## テンソルネットワーク法入門 (実習)

東大理 大久保 毅

## 実習の流れ

- ・実習の準備
  - ・ 講義のgithubサイトを開く
  - ・ ノートブックの使い方練習
- ・ 実習 0:モンテカルロシミュレーション
  - ・ Snap shotの観察
  - ・ 正方格子イジング模型の物理量計算
- ・ 実習1:テンソル繰り込み
  - ・ 正方格子イジング模型の自由エネルギー計算
  - ・ 有限系でのモンテカルロ法との比較
- ・ 実習2: 行列積状態
  - ・ 無限系の正方格子イジング模型の自由エネルギー計算
  - ・ テンソル繰り込みとの比較
- ・全体のまとめ

## 実習の準備1:環境の準備

- ・ブラウザで講義のgithubに行く
  - https://github.com/TsuyoshiOkubo/Introduction-to-Tensor-Network
- このスライドのダウンロード
  - ・ 上記サイトから「計算物理春の学校2023:テンソルネットワーク 法入門(実習).pdf」というファイルをダウンロード

# 実習の準備2:ノートブックのgoogle colabでの実行

- チュートリアルファイルの準備
  - ・ github の中身
    - https://github.com/TsuyoshiOkubo/Introduction-to-Tensor-Network
  - Exercise フォルダの中身
    - Ex0-1.ipynb, Ex0-2.ipynb, Ex0-3.ipynb
    - Ex1-1.ipynb, Ex1-2.ipynb, Ex1-3.ipynb
    - Ex2-1.ipynb, Ex2-2.ipynb
    - Ising\_lib.py
    - TRG\_lib.py
    - classical\_iTEBD\_lib.py
    - ・ exact\_output/ コ 厳密解の結果
    - ・ outputs/ 実行済み計算結果(の一部)

実習ファイルの本体

アルゴリズムのモジュール

## 実習の基本的な流れ

- 1. Ex\*.ipynb をgoogle colabで開く
  - ・「ドライブにコピー」
- 2. Ex\*.ipynbをそのまま実行して結果を確認
- 3. インプットなどを変えて、結果の変化を確認
- \*慣れている方はlocal の環境で実行してもOKです。
  - numpy
  - 必要なモジュール: · scipy
    - numba

実習 0: (比較のため)

モンテカルロシミュレーション

#### MCMCの実習:平衡シミュレーション

正方格子イジング模型のシミュレーション

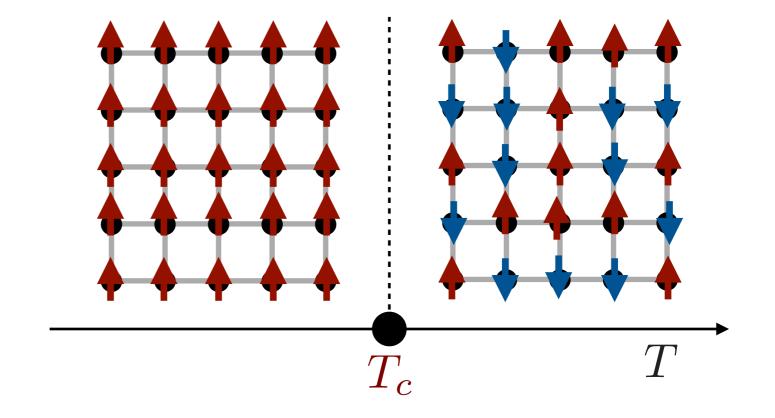
$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$$

T=T<sub>c</sub>で連続相転移

$$T_c/J = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})}$$
  
= 2.26918531...

T>T<sub>c</sub>: 常磁性相

• *T<Tc*:強磁性相

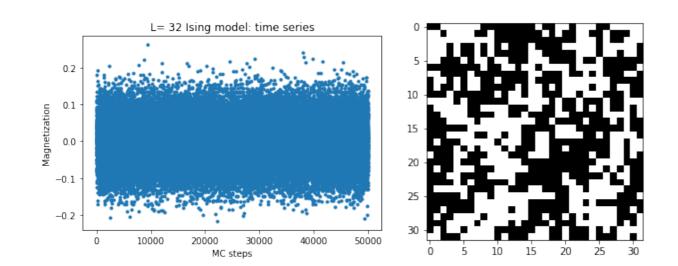


・ 古典モンテカルロ法 (メトロポリス法) のシミュレーションを 実行して、平衡状態の物理量、時間変化、スピン配置をみる

### Ex0-1:イジング模型のシミュレーション

- 1. Google colabで*Ex0-1.ipynb*を開く
  - ・ これをクリック\_
- 2. 「ドライブにコピー」

- 3. ランタイム/全てのセルを実行
  - 30~40秒くらいで終わるはず
  - 以下の図などが出力されていればOK



実習0 モンテカルロ法(比較のため)

- snapshotの観察: Ex0-1.ipynb
- 物理量の計算:Ex0-2.ipynb Open in Colab
- (optional) 有限サイズスケーリング:Ex0-3.ipynb <sup>CO Open in Colab</sup>

