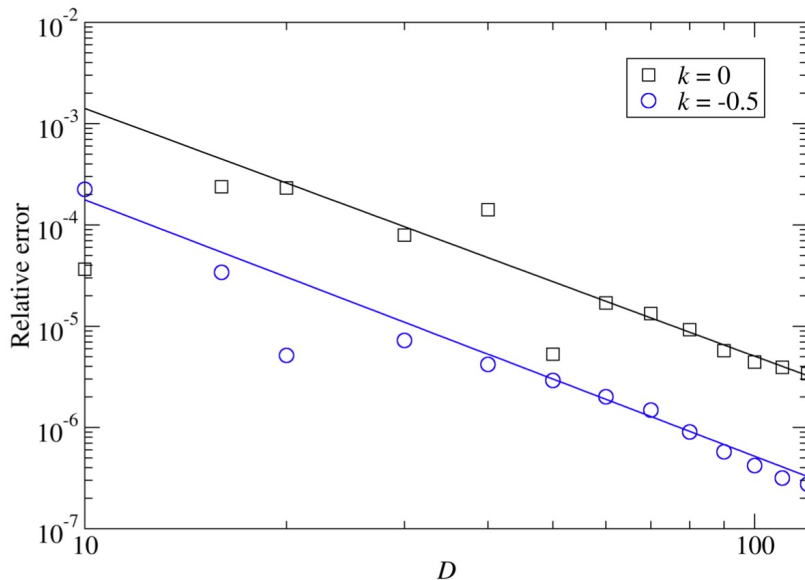
# 有限バンド次元スケーリング

- 有限バンド次元 $D$ で全系を最適化した場合(=MPSによるTN計算の場合)

$$\xi_D \sim D^\kappa \quad \text{with} \quad \kappa = \frac{6}{c \left( \sqrt{\frac{12}{c}} + 1 \right)}$$

Tagliacozzo+, PRB78(2008)024410  
Pollmann+, PRL102(2009)255701

- このscalingを仮定すると自由エネルギーは $aD^{-2\kappa}$ でscaleする



- TRG( $k = 0$ )  $\rightarrow a \approx 0.4, \kappa \approx 1.22$
- BTRG( $k = -0.5$ )  $\rightarrow a \approx 0.06, \kappa \approx 1.26$
- $c = 1 \rightarrow \kappa = 1.344 \dots$

Relative error of the free energy vs  $D$

# まとめ

- TN計算により, 従来とは異なる切り口から格子理論を調べることが可能.  
TNによる古典計算は量子計算とも互恵的な関係がある.
- TRG法を使うと格子理論の経路積分そのものを計算できる.
- ボンド重率によるTRG法の一般化により, 計算コストを一切増大させずに計算精度を向上させることができる.  
このような精度改善はスピン系だけでなくフェルミオン系でも可能.
- Levin-Nave TRG以外のアルゴリズムでもボンド重率による精度改善が期待できるかもしれない.
- Grassmann化したBTRGのサンプルコードをGitHubで公開中.  
git cloneして遊んでみてください. <https://github.com/akiyama-es/Grassmann-BTRG>