

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 月 31 日現在

機関番号：14501

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2016

課題番号：25400401

研究課題名(和文) エネルギースケール変形のテンソルネットワーク形式による繰り込み群解析

研究課題名(英文) Renormalization group analysis of energy-scale deformation by means of tensor-network formulations

研究代表者

西野 友年 (Nishino, Tomotoshi)

神戸大学・理学研究科・准教授

研究者番号：00241563

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,000,000円

研究成果の概要(和文)：エネルギースケール変形を受けた幾つかの格子模型について、その状態をテンソルネットワーク形式を使って数値的に求め、エンタングルメント・エントロピーの振る舞いを解析した。弱く双曲的に曲がった2次元格子上のイジングモデルでは、相転移が平均場的であり、相関長が曲率半径程度に抑えられることが判明した。古典ハイゼンベルグ模型の臨界現象が、離散化の方法によって1次転移、コスタリッツ・サウレス転移など、様々に変化することも判明した。また、エネルギースケール変形の拡張として、自己相似性を持つフラクタル格子状の相転移を解析する計算手法も開発した。加えて、励起の空間的な進行を追う動的窓の手法も提唱した。

研究成果の概要(英文)：We investigated several types of lattice models under the energy scale deformation, where the local interaction strength is modulated slowly compared with the lattice constant, by means of numerical calculation assisted by the tensor network formulations. From the obtained thermal equilibrium states, behavior of entanglement entropy is analyzed with respect to temperature and parameters. In case of Ising model on hyperbolic lattices, which has a small negative curvature, its critical behavior is mean-field like, and the correlation length is bounded around the curvature radius even at the phase transition point. In the study of discrete Heisenberg model on two-dimensional lattice, various types of phase transitions are observed according to the manner of discretization. For example, we observed 1st order phase transition, and the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless one, etc. We have also developed numerical methods for fractal systems and for tracing wave packets on 1D lattice.

研究分野：計算物理学

キーワード：エネルギースケール変形 テンソルネットワーク形式 繰り込み群 エンタングルメント 双曲格子  
相転移 臨界指数 エントロピー

## 1. 研究開始当初の背景

ハミルトニアンが並進対称性を持つ系において、基底状態や熱平衡状態が並進対称性を持つかどうかは、非自明な問題として長く研究されて来た。電荷密度波やその整合・不整合がよく知られた例である。一方で、基底状態が並進対称であっても、ハミルトニアンまでもが一樣であるとは断定できない。例えばスピン系の AKLT 模型では、ボンド毎に相互作用の強さが異なっているにもかかわらず、基底状態は並進対称な Valence Bond Solid (VBS) 状態である。このように、ハミルトニアンの一様性と状態のそれは、区別して考えるべき概念である。

物理系の数値解析に視点を移すと、ハミルトニアン基底固有状態を求める計算においては、有限サイズ効果の軽減が一つの課題である。Vekic と White は、物理系の境界付近で、ハミルトニアンを構成する相互作用項の係数を徐々に小さくして行く、スムーズな境界条件という概念を 1993 年に提唱し、その有効性を 1 次元量子系で確認した。我々はこの考え方を更に進めて、系全体で相互作用項が空間的にゆっくりと変化しつつ、境界でゼロへと減衰して行く「球変形」について、試行計算を行なってみた。その結果として、エネルギースケールの変形関数として、正弦関数の 2 乗を用いると境界効果が完全に消失することを、幾つかの 1 次元系で確認した。また、この正弦 2 乗変形の下では、系の両端が互いに強くエンタングルしていることも判明した。これが、本研究の発端である。

空間的に緩やかなエネルギースケール変化を受けたハミルトニアンについて、固有状態に対する変形の影響を検証するには、比較的大きなサイズの系を取り扱う必要がある。従って、自由フェルミ系など特殊な例外を除けば、ハミルトニアンの対角化による数値解析手法は現実的でない。この、計算量の問題を解決する手段としては、密度行列繰り込み群 (DMRG) 手法と、その発展として近年発展著しい、テンソルネットワーク形式が有用である。

以上の通り、一樣な物理系から少しだけ離れた非一樣系に関心が広がり、また、これに応える数値計算手法が蓄積されていたことが、本研究の背景である。

## 2. 研究の目的

ハミルトニアンが局所的な相互作用の総和で表される低次元量子系や、対応する古典統計系において、相互作用の強さが空間的に緩やかに変化するエネルギースケール変形を考え、基底状態や熱平衡状態の一様性が保たれるかどうか、また、相関やエンタングルメントがどのような変形を受けるかを解析することが、本研究の主目的である。また、変形関数にパラメータとして含まれる特徴的な長さのスケールが、状態側に反映される