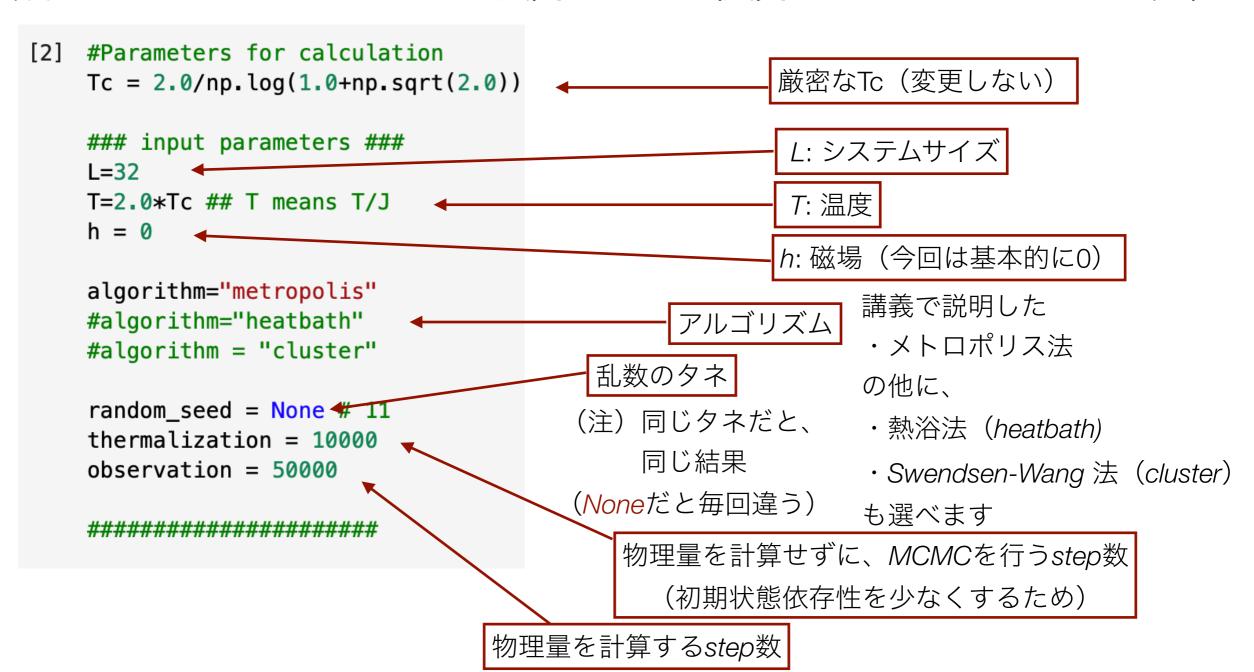


Exercise 0-1: Monte Calro simulation of th

## Ex0-1.ipynb@input

#### MCMCで正方格子イジング模型の物理量を計算します

2番目のセルでインプットパラメタを変更できます(変更したら"すべてのセルを実行")

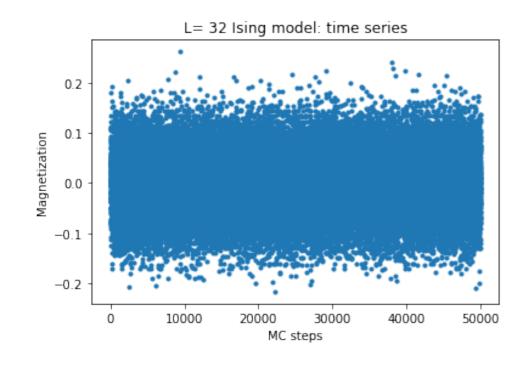


## Ex0-1.ipynbのoutput

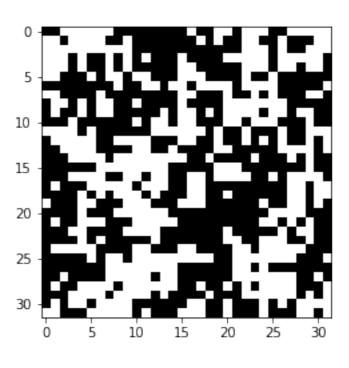
[Outputs with errors estimated by Jackknife method]
 T = 4.538370628426044
 Energy = -0.47929273437500003 +- 0.0003877741513014861
 Energy^2 = 0.2322261947631836 +- 0.00037493470656671236
 Magnetization = -4.5156250000000064e-05 +- 0.00029356012661862124
 Magnetization^2 = 0.003279116973876952 +- 1.9936339089795468e-05
 Magnetization^4 = 3.2012081598513764e-05 +- 4.408930118636691e-07
 Specific heat = 0.12452318130922689 +- 0.0009802312918727957
 Susceptibility = 0.7398725349177852 +- 0.0044982688500764065
 Connected Susceptibility = 0.2671902989849985 +- 0.0019568959196030276
 Binder ratio = 2.9771448026203218 +- 0.021618961306956737

物理量と誤差(Jackknife法)

#### 物理量のダイナミクス



#### 最終状態のsnapshot



### 実習0-1

- ・ 温度Tを  $T > T_c$ ,  $T = T_c$ ,  $T < T_c$  などで変えてみて、ダイナミクス、スナップショットの違いを観測する
  - ・ 物理量によってダイナミクスが違う場合 (例:低温の磁化)
- ・ (optional) 温度を固定してLを変えてみて、ダイナミクスの違いを 観測する
  - ・特に $T=T_c$  近傍で、Lの増大でダイナミクスが遅くなるはず
  - ・ ダイナミクスが"ゆっくり"になると物理量の誤差が大きくなる

## ExO-2:温度依存性の解析

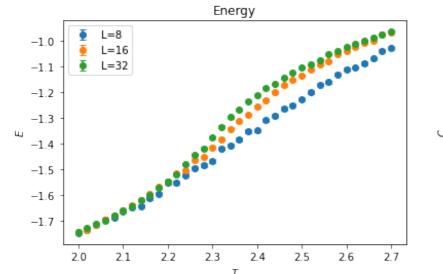
- 1. Google colabでEx0-1.ipynbを開く
  - ・これをクリック
- 2. 「ドライブにコピー」

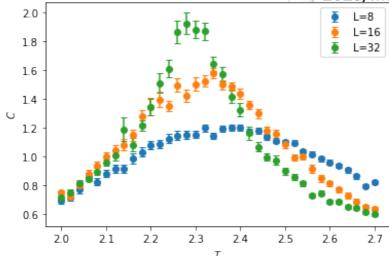
- 3. ランタイム/全てのセルを実行
  - ・ 1分程で終わるはず
  - ・以下の図などが出力されていればOK

#### 実習0 モンテカル口法(比較のため)

- snapshotの観察: Ex0-1.ipynb Open in Colab
- 物理量の計算:Ex0-2.ipynb Open in Colab
- (optional) 有限サイズスケーリング:Ex0-3.ipynb <sup>CO Open in Colab</sup>





