

格子スピン模型の計算科学

理学系研究科 物理学専攻 大久保毅

e-mail: t-okubo@phys.s.u-tokyo.ac.jp

tel: 03-5841-4609 | 内線 24215

居室：理 1 号館 9 階 9 4 0

<http://exa.phys.s.u-tokyo.ac.jp/ja/members/okubo>

(この講義の資料等はここに置く予定)

今日の話の流れ

- 受講者の背景確認
- 相転移と統計力学の復習
- 格子スピン模型
- (古典) 格子スピン模型の数値解法
 - モンテカルロ法 (必要であれば、主に黒板)
 - 分配関数の転送行列表示とテンソルネットワーク表示
 - テンソルネットワーク繰り込み群
 - 角転送行列繰り込み群法

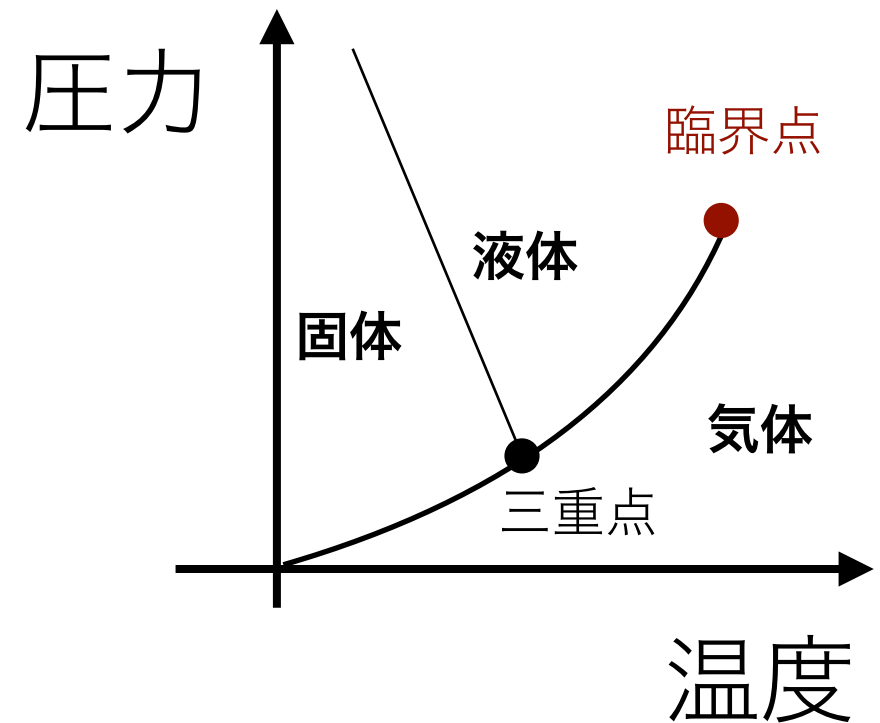
＊赤字の手法を来週の実習で試してもらう予定です

受講者の背景確認

- 工学部？ or 理学部？
- 統計力学の講義を履修しているか？
 - カノニカル分布を知っている？
 - イジング模型を知っている？
 - 繰り込み群を知っている？
- 計算物理の講義を履修しているか？
 - プログラミング言語？ fortran, c, c++, python, ...
 - モンテカルロ法を知っている？

相転移

- 温度や圧力等の“パラメタ”を変えると自由エネルギーに異常（特異点）が現れる場合がある。→相転移
- 相転移で区別された状態＝相
- 水だと、常圧で温度を下げると気体→液体→固体の3つの相が出現



物性物理の研究対象の一つ

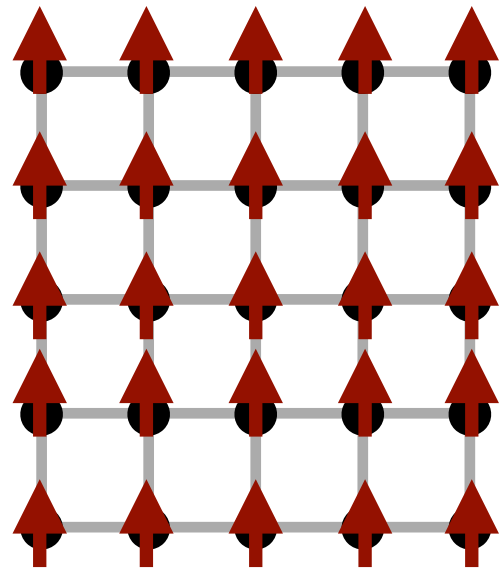
- どんな相があるか？
 - 長距離秩序、トポロジカル秩序、...
- それらを分ける相転移の性質は？

磁性体（スピン模型）の相

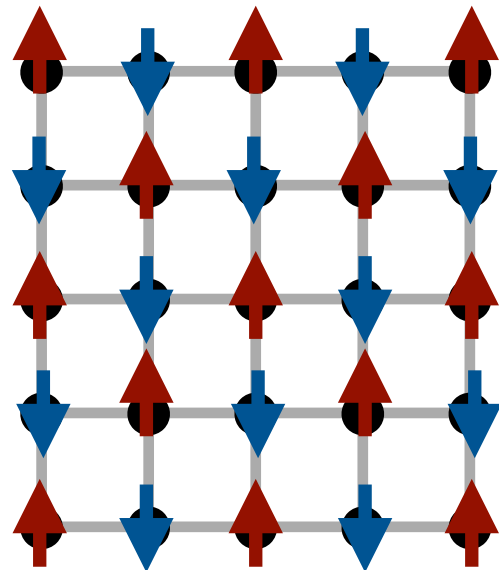
典型的には2つの相が存在

磁気秩序相

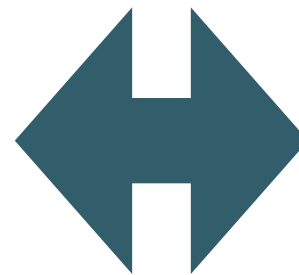
強磁性



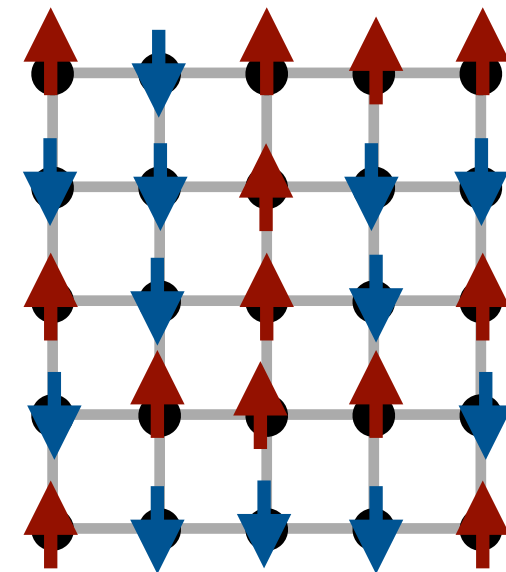
反強磁性



相転移



無秩序相



実際の物質や複雑なスピン模型では、
多種多様な磁気秩序が生じる

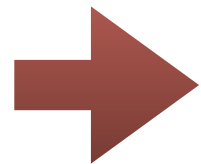
1 次転移と 2 次転移

- 相転移には大きく分けて不連続転移と連続転移が存在
 - 不連続転移：
相転移で自由エネルギーの 1 階微分が不連続に変化 = 1 次転移
 - 例：液体 \leftrightarrow 固体の相転移....
 - 連続転移：
自由エネルギーの 1 階微分は連続に変化
 - 多くの場合、2 階微分が不連続に変化する = 2 次転移
 - 例：気体 \leftrightarrow 液体の臨界点、イジング模型の相転移...

臨界現象

2 次転移では臨界現象が生じる

相転移点（臨界点）では、特徴的な長さスケールが発散



スケール不変性

種々の物理量が非自明なべき関数の振る舞い

相関長： $\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$

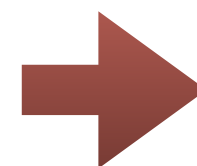
比熱： $C \sim |T - T_c|^{-\alpha}$

感受率： $\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma}$

べき指数＝臨界指数

ユニバーサリティ

臨界指数は相転移で“破れる”対称性と
空間次元で決まり系の詳細には依存しない



臨界現象は対称性に注目した
シンプルなモデルで調べられる

統計力学とカノニカル分布

カノニカル分布

Γ : 状態 (例えば、粒子の位置・運動量)

$$P(\Gamma) \propto e^{-\beta \mathcal{H}(\Gamma)}$$

$P(\Gamma)$: Γ が実現する確率

$$\beta = \frac{1}{k_B T} : \text{逆温度}$$

\mathcal{H} : ハミルトニアン

分配関数 = カノニカル分布の規格化因子

$$Z = \sum_{\Gamma} e^{-\beta \mathcal{H}(\Gamma)}$$

熱力学自由エネルギーとの関係

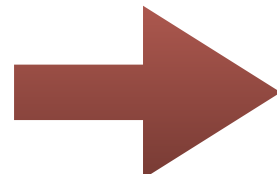
$$F = -k_B T \ln Z$$

分配関数の対数 = 自由エネルギー

カノニカル分布での物理量の期待値

物理量 O の期待値： $\langle O \rangle \equiv \frac{1}{Z} \sum_{\Gamma} O(\Gamma) e^{-\beta \mathcal{H}(\Gamma)}$

物理量の期待値 \leftrightarrow マクロな系で観測される物理量

 すべての状態の和が計算出来れば、
熱力学量が分かる

現実： \sum_{Γ} はとてつもなく大きいので、手では計算できない
(計算機を使っても厳密に計算するのは難しい)