かも検証して行くべき問題である。

エネルギースケールの変形には、様々な種類のものが考え得る。最も単純な場合が指数関数的な空間変化であり、これは Wilson が不純物問題に対して導入した「対数離散化」から得られる格子模型と同等の性質を持つものである。この「指数変形」の場合には、変形前の物理系が Gapless であったとしても、指数の減衰長の定数倍が基底状態の相関長として現れることが知られている。指数的な変形の延長として、変形関数が双曲余弦関数である場合について、指数変形と同様に相関長の制限が生じるかどうか、まず本研究で確認して行くべき課題である。

発展的には、エネルギースケールの空間変化が「多スケールの」累重している状況もまた、研究の対象として考えて行きたい。ランダム系やフラクタル系が、この代表的な場合である。また、以上の解析を推進するために必要な、テンソルネットワーク形式を用いた数値計算技法の開発も、それ自身が重要な研究目的の一つである。

## 3. 研究の方法

まず手始めに、数値解析の手段であるテンソルネットワーク形式について、研究目的で取り上げた、それぞれの物理系に対して応用する方法について検討を行う。特に、繰り込み群的な計算の過程で「自然に得られるエンタングルメント」を持つ、物理的な側面について考察し、これを状態の解析のために有効活用する手順を確立して行く。

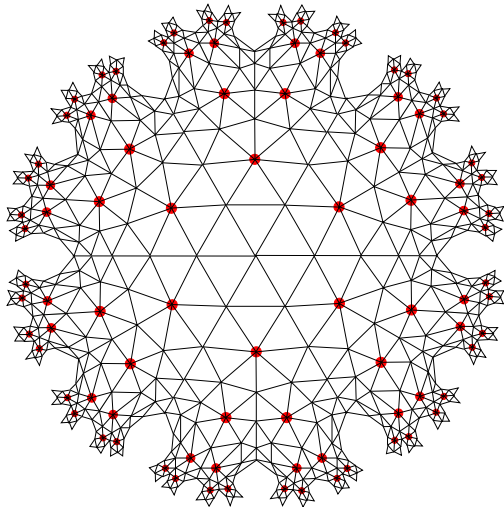
具体的には、角転送行列を用いた密度行列繰り込み群である「角転送行列繰り込み群」の手法や、高次特異値分解を用いた「テンソル繰り込み群」の手法を、格子系へと適用しつつ、系の相転移の前後、特に臨界領域でエンタングルメントが示す特異性を検出し、スケール解析を行って行く。また、基底状態からの励起の、空間的な移動を長時間追跡する「動的窓形式」についても、この原理と応用について、一般化の可能性を探る。

このように、解析手段そのものは数値的ではあるが、エネルギースケール変形が系に与える影響の物理背景について、研究目的に述べた目標に沿って、分析を進めて行く。

## 4. 研究成果

エネルギースケール変形を受けた系を中心として、以下の通り研究の成果が得られている。更なる進展の方向にも触れつつ、以下の通り報告する。

(1)まず、論文[4]では弱く双曲的に曲がった格子上での相転移を取り扱った。次の図のように三角格子に対して、規則的に 7 分岐の格子点を挿入して行けば、比較的弱く双極的に曲がった 2 次元格子を作ることができる。



この格子は再帰的な構造を持っており、負の曲率半径が、7分岐点間の距離に比例することを、容易に示すことができる。この格子上のイジング模型を、相転移解析の対象とすることにした。なぜならば、双極格子上の古典統計モデルに対応する1次元量子系を、量子・古典対応を通じて推察すると（解析的な詰めが甘い所はあるが）双極的に変形された1次元量子系が対応していると考えられるからである。