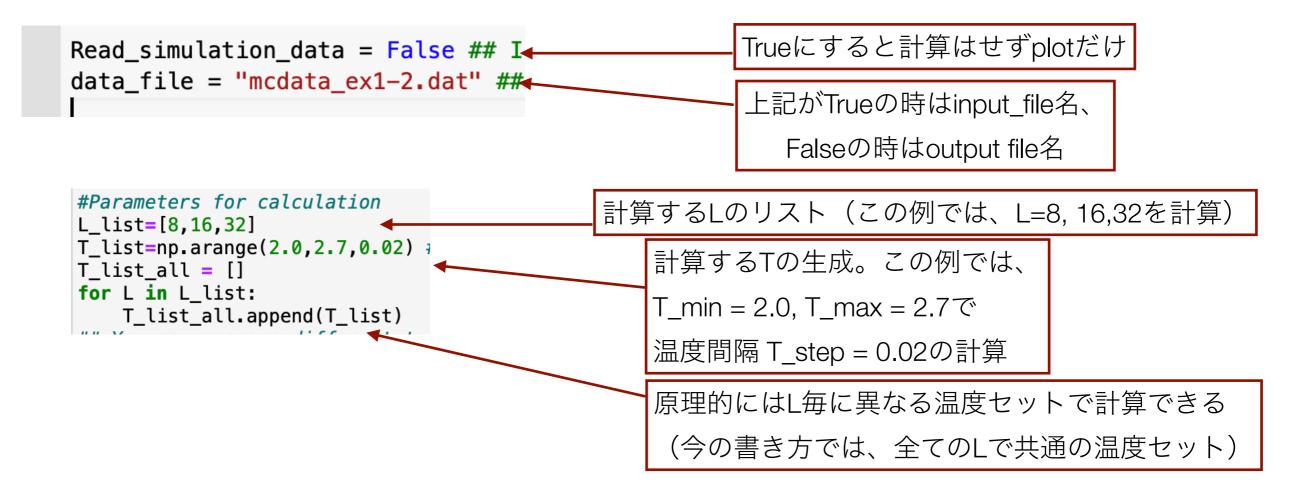


## Ex0-2.ipynbのinput

#### MCMCで正方格子イジング模型の物理量を計算します

2番目のセルでインプットパラメタを変更できます(変更したら"すべてのセルを実行")

#### Ex0-1.ipynbから追加・変更があった部分



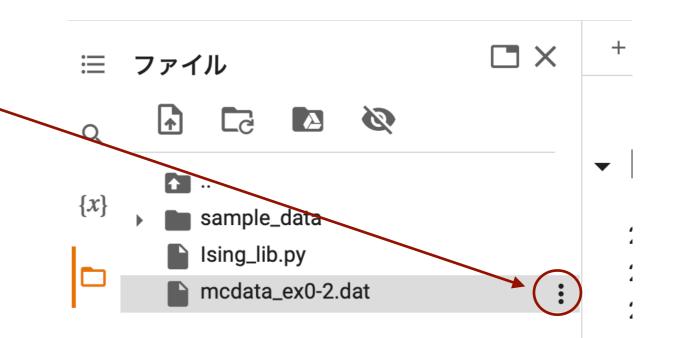
### 実行結果のダウンロード

Google colabのセッションが終了するとdata\_fileなどは消えます。



 これをクリックして ダウンロードを選ぶ

\*後でテンソル繰り込み群との比較に 使います



## Ex0-2.ipynbのoutput

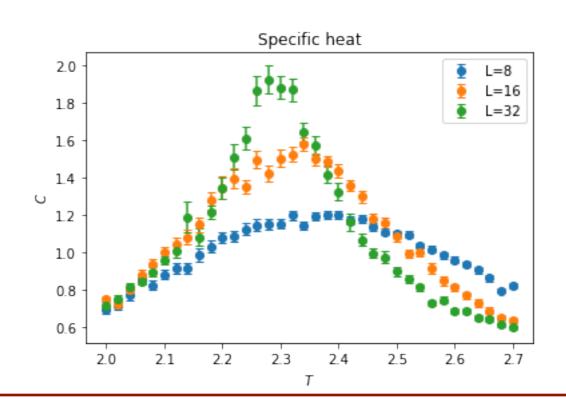
#### 物理量の温度依存性:

- ・エネルギー
- 比熱
- ・磁化の2乗
- 磁化率

#### 

#### 見どころ:

- ・ 物理量は誤差を含んでいる
  - エラーバーの大きさは、温度、サイズ、物理量に依存
- ・ 比熱や磁化率は $T_c$ 近傍にピーク
  - ・Lの増大で真の $T_c$ に近づく



#### 実習0-2

- モンテカルロステップ(observation)を増減させてエラーバーの変化を見よう
  - ・ モンテカルロステップを増やすとエラーバーはちゃんと減る?
    - ・ (初期)observation = 10000 → 40000 に変更してみると?
- ・ リストにL=64 を追加して振る舞いを見よう
  - ・ 計算時間はどうなるか? (途中のセルに時間が出力されてる)

```
CPU times: user 1min 19s, sys: 119 ms, total: 1min 19s Wall time: 1min 19s
```

- ・ observationを固定したままだとL=64のエラーバーどうなる?
  - \*この結果を保存しておくこと推奨

実習1:

テンソルネットワーク繰り込み群

### テンソルネットワーク繰り込み群

- ・ 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
- ・ アルゴリズムは「特異値分解」と「テンソルの縮約」を繰り返すだけの 単純なものであり、例えば、pythonの数値計算ライブラリNumPyを用い れば、非常に簡単に実装できる
- ・ 種々の格子模型に適用可能
  - 分配関数を表すテンソルさえ準備すれば、アルゴリズム(プログラム)は種々の模型に適用可能
  - ・ 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

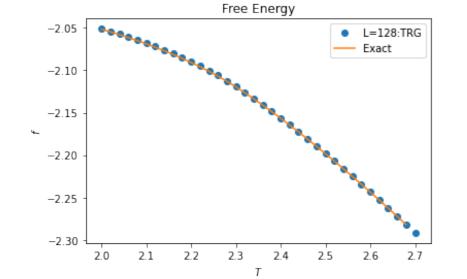
### TRGの実習内容

- ・ 正方格子イジング模型のシミュレーション
  - 1. 自由エネルギーの計算と厳密解との比較
  - 2. 差分による、比熱、エネルギーの計算
  - 3. 実習 0 で行ったモンテカルロシミュレーションと の比較

### Ex1-1:TRGの実行と厳密解との比較

- 1. Google colabでEx1-1.ipynbを開く
  - ・これをクリック
- 2. 「ドライブにコピー」

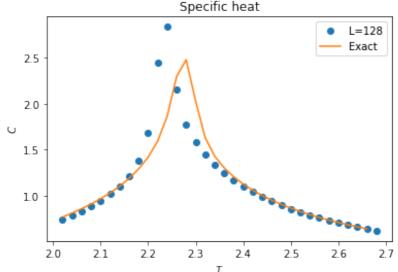
- 3. ランタイム/全てのセルを実行
  - ・ 数十秒で終わるはず
  - ・以下の図などが出力されていればOK