計算科学の手法 = 分配関数・期待値を数値的に計算する

格子スピン模型：格子

格子スピン模型：

格子上にスピン自由度が定義され相互作用する模型

格子

1 次元

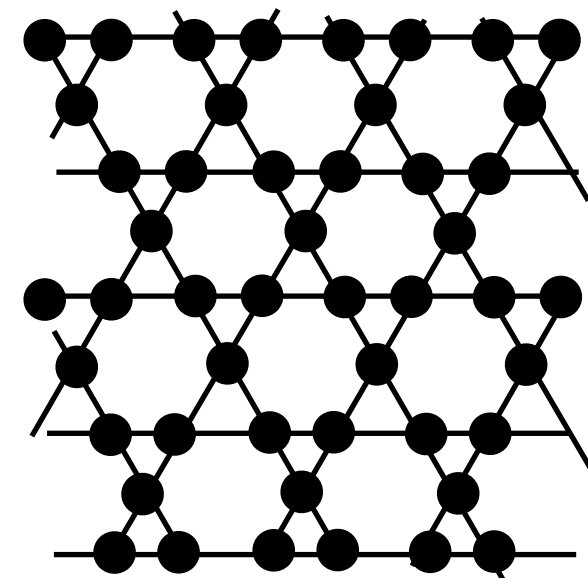
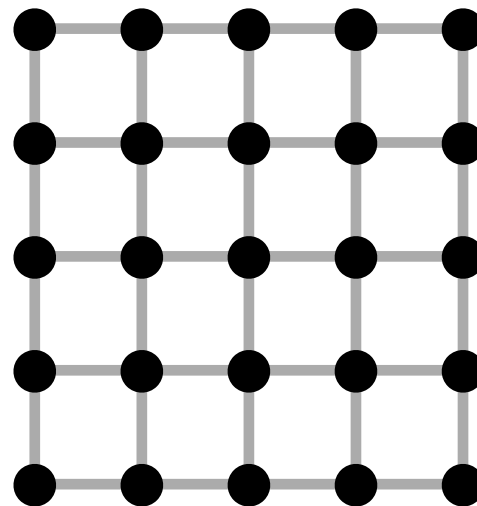
鎖



正方格子

カゴメ格子

2 次元



3 次元

立方格子, FCC格子, ...

格子スピン模型：スピン自由度

スピン自由度 S_i

*量子スピン

S_i は角運動量演算子 $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$

スピン量子数 S で特徴付け $S = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$

S が小さいほど量子効果が強く、新規量子相が実現する可能性

*古典スピン

$S \rightarrow \infty$ の極限に対応する

イジングスピン： $S_i = \pm 1 = \uparrow, \downarrow$ 上か下かしか向かない

ハイゼンベルグスピン： $S_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$

3成分の単位ベクトル： $(S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2 = 1$

普通の磁気秩序は古典スピンの十分理解できる

格子スピン模型：相互作用

典型的なハミルトニアン：スピン自由度の2体相互作用

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j$$

$J_{ij} > 0$ ：同じ向きを向くと得 (強磁性相互作用)

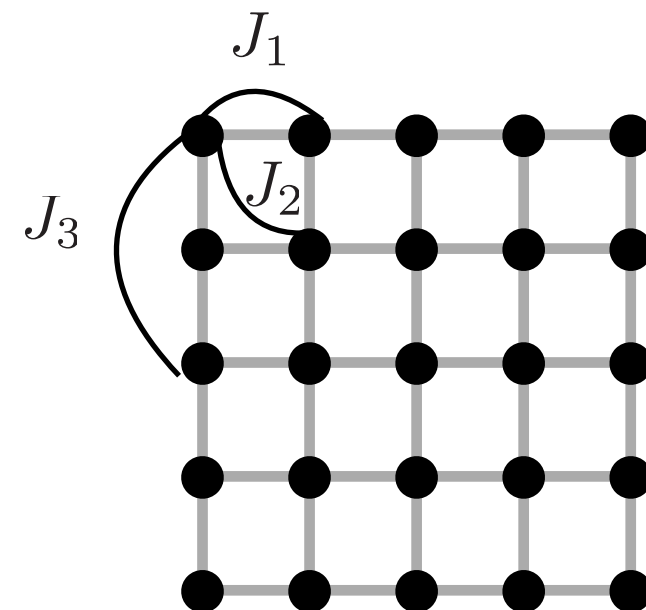
$J_{ij} < 0$ ：反対向きを向くとエネルギーが得 (反強磁性相互作用)

現実の物質では J_{ij} は $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \rightarrow$ 大で十分に小さくなる

➡ 最近接格子点間のみの相互作用を考えるのが良い近似

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

$\sum_{\langle i,j \rangle}$ ：最近接格子点ペアの和



スピン模型と相転移

例：正方格子強磁性イジング模型

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

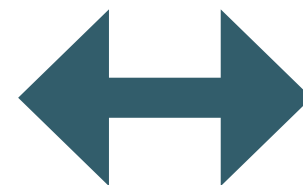
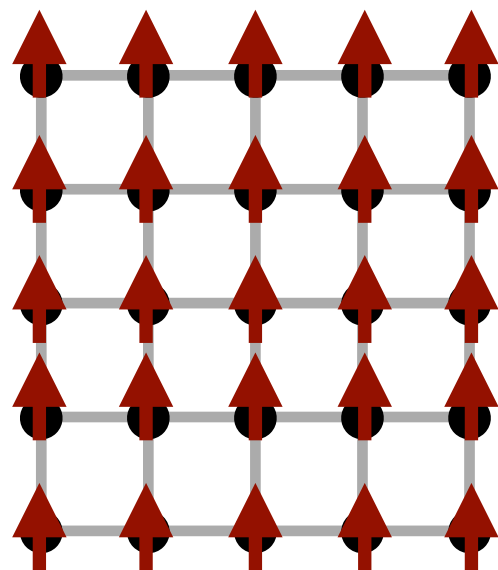
自由エネルギー：

$$F = E - ST$$

低温：エネルギーが小さい方がFが小さい

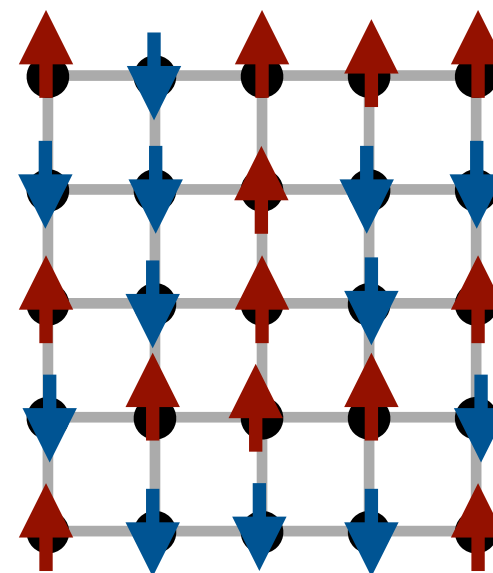
高温：エントロピーが大きい方がFが小さい

低エネルギー



相転移！

高エントロピー



(磁化の和がほぼゼロになる状態はたくさん)

イジングモデルの分配関数

統計力学の処方箋：

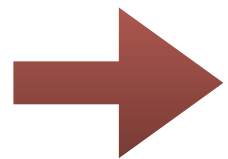
分配関数を計算したい

$$Z = \sum_{\{S_i = \pm 1\}} e^{\beta J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j}$$

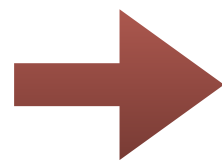
$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j$$

しかし、和 $\sum_{\{S_i = \pm 1\}}$ は、スピンのN個の時、 2^N

で**指数的に大きい**！（N=100でも、 10^{30} の項がある！）



定義通りに計算することは困難



計算科学によるアプローチ

(古典) 格子スピンモデルの数値解法

- 大きく分けて2種類のアプローチ
 - 乱数を使って物理量の期待値を誤差つきで求める
 - 乱択アルゴリズム、モンテカルロ法
 - 統計誤差の範囲内で得られる期待値は厳密
- 分配関数を近似的に計算する
 - 得られた分配関数には近似に基づく系統的な誤差
 - 誤差は計算の規模を増大することで減らせる
 - 転送行列法、テンソルネットワーク法

乱拓アルゴリズム

乱拓アルゴリズム：（擬似）乱数を実行中に参照し
その値によって振る舞いを変える

例：モンテカルロ積分

円の面積 $\int_{-1}^1 dx \int_{-1}^1 dy$

アルゴリズム

0. $N_a = 0$ $N = 0$

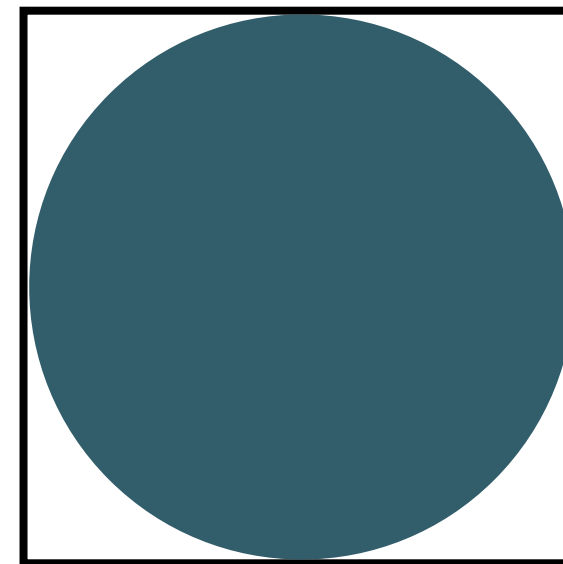
loop i

$x_i \in [-1, 1]$
 $y_i \in [-1, 1]$ の一様乱数を発生

$N = N + 1$

if $x_i^2 + y_i^2 \leq 1$ then $N_a = N_a + 1$

end loop



$$\frac{N_a}{N} \rightarrow \pi$$

誤差は $\frac{1}{\sqrt{N}}$

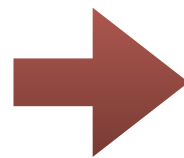
次元の呪い

モンテカルロ積分は高次元積分に無力

n次元立方体（1辺の長さ2）に対する、n次元球の体積の割合

$$r = \frac{\pi^{n/2} / \Gamma(\frac{n}{2} + 1)}{2^n} \sim \left(\frac{\pi}{n}\right)^{n/2}$$

