古典系のテンソルネットワーク（途中）

Ogino Takuhiro

November 14, 2020

1　一次元古典イジング模型

1.1　厳密解

周期境界条件下の一次元古典イジング模型のハミルトニアンは、

$$H^{1\mathrm{D}} := -J\sum_{i=0}^{N-1} S_i S_{i+1} \tag{1}$$

で与えられる。ここで、サイト数を N とし、0 番目のスピンと N 番目のスピンを同一視した ($S_0 = S_N$)。古典系を考えているので、各スピン S_i は 1 または -1 の値をとる。

このとき、分配関数 Z_N は逆温度 β を用いて

$$Z_N^{1\mathrm{D}} := \sum_{\text{全状態}} \exp\left(-\beta H^{1D}\right) \tag{2}$$

$$= \sum_{S_0=\pm1}\sum_{S_1=\pm1}\cdots\sum_{S_{N-1}=\pm1}\exp\left(\beta J\sum_{i=0}^{N-1} S_i S_{i+1}\right) \tag{3}$$

と表せる。ここで、転送行列 T^{1D} を、

$$T^{1D} := \begin{pmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{pmatrix} \tag{4}$$

で定義すると、分配関数は、

$$Z_N^{1\mathrm{D}} = \mathrm{Tr}\left(T^{1D}\right)^N \tag{5}$$

$$= \lambda_+^N + \lambda_-^N \tag{6}$$

と表すことができる。ここで、$\lambda_\pm := e^{\beta J} \pm e^{-\beta J}$ は、転送行列 T^{1D} の二つの固有値である。一サイトあたり

の自由エネルギー f、エネルギー e と比熱 C_v は、$t := \tanh(\beta J)$ を用いて

$$
\begin{aligned}
f^{\mathrm{1D}} &:= -\frac{1}{N\beta} \ln Z_N^{\mathrm{1D}} && (7)\\
&= -\frac{1}{\beta} \ln \left[2\cosh(\beta J)\right] - \frac{1}{N\beta} \ln \left[1 + t^N\right] && (8)\\
e^{\mathrm{1D}} &:= -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z_N^{\mathrm{1D}} && (9)\\
&= -\frac{J}{1+t^N} \left[t + t^{N-1}\right] && (10)\\
C_v^{\mathrm{1D}} &:= \frac{\beta^2}{N} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z_N^{\mathrm{1D}} && (11)\\
&= \beta^2 J^2 + \frac{\beta^2 J^2}{(1+t^N)^2} \left[-t^2 - t^{2N-2} + (N-1)\big(t^{N-2} + t^{N+2}\big) - 2Nt^N\right] && (12)
\end{aligned}
$$

で与えられる。

1.2 自由エネルギーの数値計算

まず初めに、数値計算により自由エネルギー f^{1D} を求めることを目指す。簡単のため、サイト数 N が 2 の冪乗 ($N = 2^{N_{\mathrm{itr}}}$) となる場合のみを考える。

厳密解で用いた転送行列をそのまま用いてもテンソルネットワークを用いて数値計算できるのだが、二次元系への拡張を見据えて式変形を先に行う。行列

$$
W := \begin{pmatrix} \sqrt{\cosh(\beta J)} & \sqrt{\sinh(\beta J)} \\ \sqrt{\cosh(\beta J)} & -\sqrt{\sinh(\beta J)} \end{pmatrix} \tag{13}
$$

を用いると、転送行列 T^{1D} は

$$
T^{1D} = WW^T \tag{14}
$$

のように書ける。ここで、新たな転送行列 $\tilde{T}^{1D} := W^T W$ を用いると、分配関数 Z_N^{1D} は

$$
Z_N^{1D} = \mathrm{Tr}\big(T^{1D}\big)^N = \mathrm{Tr}\big(WW^T\big)^N = \mathrm{Tr}\big(W^T W\big)^N = \mathrm{Tr}\Big(\tilde{T}^{1D}\Big)^N \tag{15}
$$

と書くことができる。このとき、自由エネルギーは

$$
f^{1D} = -\frac{1}{N\beta}\ \ln\left[\mathrm{Tr}\Big(\tilde{T}^{1D}\Big)^N\right] \tag{16}
$$

となり、これを数値計算することを考える。

サイト数 $N(= 2^{N_{\mathrm{itr}}})$ が十分大きいとき、転送行列を毎回掛け合わせていくと時間がかかるため、$\tilde{T}$ から $\tilde{T}^2$ を計算し、次に $\tilde{T}^4, \tilde{T}^8, \tilde{T}^{16}, \ldots$ と計算していくのが効率が良い。しかし、これだと途中で桁溢れを起こしてしまうことがあるので、規格化してやらなければならない。例えば、x 回繰り返したところで規格化して、

$\tilde{T}^X = \alpha\tilde{\tilde{T}}^X$ $(X := 2^x)$ とした場合、自由エネルギーは

$$f^{1D} = -\frac{1}{N\beta}\ln\left(\mathrm{Tr}\,\tilde{T}^N\right) \tag{17}$$
$$= -\frac{1}{N\beta}\ln\left(\mathrm{Tr}\left(\tilde{T}^X\right)^{N-X}\right) \tag{18}$$
$$= -\frac{1}{N\beta}\ln\left(\mathrm{Tr}\left(\tilde{\tilde{T}}^X\right)^{N-X}\right) - \frac{N-X}{N\beta}\ln\alpha \tag{19}$$

で与えられる。実際の計算では、毎回規格化を行う。

1.3 自由エネルギーのサンプルコード

逆温度 $\beta = 2.0$、相互作用 $J = 1.0$、サイト数 $N = 2^{N_{\mathrm{itr}}} = 2^{20} \sim 10^6$ のときの自由エネルギーを求めるサンプルコード (`1D_Ising_model.py`) を用意した。例えば以下のように実行すると、

```
python3 1D_Ising_model.py
```

厳密解 (exact) と行列積から求めた解 (calculation) を計算し、その差分 (error) も計算してくれる。

```
exact -1.009074963958905 calculation -1.0090749639589047 error 2.220446049250313
    e-16
```

1.4 課題

周期境界条件下の一次元古典イジング模型のハミルトニアンに外部磁場を加えた、

$$H^{1\mathrm{D}} := -J\sum_{i=0}^{N-1} S_i S_{i+1} - h\sum_{i=0}^{N-1} S_i \tag{20}$$

についても同様にできるので、計算してみて欲しい。

References

[1] 西森秀稔, 「相転移・臨界現象の統計物理学」, 培風館, (2005).

[2] Chen, Bin-Bin and Gao, Yuan and Guo, Yi-Bin and Liu, Yuzhi and Zhao, Hui-Hai and Liao, Hai-Jun and Wang, Lei and Xiang, Tao and Li, Wei and Xie, Z. Y., “Automatic differentiation for second renormalization of tensor networks”, Phys. Rev. B **101**, 220409 (2020).