#### 実習1 テンソル繰り込み群

- ◆ 有限系でのテンソル繰り込み群の計算1:Ex1-1.ipynb Open in Colab
- 有限系でのテンソル繰り込み群の計算2: Ex1-2.ipynb Open in Colab
- モンテカルロ法との比較:Ex1-3.ipynb Open in Colab

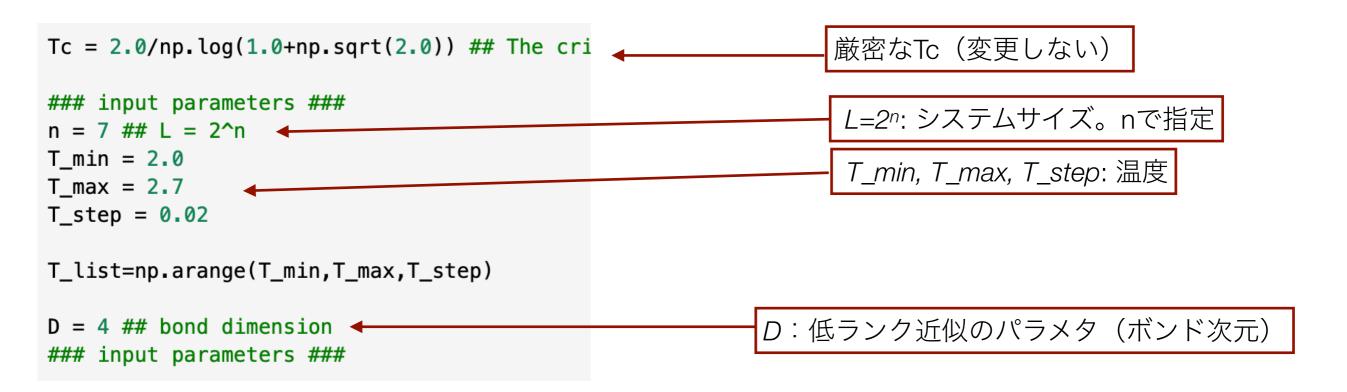




## Ex1-1.ipynbのinput

#### TRGで正方格子イジング模型の物理量を計算します

2番目のセルでインプットパラメタを変更できます(変更したら"すべてのセルを実行")



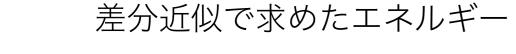
## Ex1-1.ipynbのoutput

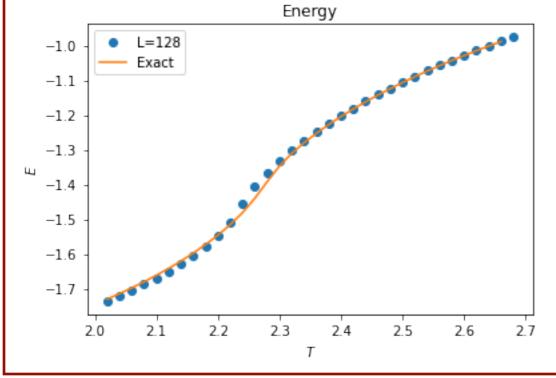
#### TRGによる自由エネルギー

```
T, free_energy_density = 2.0 -2.0511359452135833
T, free_energy_density = 2.02 -2.0542110601942833
T, free_energy_density = 2.04 -2.0574326609027627
T, free_energy_density = 2.06 -2.0608076301385387
T, free_energy_density = 2.08 -2.0643436128975106
T, free_energy_density = 2.1 -2.068049238287201
```

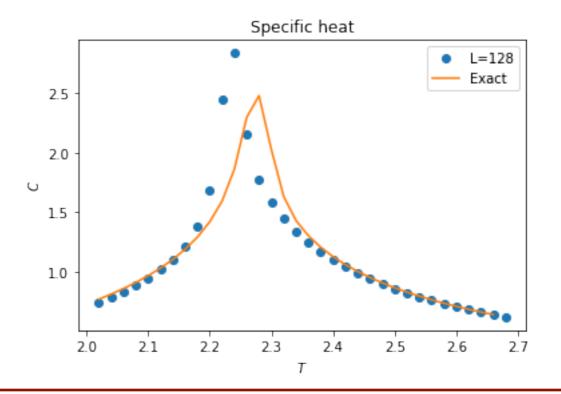
\*厳密解は藤堂先生のexact ライブ ラリを使って計算しました。

https://github.com/todo-group/exact





#### 差分近似で求めた比熱



#### 実習1-1

- ・  $L(=2^n)$  を変えてみて、計算時間の変化を確認する
  - ・nが1増えるとLは2倍になるが、計算時間はどう変わるか?
- · Dを変えて、計算時間の変化を確認する
  - ・ (補足情報)TRGにおけるSVDとテンソルの縮約の計算コストは $O(D^6)$
- · Dを変えて、物理量の精度を確認する
  - ・ 自由エネルギーは数字を比べると分かりやすい
  - ・ 物理量はグラフで比べるとよい
    - ・ 物理量は差分近似で求めている。この近似精度はT\_stepを小さくすることで上げることができる
    - ・厳密解との差は温度によってどう変わっているか?
  - Dを固定したままLを変えるとどうなるか?

### Ex1-2:複数サイズでのTRGの実行

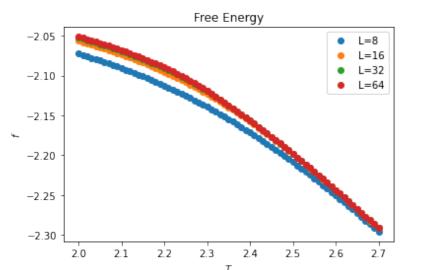
- 1. Google colabでEx1-2.ipynbを開く
  - ・これをクリック
- 2. 「ドライブにコピー」

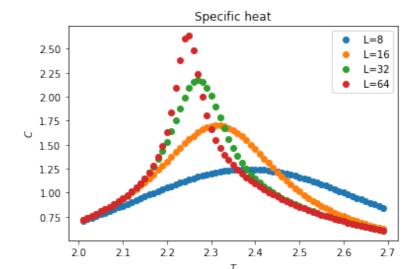
- 3. ランタイム/全てのセルを実行
  - ・ 数十秒で終わるはず
  - ・以下の図などが出力されていればOK