nが大きくなると**指数的に球の体積の割合が減る**



球に“ヒット”する確率が減り、
誤差が指数的に増大してしまう

（誤差を一定に保つには、サンプリング数Nを
指数的に大きくする必要がある）

Importance Sampling

- 積分に寄与する部分を重点的にサンプリングする

スピンモデルの例：

ボルツマン重み $e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j}$

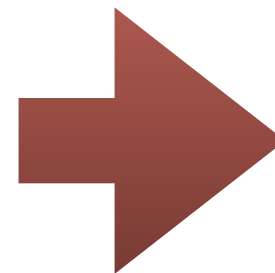
が大きいところを重点的にサンプリングする

$$\sum_{\{S_i = \pm 1\}} \simeq \text{ランダムに発生した} \\ \text{部分空間での和}$$

規格化定数（分配関数）が未知なので、

「マルコフ連鎖モンテカルロ法」で

重点的サンプリングを実現する



黒板

転送行列

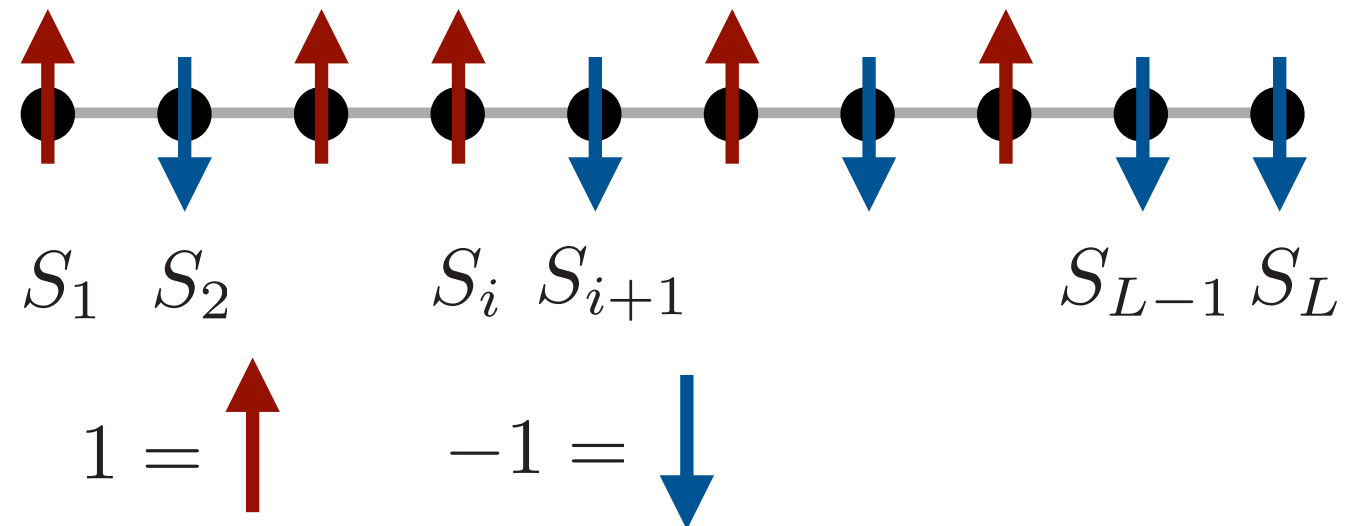
例：1次元イジングモデル

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

$S_i = 1, -1$

分配関数

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{S_i = \pm 1\}} e^{\beta J \sum_i S_i S_{i+1}} \\ &= \sum_{\{S_i = \pm 1\}} \prod_{i=1}^{L-1} e^{\beta J S_i S_{i+1}} \\ &= \sum_{S_1 = \pm 1, S_L = \pm 1} (T^{L-1})_{S_1, S_L} \end{aligned}$$



転送行列

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

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

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

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix} \quad \text{転送行列は実対称行列}$$

➡ 固有値は実で、直行行列で対角化可能

$$T = P^t \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} P \quad \begin{aligned} \lambda_+ &= 2 \cosh \beta J \\ \lambda_- &= 2 \sinh \beta J \end{aligned} \quad |\lambda_+| > |\lambda_-|$$
$$P^t P = P P^t = I$$

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

2次元系の転送行列

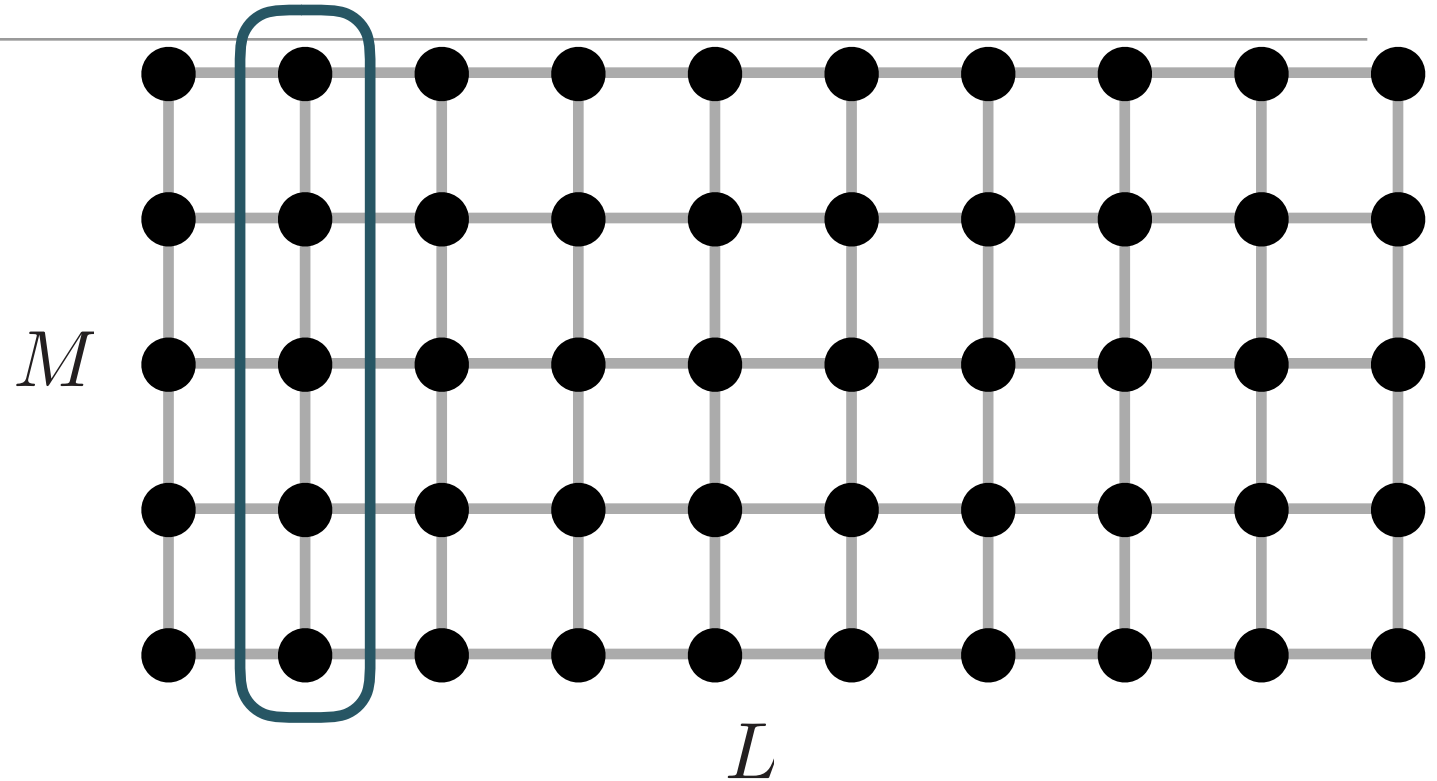
$L \times M$ の 2次元系

➡ 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！

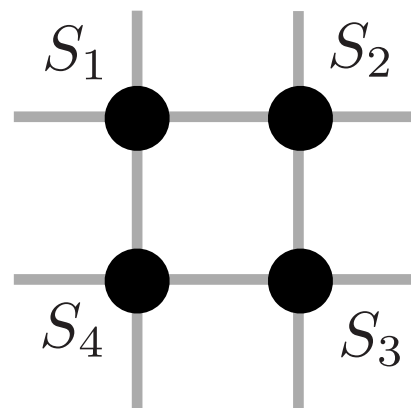
➡ 厳密な計算はすぐに破綻する
2次元イジング模型だったら、 $M=40$ 程度が限界
(疎行列の対角化問題)