#### 実習1 テンソル繰り込み群

- 有限系でのテンソル繰り込み群の計算1: Ex1-1.ipynb Open in Colab
- 有限系でのテンソル繰り込み群の計算2:Ex1-2.ipyn Open in Colab
- モンテカルロ法との比較:Ex1-3.ipynb Open in Colab





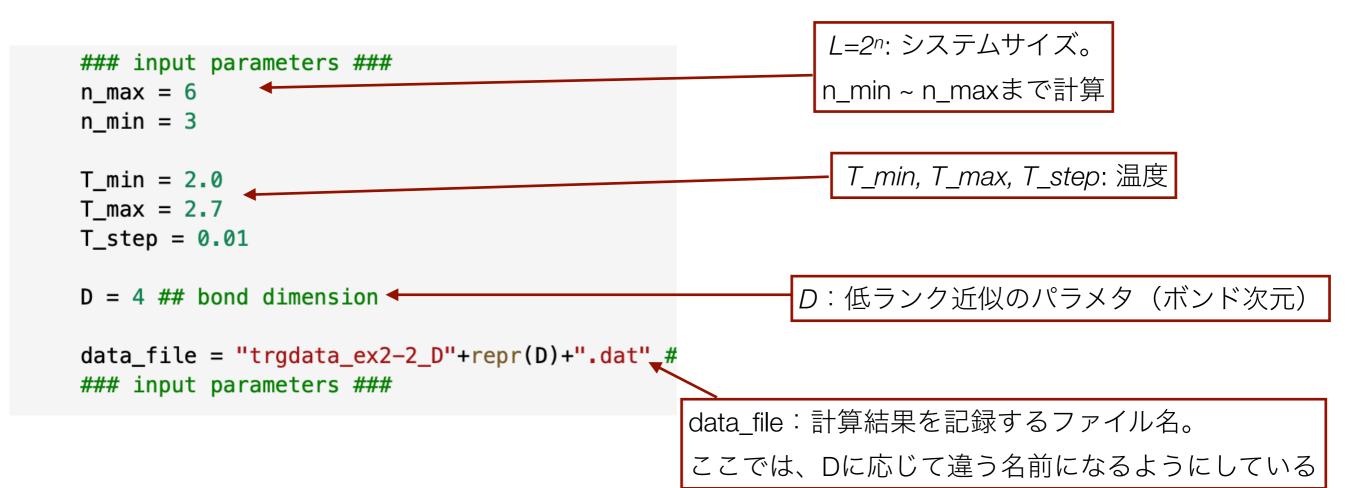


\*次の実習で使うので、実行結果 (trgdata\_ex1-2\_D4.dat) をダウンロードしておいてください

## Ex1-2.ipynbのinput

#### TRGで正方格子イジング模型の物理量を計算します

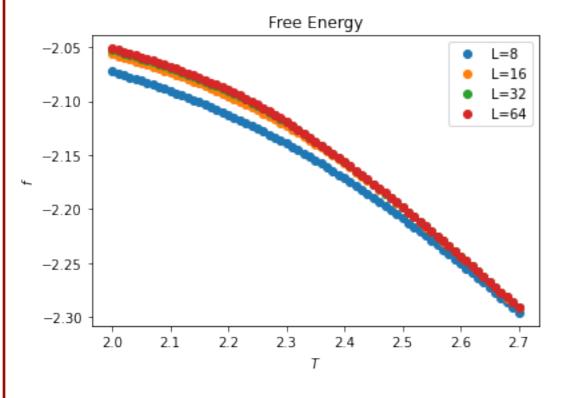
2番目のセルでインプットパラメタを変更できます(変更したら"すべてのセルを実行")



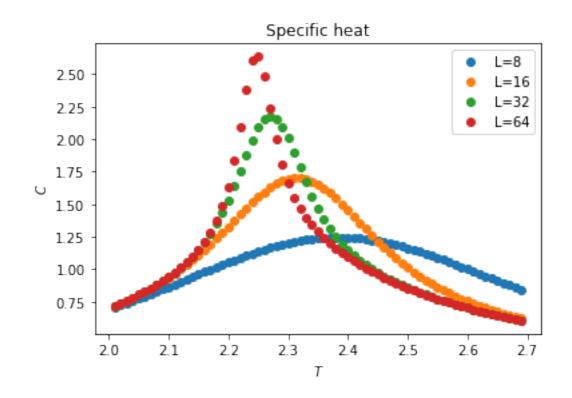
\*google colabのセッションが終了するとdata\_fileなどは消えます。 必要であれば、適宜ダウンロードしてください

## Ex1-2.ipynbのoutput

#### 差分近似で求めたエネルギー



#### 差分近似で求めた比熱



#### 見どころ:

- ・ 物理量には統計誤差はなく、データは滑らか
  - · Dによっては、自由エネルギーの不連続性に起因する異常が出る場合もある

# 実習1-2(1-1でやっていればやらなくても良い)

- ・ Dや $T_{step}$ を変えて、物理量の変化を確認する
- ・大きなLの計算も行い、物理量のL依存性を確認する
  - 大きなLで比熱は発散するだろうか?

#### Ex1-3:モンテカルロ法とTRGの比較

- 1. Google colabでEx1-2.ipynbを開く
  - · これをクリック ·
- 2. 「ドライブにコピー」

 ファイルのアップロード これをクリックして へ 保存しておいた

mc\_ex0-2.dat ≥ trg\_ex1-2\_D4.dat を

アップロード

(実はuploadしなくても、githubから 事前に計算した結果を自動でダウンロード してくれると思います。)

#### 実習1 テンソル繰り込み群

{*X*}

- 有限系でのテンソル繰り込み群の計算1:Ex1-1.ipynb <sup>CO Open in Colab</sup>
- ◆ 有限系でのテンソル繰り込み群の計算2:Ex1-2.ipynb <sup>©</sup> Open in Colab
- モンテカルロ法との比較:Ex1-3.ipynb Open in Colab

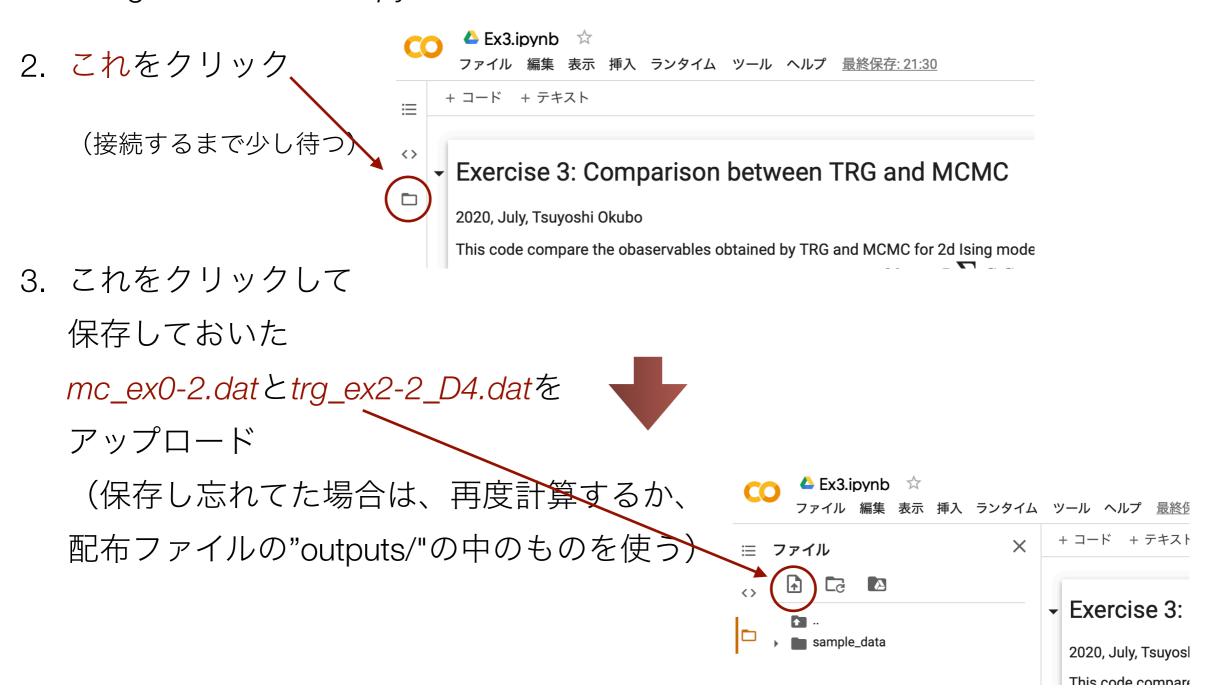


2020, July, Tsuyoshi Okubo



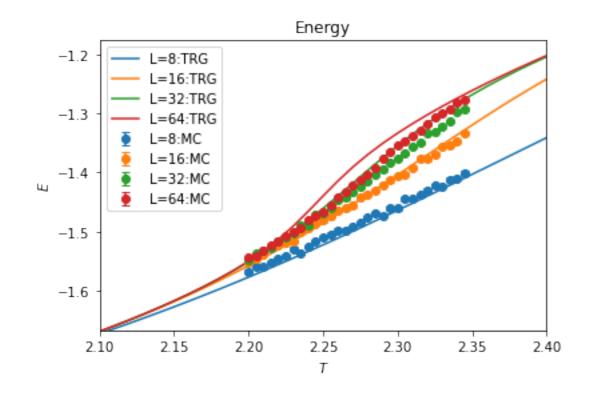
#### Ex1-3:モンテカルロ法とTRGの比較

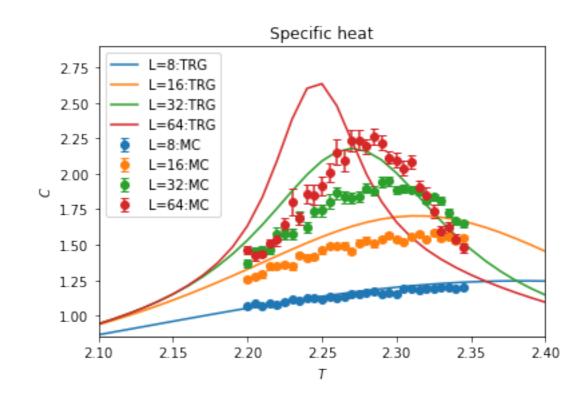
1. Google colabでEx1-3.ipynbを開く



#### Ex1-3:モンテカルロ法とTRGの比較

- 4. 上部メニューから"ランタイム/すべてのセルを実行"を選ぶ
  - すぐに終わるはず
  - ・ 下の方までスクロールして、以下の図などが出力されていればOK





## Ex1-3.ipynbのinput

#### モンテカルロ法とTRG結果を読みこんでプロットします

2番目のセルでインプットパラメタを変更できます(変更したら"すべてのセルを実行")



(注)

モンテカルロ法とTRGで、同じLが 計算されていることを仮定しています。 Lのセットがずれていると、プロットした際に、

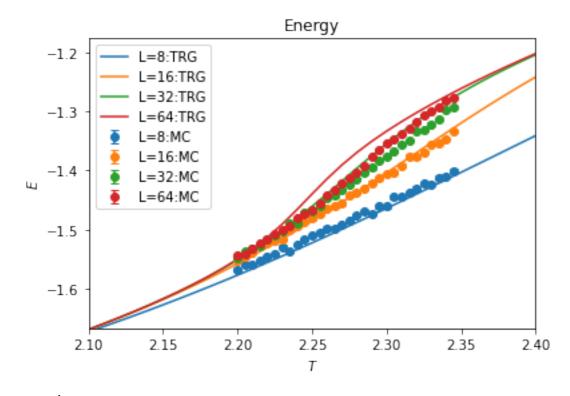
- ・凡例が正しくなくなる
- ・異なるLが同じ色になる

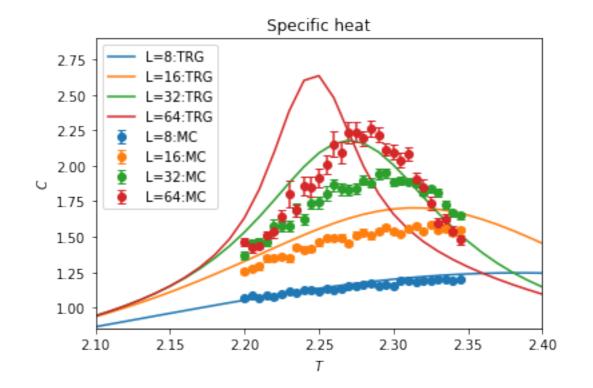
などの不具合が生じます。

温度範囲、刻みは異なっていて問題ありません。

## Ex1-3.ipynboutput

モンテカルロ法とTRGによって得られたエネルギー・比熱を同時プロット





#### 見どころ:

・ モンテカルロ法とTRGの結果、L, Dによってはズレが大きい場合がある

### 実習3

- ・ 以前のEx1-2.ipynbや
  - Ex2-2.ipynbでパラメタを変えて実行した結果をプロットしてみよう
  - ・ 計算結果をアップロードして、読み込むファイル名を適切に変更して実行 すればよい。
  - ・ モンテカルロ法とTRGのズレは、計算のパラメタによってどう変わるだろうか?
    - ・ TRGには系統誤差が、モンテカルロ法には統計誤差があることに注意