➡ 転送行列の積を近似的に計算

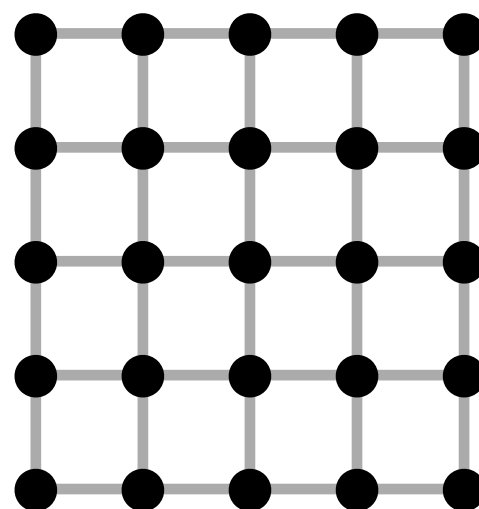
転送行列表現の拡張

2次元正方格子モデルの分配関数

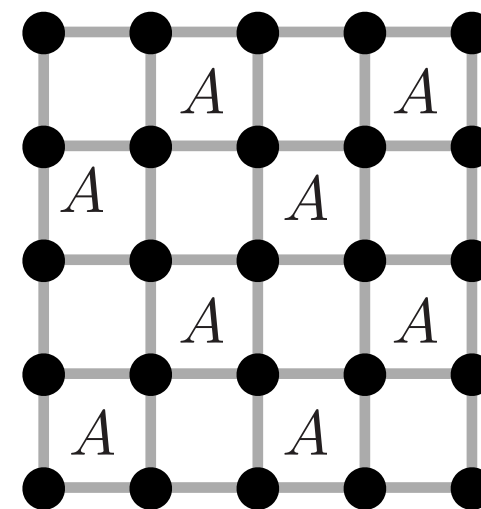
一つの正方形に注目



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”

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

イジング模型

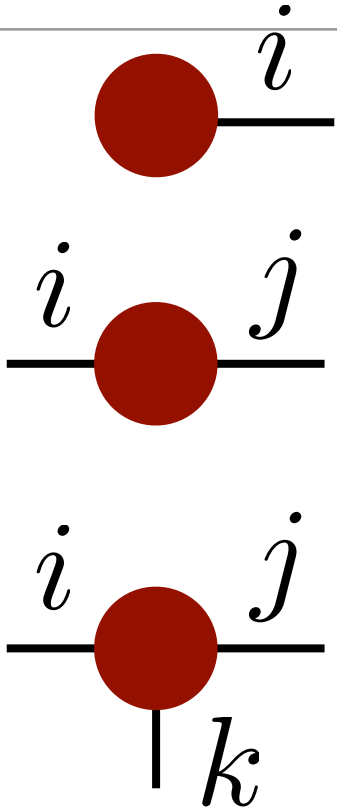
Aは2×2×2×2のテンソル

分配関数=テンソルの掛け算

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

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 $T : T_{i,j,k}$

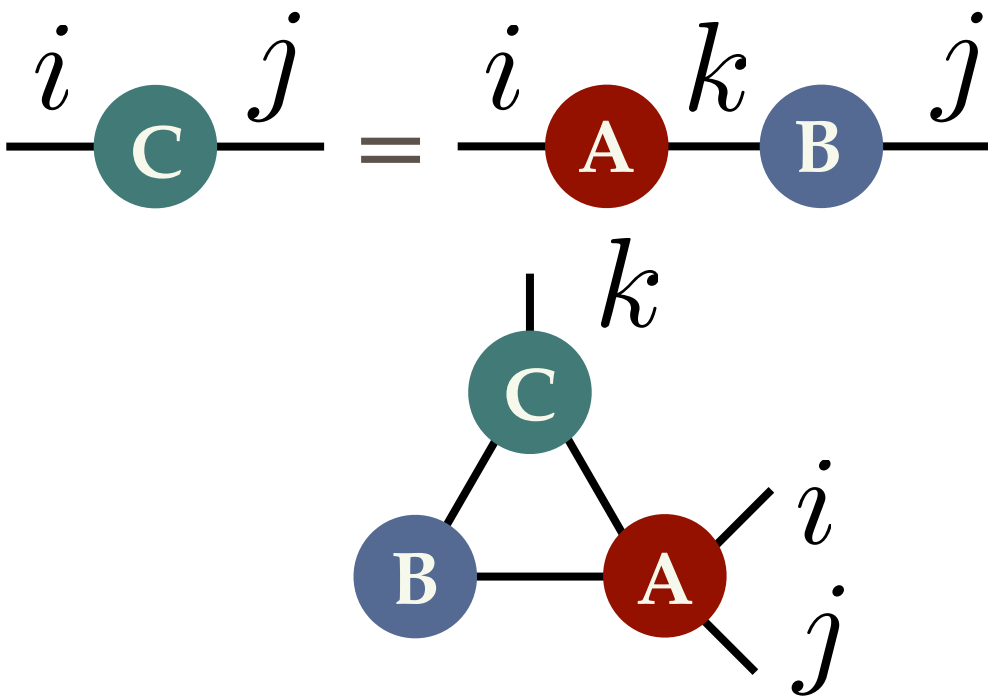


テンソルの積（縮約）の表現

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

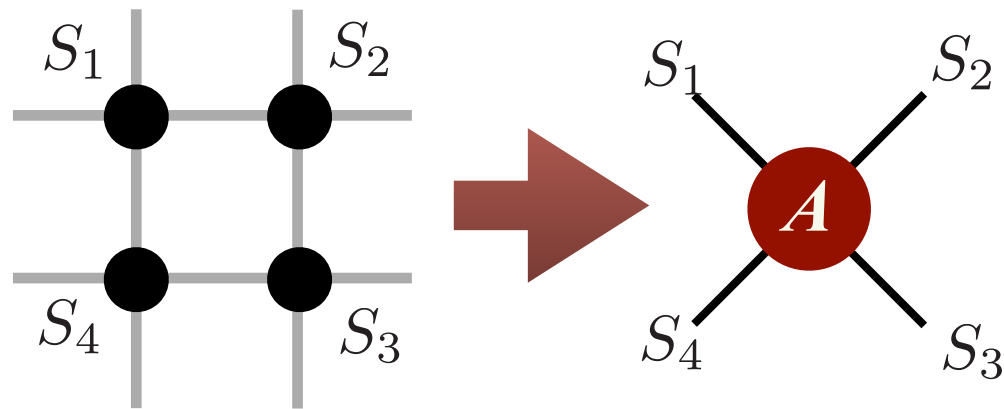
$$\sum_{\alpha,\beta,\gamma} A_{i,j,\alpha,\beta} B_{\beta,\gamma} C_{\gamma,k,\alpha}$$

*n階のテンソル=n本の足

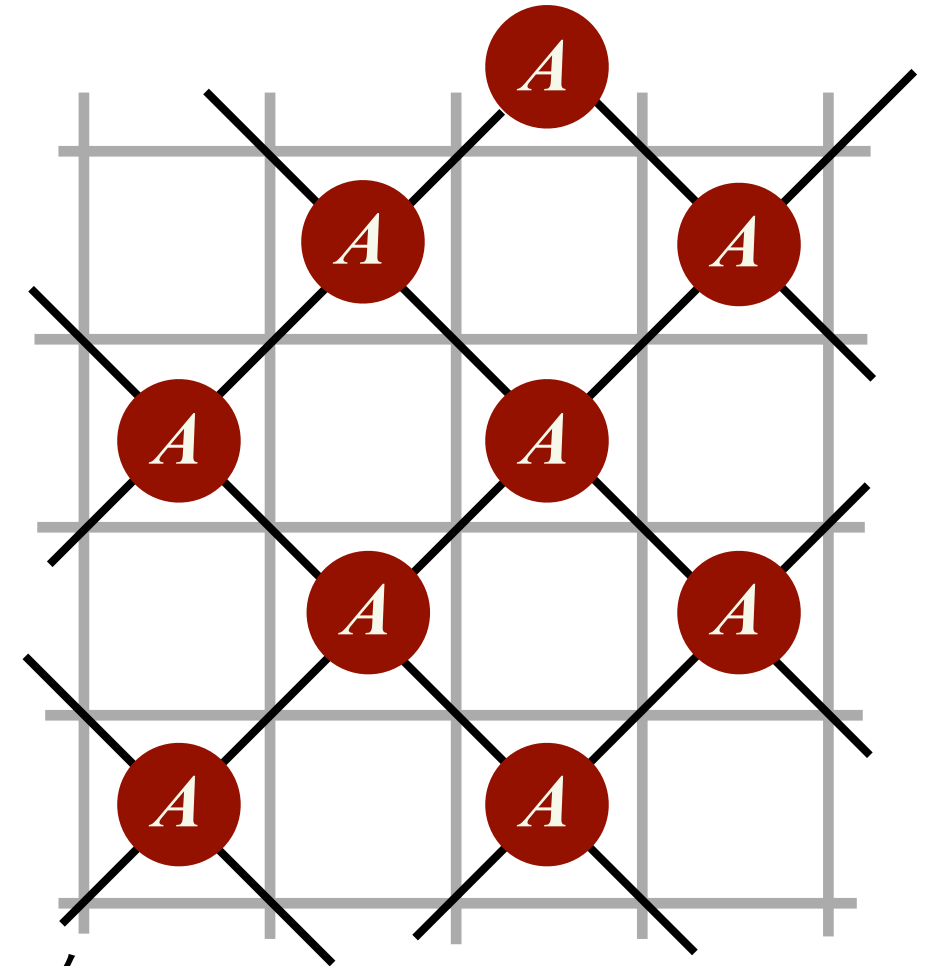


分配関数のテンソルネットワーク表現

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



$Z =$



分配関数＝テンソルAの積のネットワーク

テンソルネットワーク

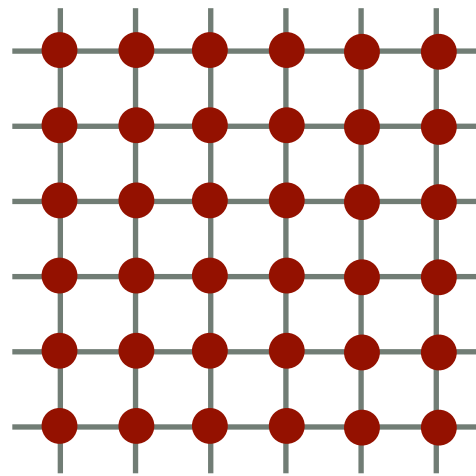
正方格子イジング模型→45度傾いた正方格子ネットワーク

テンソルネットワーク繰り込み群

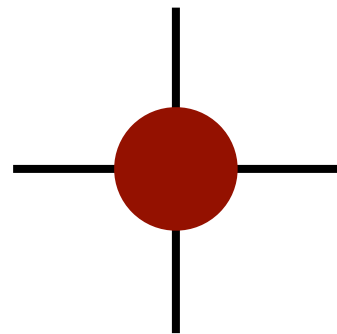
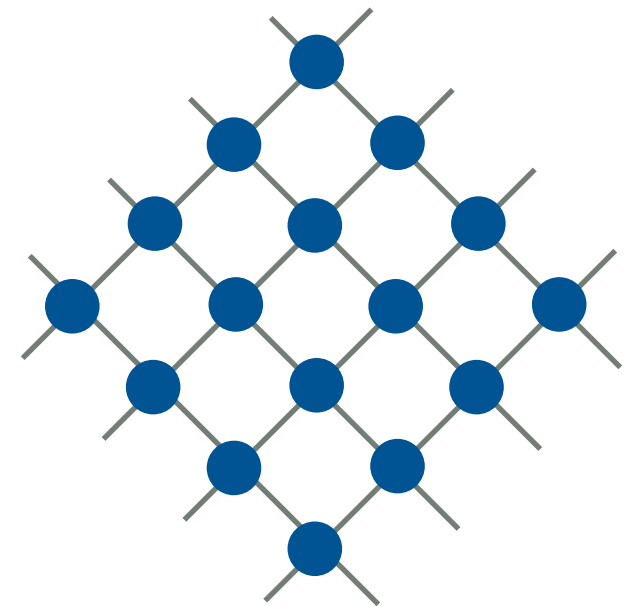
- M. Levin and C. P. Nave, PRL (2007)による Tensor network Renormalization Group (TRG)から始まった比較的新しい流れ
- 分配関数のテンソルネットワーク表現を粗視化していくことで、近似的に分配関数を計算する
 - 粗視化 \leftrightarrow 実空間繰り込み群
- 種々の格子模型に適用可能
 - 物性分野だけでなく、素粒子・原子核分野でも近年研究が進んでいる

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)

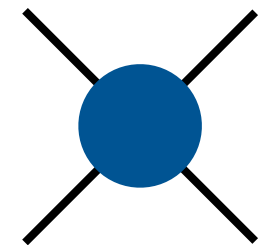


$A: D \times D \times D \times D$

$L \times L$ の正方格子



(近似)



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

$(L \times L)/2$ 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数

$$A: N \times M \text{ 行列} \rightarrow \text{rank}(A) \leq \min(N, M)$$

低ランク近似:

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

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

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

$\rightarrow \min_{\tilde{A}_{ij}; \text{rank } \tilde{A} = R} \|A - \tilde{A}\|$ 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 $N \times M$ 行列 A は以下の形に一意に分解できる

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

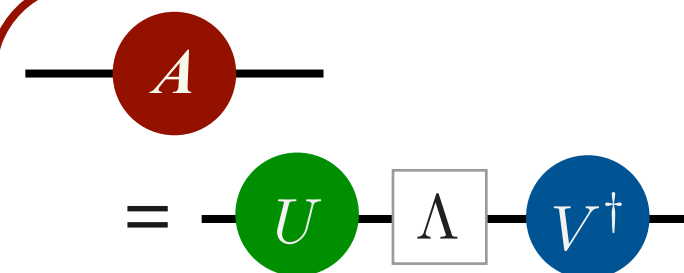
λ_k は非負の実数。 $\lambda_k \geq 0$

rank(A) = 非ゼロの特異値の数

$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \dots$ 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

$$U^\dagger U = I$$

$$V V^\dagger = I$$

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

The diagram shows three stages of matrix decomposition:

- Stage 1:** A red circle labeled A connected by horizontal lines.
- Equality:** An equals sign followed by a green circle U , a white square Λ , and a blue circle V^\dagger .
- Approximation:** A red Chinese character "近似" (approximate) followed by a tilde symbol \cong .
- Stage 2:** A green circle \tilde{U} , a white square $\tilde{\Lambda}$, and a blue circle \tilde{V}^\dagger .

Below each stage are its mathematical typeset labels:

- Stage 1:** $A : M \times N$
 $(M \leq N)$
- Stage 2:** $\Lambda : M \times M$
 $U, V : (M, N) \times M$
- Stage 2 (continued):** $\tilde{\Lambda} : R \times R$
 $\tilde{U}, \tilde{V} : (M, N) \times R$

さらに

$$= \text{---} \textcircled{\tilde{U}} \text{---} \boxed{\sqrt{\tilde{\Lambda}}} \text{---} \boxed{\sqrt{\tilde{\Lambda}}} \text{---} \textcircled{\tilde{V}^\dagger} \text{---} = \text{---} \textcircled{X} \text{---} \textcircled{Y} \text{---}$$

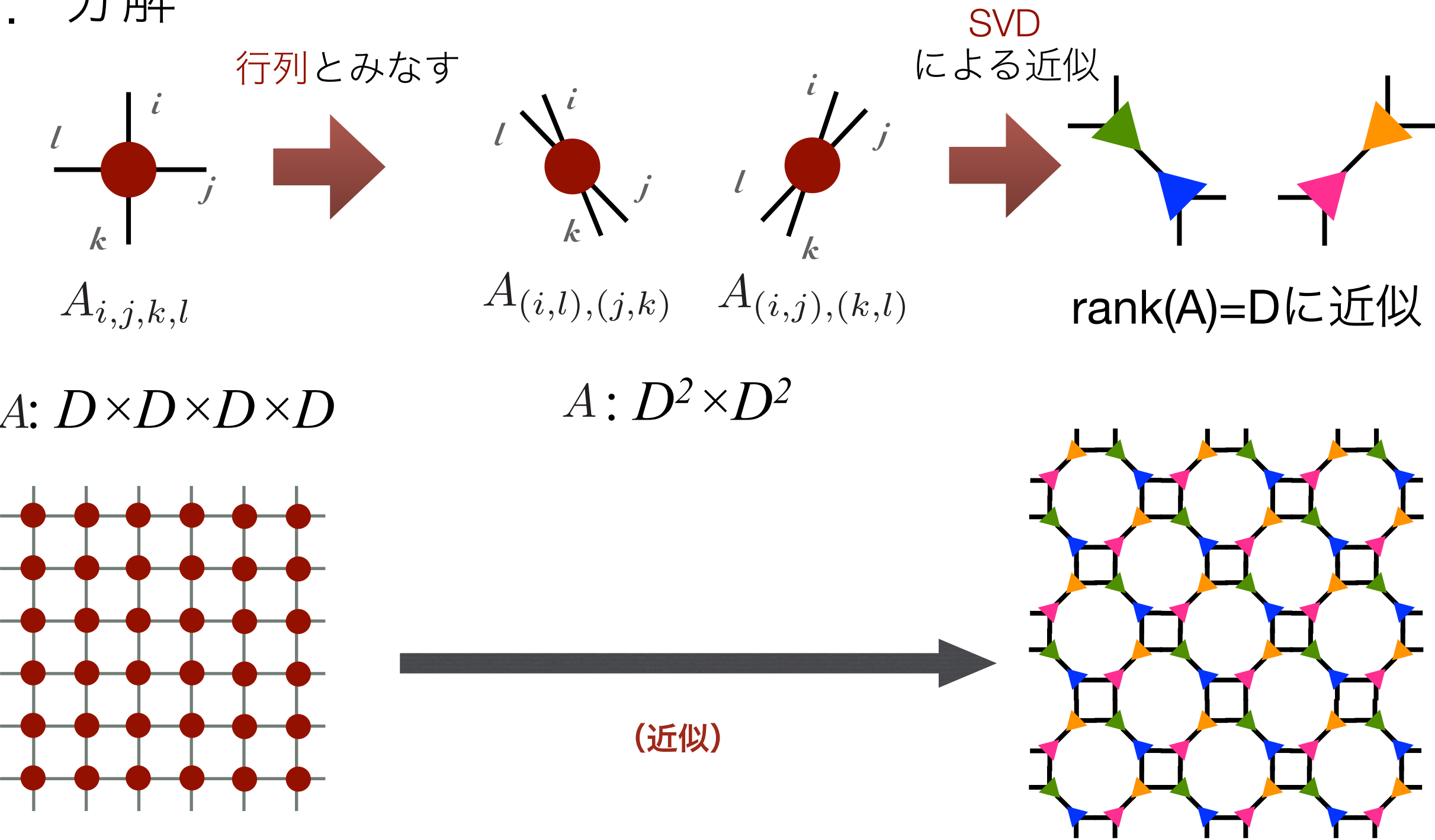
$\sqrt{\tilde{\Lambda}}$: 対角成分が $\sqrt{\lambda}$
 の対角行列

$X = \tilde{U} \sqrt{\tilde{\Lambda}} \quad : \mathbf{M} \times R$
 $Y = \sqrt{\tilde{\Lambda}} \tilde{V}^\dagger \quad : \mathbf{R} \times M$