実習2:

行列積状態法

## 行列積状態法

- ・ ベクトル (テンソル) を行列の積で分解して近似する表現方法
  - 行列積状態 (MPS) 、tensor train decomposition
- ・ 分配関数のテンソルネットワーク表現の縮約において、転送行列 の固有ベクトルを計算する際に利用可能
  - · 今回は特に、iMPSを用いて、無限系の計算を行う
- ・ 対応するMPSの計算は、逐次的に転送行列をかけていけば良い
  - ・ 転送行列をかける計算は、iTEBDで効率的に近似できる。

## 行列積状態の実習内容

- ・ 無限系の正方格子イジング模型のシミュレーション
  - 1. 自由エネルギー(と磁化)の計算と厳密解との比較
  - 2. テンソル繰り込み群との比較

## Ex2-1: 行列積状態計算の実行と厳密解との比較

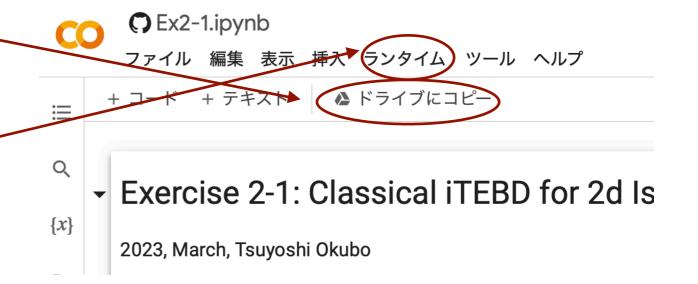
- 1. Google colabで*Ex2-1.ipynb*を開く
- 実習2 行列状態法

・これをクリック

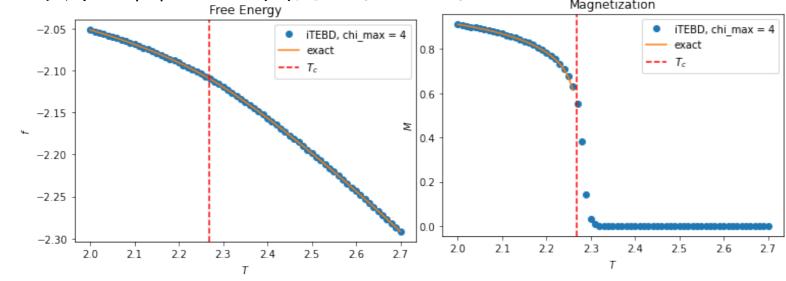
- 無限系でのiTEBDによる計算:Ex2-1.ipynb Open in Colab
- ・ 行列積状態法とテンソル繰り込み群との比較:Ex2-2.ipynb <sup>CO Open in Colab</sup>

2. 「ドライブにコピー」

- 3. ランタイム/全てのセルを実行
  - ・ 2分くらいで終わるはず



・ 以下の図などが出力されていればOK



## Ex2-1.ipynbのinput

#### iTEBDで無限系の正方格子イジング模型の物理量を計算します

2番目のセルでインプットパラメタを変更できます(変更したら"すべてのセルを実行")

```
Tc = 2.0/np.log(1.0+np.sqrt(2.0)) ## The critical temporary
T_min = 2.0
T_max = 2.7
T_step = 0.01

chi_max = 4 ## bond dimension for iTEBD
max_itr = 200 ## maxmun number of iteration for iTEBD
seed = 13 ## seed for random number generator used for

data_file = "iTEBDdata_ex2-1_chi"+repr(chi_max)+".dat"
### input parameters ###

T_list=np.arange(T_min,T_max,T_step)
```

厳密なTc(変更しない)

T\_min, T\_max, T\_step: 温度

*chi\_max*:低ランク近似のパラメタ (ボンド次元)