SVDを使うと
Aを小さい行列の積
に分解できる

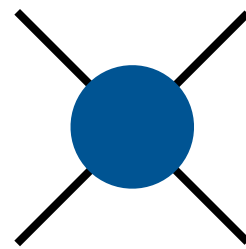
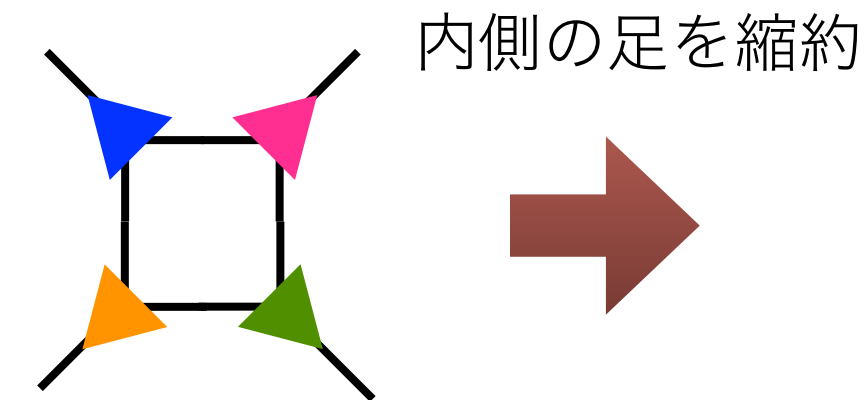
テンソルネットワーク繰り返し込みのレシピ

1. 分解



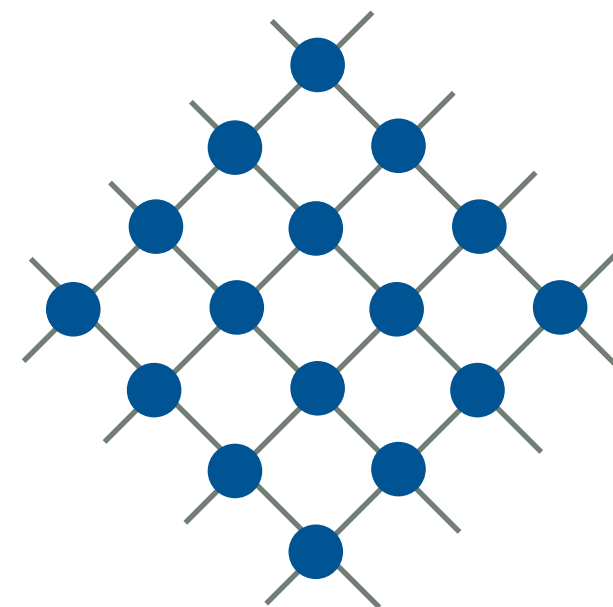
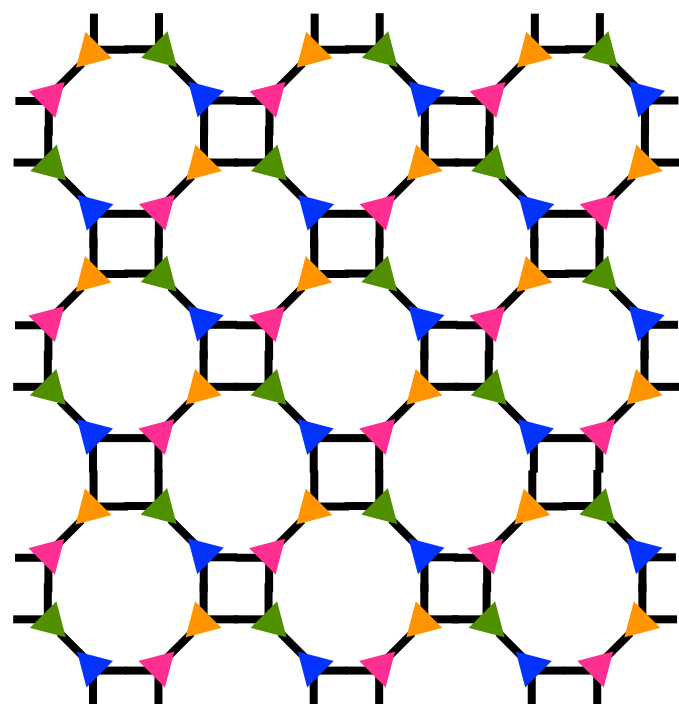
テンソルネットワーク繰り返し込みのレシピ

2. 粗視化



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

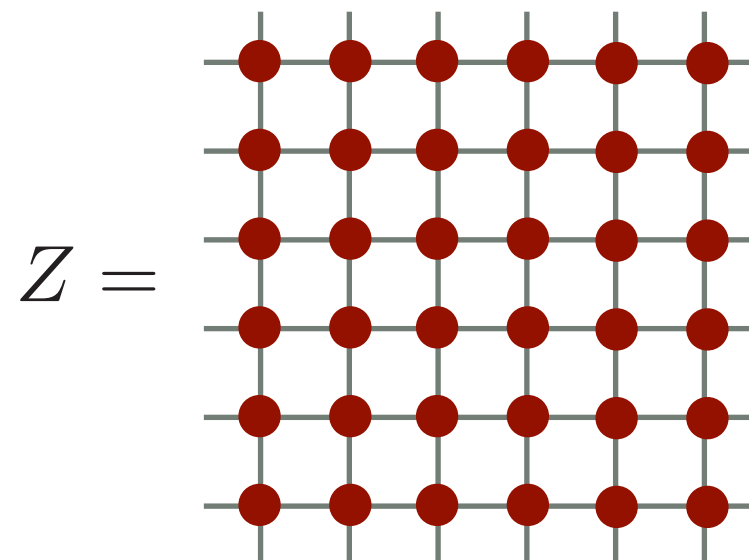
元のテンソル2つが
新しいテンソル1つに
粗視化された



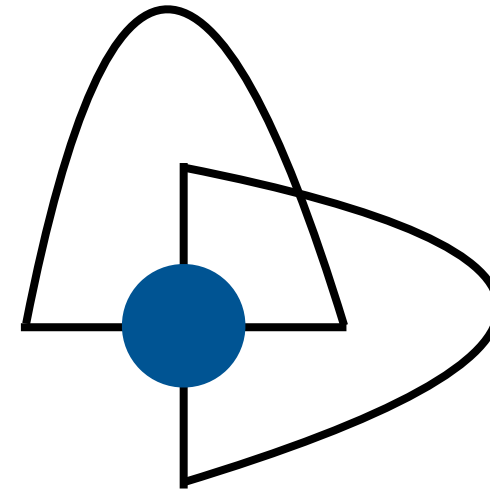

テンソルネットワーク繰り込みのレシピ

分配関数

(周期境界条件)



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 : $E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$ (微分を差分で近似)

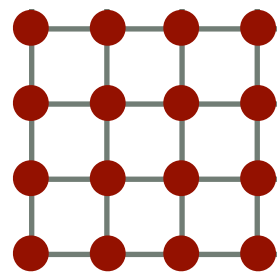
比熱 : $C = \frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}$ (微分を差分で近似)

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 $L \rightarrow L+2$ 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

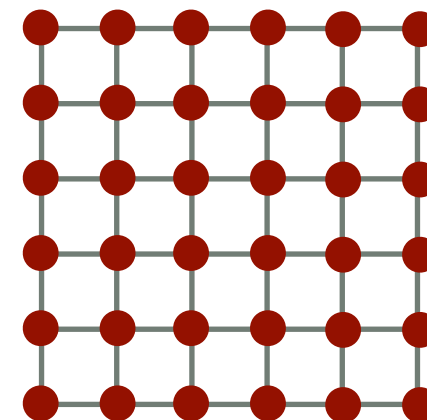
CTMRGでやりたいこと

$L \times L$ の分配関数が
(近似的に) 計算できた

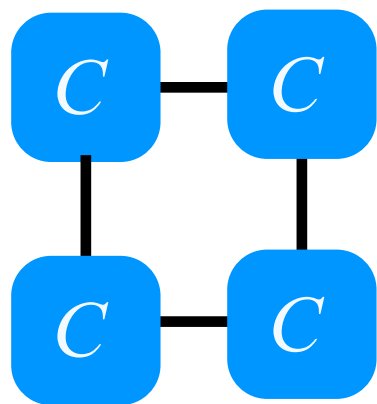


系を少し大きくする

$(L+2) \times (L+2)$ の分配関数を計算



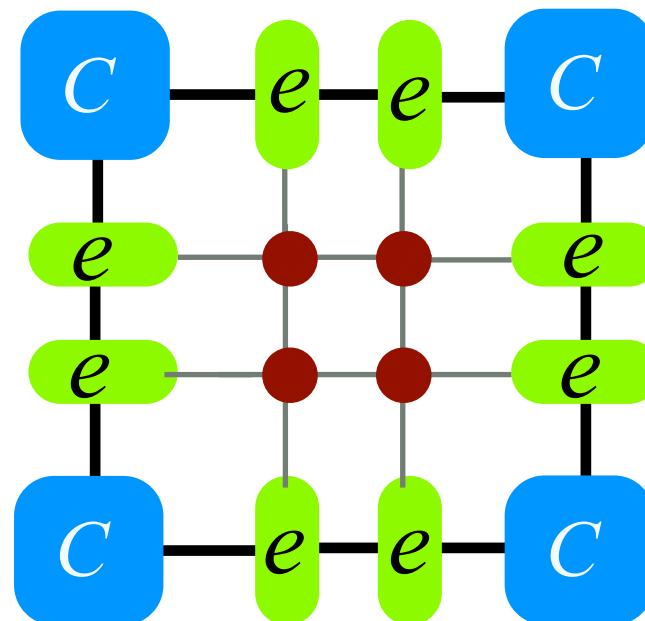
角転送行列表現



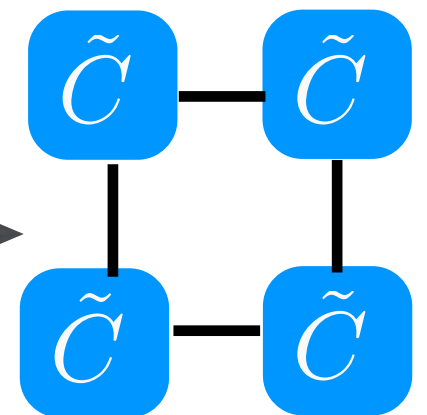
$C: D \times D$



系を少し大きくする



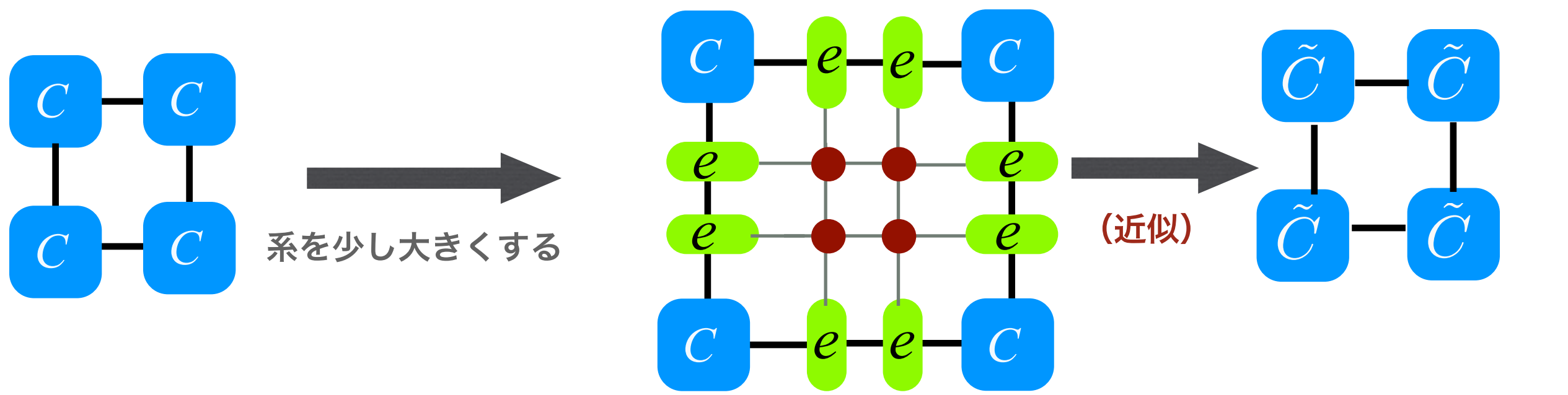
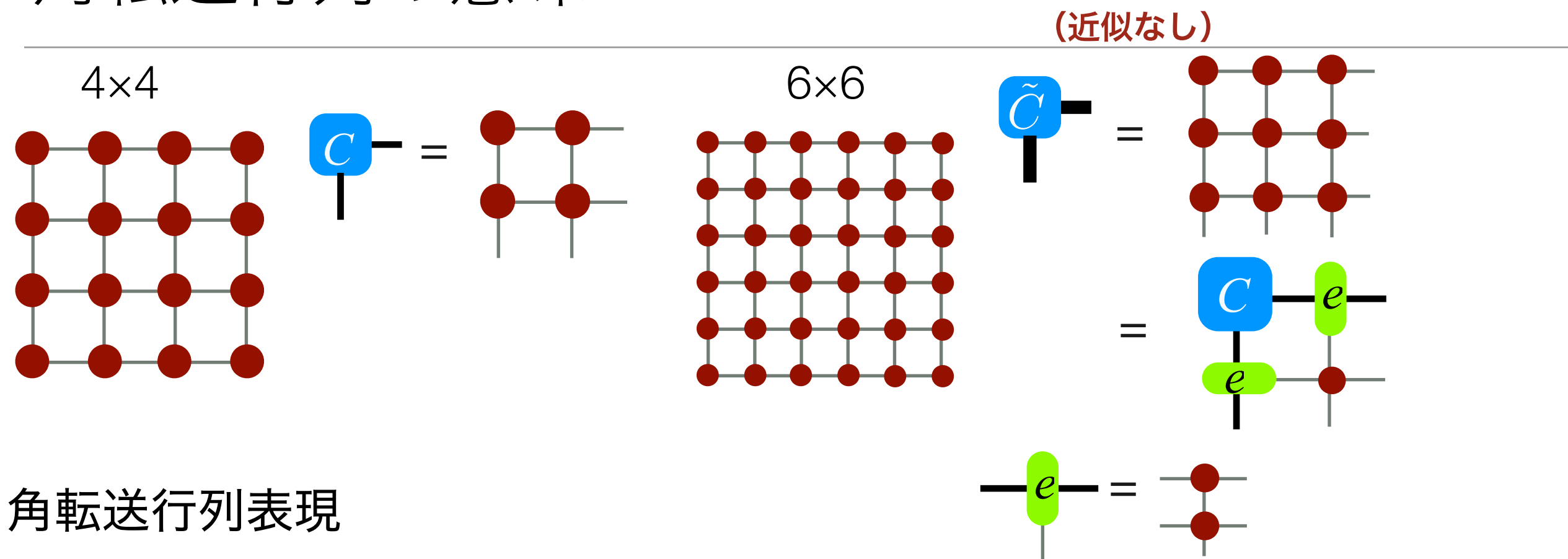
(近似)