max itr: 転送行列を最大何回かけるか

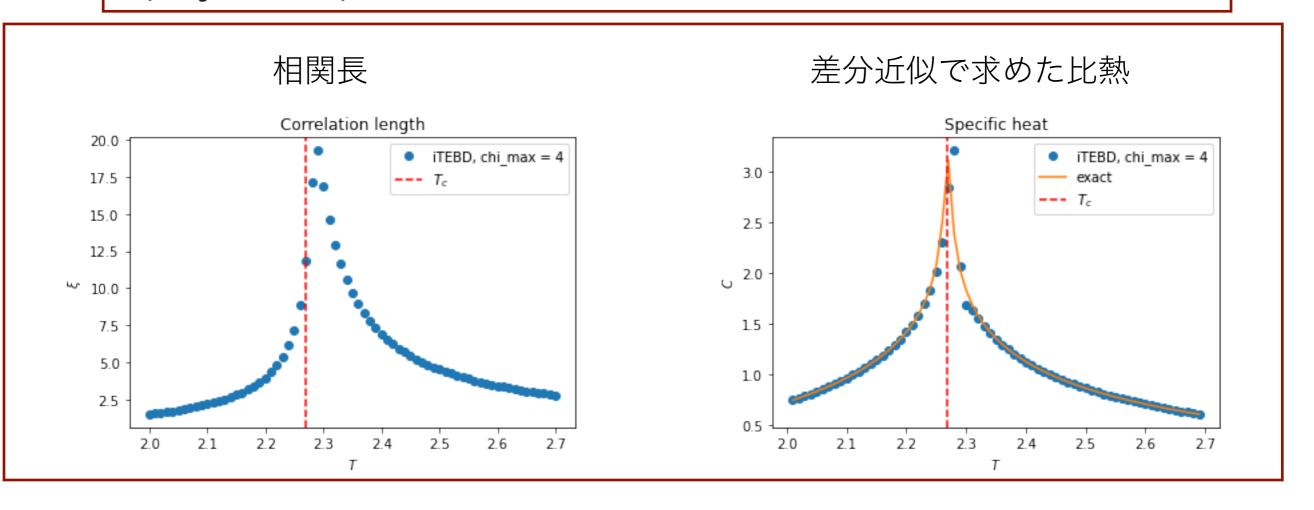
seed:iMPSの初期テンソルを作る乱数のタネ

## Ex2-1.ipynbのoutput

#### iTEBDによる自由エネルギー、磁化、相関長

```
## calculation has finised at 45 steps
```

- T, free\_energy\_density, exact value = 2.0 2.0515856173269604 2.051585625389835
- T, magnetization, exact value = 2.0 0.9113203665311507 0.911319377877496
- ## calculate correlation length
- T, correlation lenght 2.0 1.53226208078651
- ## calculation has finised at 47 steps
- T, free\_energy\_density, exact value = 2.01 -2.053133972654274 -2.053133982646481
- T, magnetization, exact value = 2.01 0.9079491801051529 0.9079479211094439



#### 実習2-1

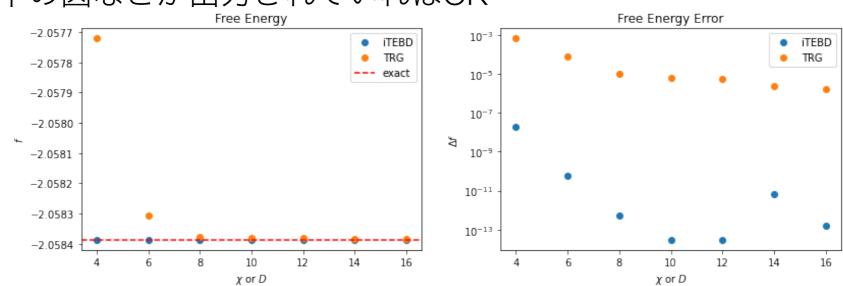
- ・ chi\_maxを変えて、計算時間の変化を確認する
  - ・ (補足情報)iTEBDにおけるSVDとテンソルの縮約の計算コストは $O(\chi^3)$
  - ・(補足情報)計算が収束するまでの回数は温度に依存する
- *chi\_max*を変えて、物理量の精度を確認する
  - ・ 磁化の立ち上がりの位置と厳密なTcとの関係
  - ・ Tc近傍の相関長の大きさ

•

### Ex2-2:行列積状態とTRGの比較

- 1. Google colabでEx2-1.ipynbを開く 実習2行列状態法
  - ・これをクリック
- 2. 「ドライブにコピー」

- 3. ランタイム/全てのセルを実行
  - ・ 1分くらいで終わるはず
  - ・ 以下の図などが出力されていればOK





無限系でのiTEBDによる計算: Ex2-1.ipynb

● 行列積状態法とテンソル繰り込み群との比較: Ex2-2.ipyn を

Open in Colab

Open in Colab

## Ex2-2.ipynb@input

#### iTEBDで無限系の正方格子イジング模型の物理量を計算します

2番目のセルでインプットパラメタを変更できます(変更したら"すべてのセルを実行")

```
Tc = 2.0/np.log(1.0+np.sqrt(2.0)) ## The critical
                                                      厳密なTc(変更しない)
T = 0.9 * Tc ## Temperature ←
                                                                T:温度
### for iTEBD ###
chi_max_list = <del>[4, 6, 8, 10, 12, 14, 16] ## bond di</del>
                                                        chi max list:iTEBDのボンド次元リスト
max_itr = 200 ## maxmun number of iteration for iTE
seed = 13 ## seed for random number generator used
                                                         max itr:転送行列を最大何回かけるか
### for TRG ###
                                                    seed:iMPSの初期テンソルを作る乱数のタネ
n = 20 ## L = 2^n Note that n must be sufficiently
D_list = [4, 6, 8, 10, 12, 14, 16] ## bond dimensic
                                                        L=2<sup>n</sup>: システムサイズ。nで指定
L = 2**n
TRG_step = 2*n -1
                                                        *無限系と比較するので大きくする
## output files
                                                       D_list:TRGのボンド次元リスト
data file iTEBD = "iTEBDdata ex2-2.dat" ## Simulati
data_file = "trgdata_ex2-2_n"+repr(n)+".dat" ## Sin
```

## Ex2-2.ipynbのoutput

#### iTEBDによる自由エネルギー、磁化、相関長

## calculation has finised at 53 steps

- T, free\_energy\_density, exact value = 2.04226678279172 -2.058386743887583 -2.0583867640251055
- T, magnetization, exact value = 2.04226678279172 -0.895940335470425 0.8959375370799653
- ## calculate correlation length
- T, correlation lenght 2.04226678279172 1.7597004266052616

#### TRGによる自由エネルギー

- , T, free\_energy\_density = 2.04226678279172 -2.057720934733894
  - T, free\_energy\_density = 2.04226678279172 2.0583075284209564
  - T, free energy density = 2.04226678279172 2.0583767083674065

#### 自由エネルギーの比較 自由エネルギーの誤差の比較 Free Energy Error Free Energy -2.057710-3 iTEBD iTEBD TRG TRG -2.0578exact 10-5 -2.0579 $10^{-7}$ -2.058010-9 -2.0581-2.0582 $10^{-11}$ -2.0583 $10^{-13}$ -2.058410 10 16 12 14 $\chi$ or D $\chi$ or D

#### 実習2-1

- · Tを変えて、自由エネルギーの精度を確認する
  - Tc に近づくとどうなるか?
  - ・ 必要に応じで、 $chi\_max\_list$ ,  $D\_list$ を変更する
  - ・計算時間と精度の関係を考えると、自由エネルギー の計算には、iTEBDとTRGどちらが効率が良いだろう か?

#### まとめ

- ・ テンソルネットワーク (TN) は計算科学のいろいろな場面に現れる
  - · 問題自体がTN形式で表現される。近似としてTN形式が現れる。
- ・ TNの基本的な計算は、縮約(行列積)、低ランク近似(SVD)、および、固有値問題
  - ・ 応用例:テンソル繰り込み群、固有値問題(行列積状態)
- ・ 今回扱わなかった話題
  - ・ 量子多体問題への応用
  - ・ 量子回路シミュレーション、量子計算
  - ・ 機械学習、データ科学、...

## 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).