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

Cの大きさを変えずに
系を大きくする

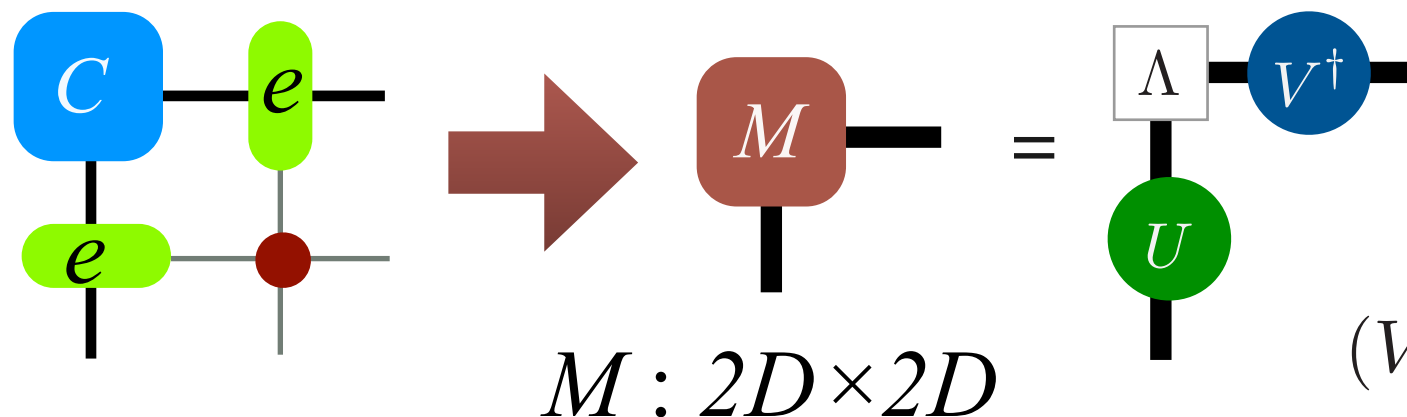
角転送行列の意味



CTMRGのレシピ

1. SVDによる分解

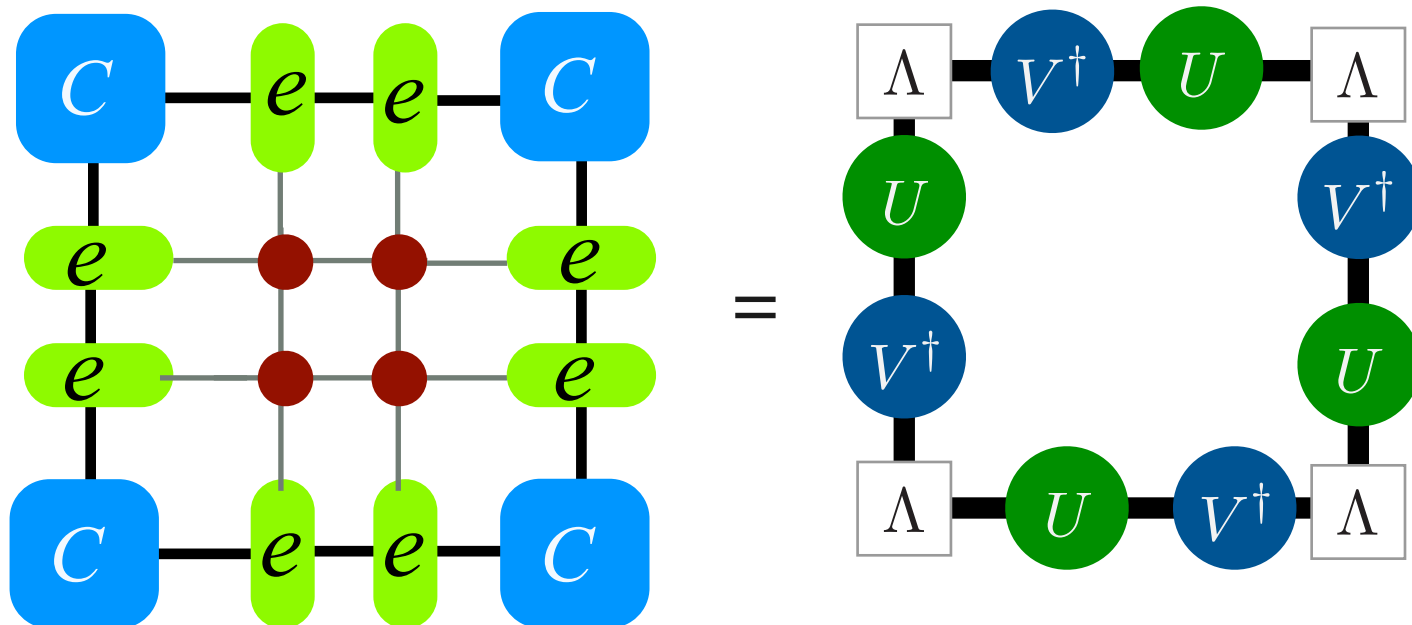
行列と思ってSVD



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

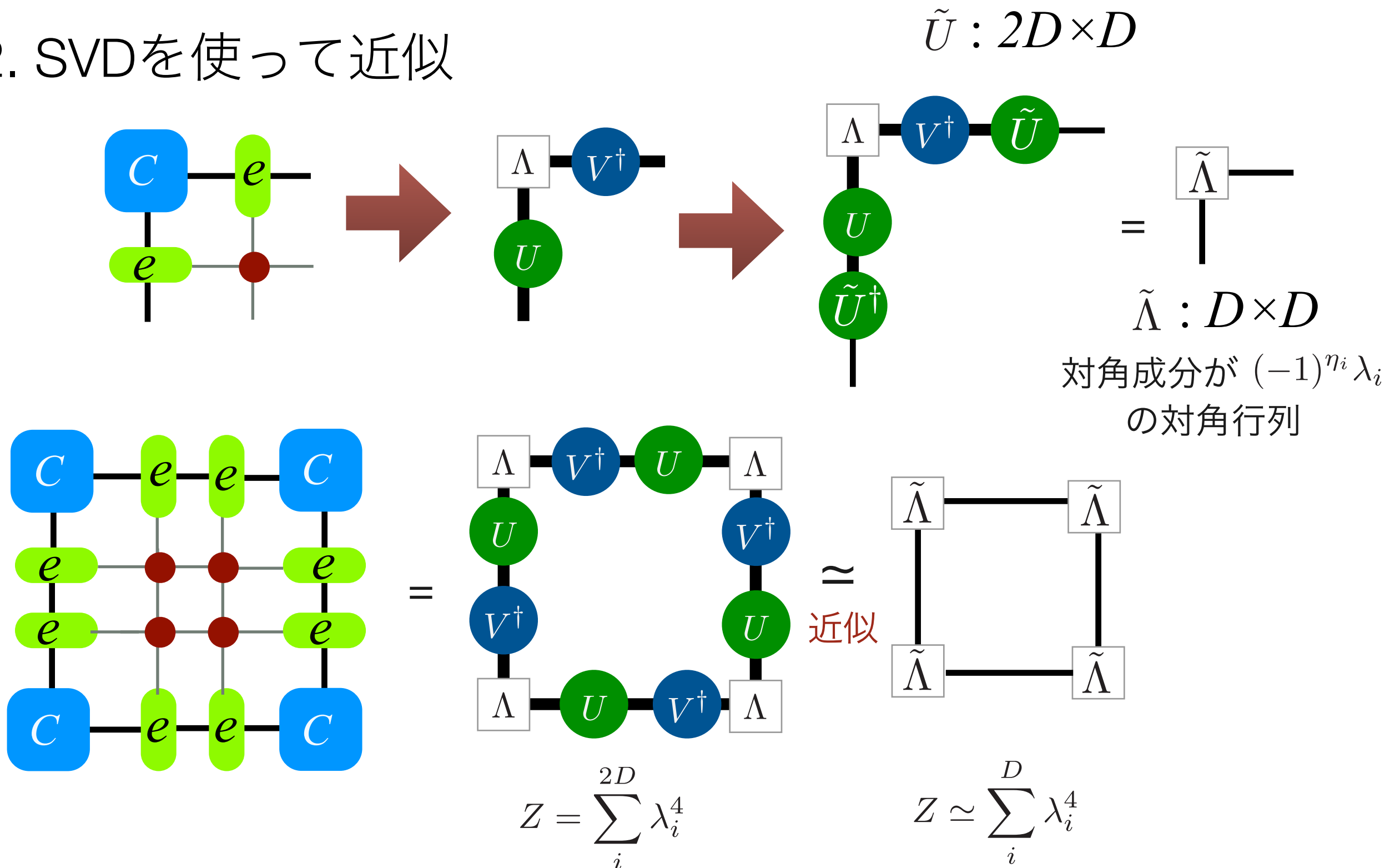
$$= \sum_i \lambda_i^4 (-1)^{4\eta_i}$$

$$= \sum_i \lambda_i^4$$

特異値が大きいものD個
を残せば良い近似！

CTMRGのレシピ

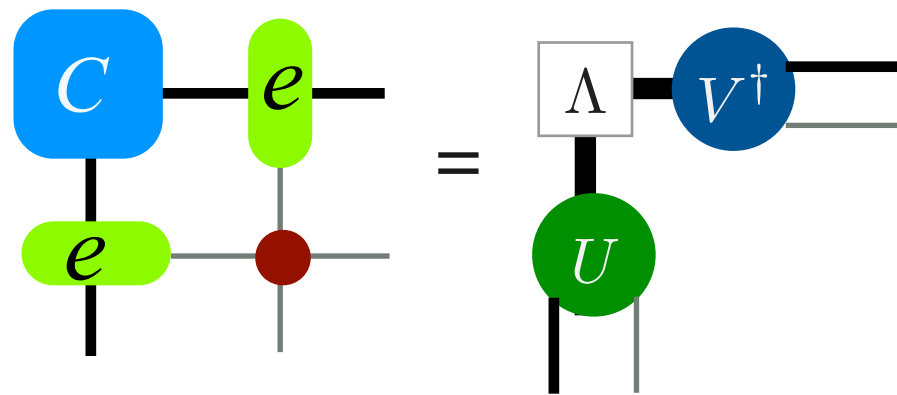
2. SVDを使って近似



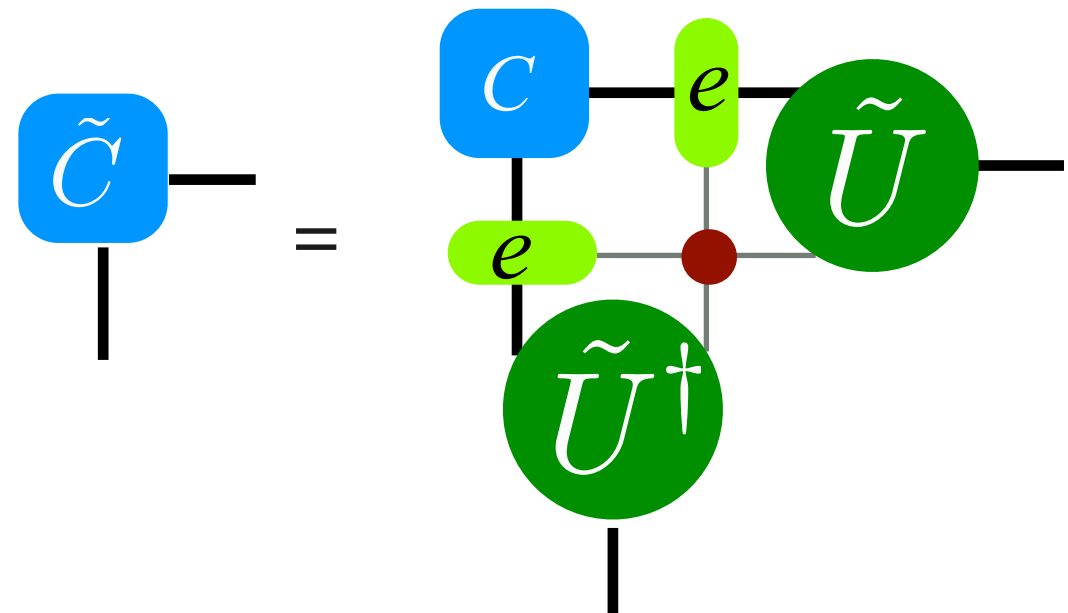
CTMRGのレシピ

くりこみ変換まとめ

1. $L \times L$ の系の角転送行列をSVD



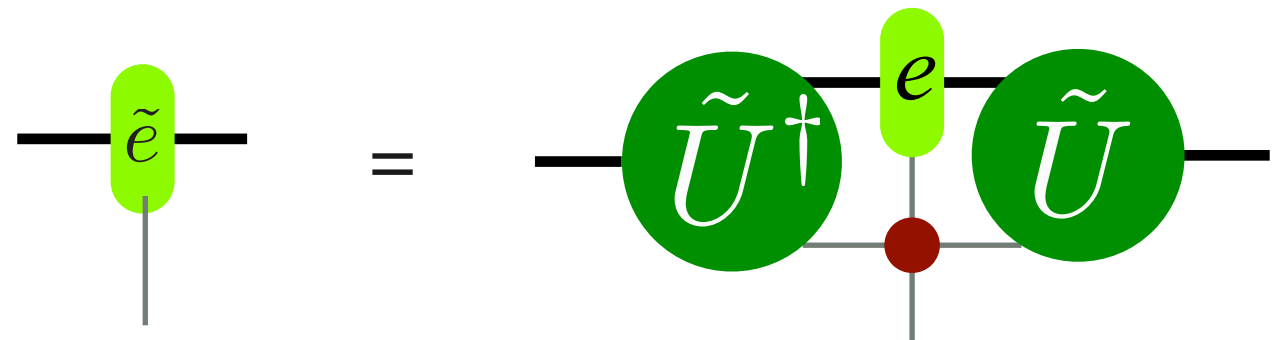
3. $(L+2) \times (L+2)$ の角転送行列を作成



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

来週の実習予定

- 大久保がモンテカルロ法、角転送行列法、テンソルネットワーク法の基本プログラムを準備
 - まず、プログラムと今日の説明との対応を（少しでも）理解してもらう
 - 実際にプログラムを動かしてみる
 - 物理パラメタ（温度）、計算パラメタを変えて、アルゴリズム毎に収束性、精度などをチェックする
 - などなどの予定