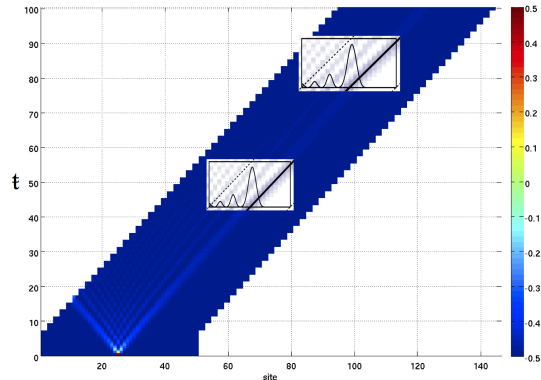
角転送行列繰り込み群手法を用いて、この双曲格子模型を解析した結果、相転移の次数は2次であり、相転移直上での臨界指数は平均場的なものであることが判明した。これは、系のハミルトニアンの中に「格子の形を通じて内在している」曲率半径という長さのスケールが、臨界領域で相関関数の伸展を阻害しているからだと、素朴に考えることができる。角転送行列を用いて相関長を求めることは可能であるが、より簡便な検証方法として、エンタングルメント・エントロピーが相関長の対数に比例する事実を用いることにした。同エントロピーは、角転送行列の4乗である密度行列の固有値から計算できるのだ。そして、求めたエンタングルメント・エントロピーは予想通り、曲率半径の対数に比例していた。

転移温度から離れた温度領域では、イジング普遍性に従う臨界現象が観測された。つまり、相関長が曲率半径に届かない範囲では平面格子的な振る舞いが見られ、曲率半径と比較し得る長さになった時点で、平均場的な振る舞いへと、臨界現象の乗り換えが起きるわけである。なお、平均場的な振る舞いは、双曲格子のハウスドルフ次元が無限大であることに起因していることが、従前の研究より判明している。

(2)論文[3]では、基底状態が行列積で記述される1次元量子系について、局所的な量子操作によって発生した励起が格子を上をすすんで行く状況を、「波乗り」しつつ追跡する計算手法を開発した。計算の方法は、iTEBD法の

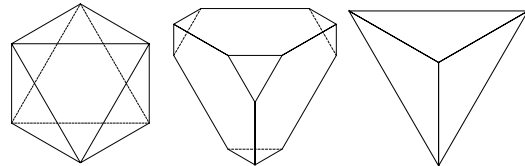
転送行列演算を、波の先端に追跡するようにシフトして行くだけである。

下図は、強磁性的な1次元量子スピン系の、完全に偏極した基底状態（強磁性状態）に対して、ある場所で瞬間的にスピン反転を行なった後のスピン偏極を、時間に対して追跡して図示したものである。発生した励起は左右に同じ速度(Spin Velocity)で進んで行き、スピン変極の乱れは「光円錐」の内側でのみ生じる。この図では、右側へと進んで行く波について、その先端の追跡を行なった。



このように、長時間追跡が可能である背景には、「波の先端部分ではエンタングルメントの時間的な増大が起きない」という物理事実がある。今後は、エネルギースケール変形された格子中を進む波束について、その時間変化を動的窓の手法を使って解析して行く予定である。特に、信号がなるべく反射されて戻って来ない境界条件の設定が、信号処理の道具としては重要である。

(3)論文[1]では、古典離散ハイゼンベルグ模型として知られている、4面体模型と8面体模型を包含する、切頭4面体模型（図参照）の相図と臨界現象を、角転送行列繰り込み群を用いて解析した。相転移の検出にはエンタングルメント・エントロピーが相境界で特異な振る舞いをするを利用した。



8面体模型は従来、2次相転移すると考えられていたが、精密な計算を改めて行っていると、実は1次転移であることが判明した。この事情は、ポッツ模型が5状態以上で1次転移することに、似ているものとも推察できる。一方で、4面体模型の臨界指数は、数値計算の範囲内では共形場模型から予測される値とずれており、コストリッツ・サウレス転移の存在と、それによるスケージングの補正が存在することが強く示唆された。

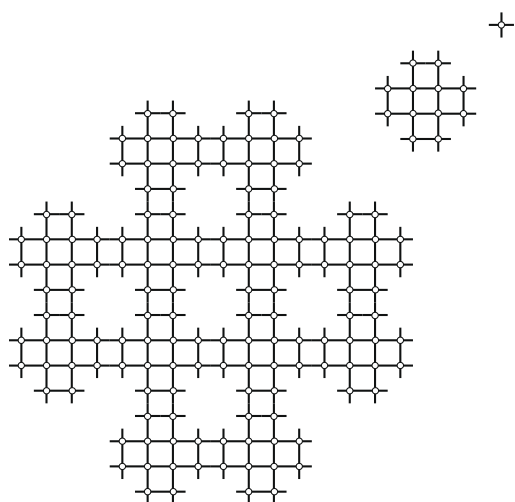
4面体と8面体を補完する、切頭4面体的な状況の下では新たな低温相が存在することがわかり、相図は4つの異なる相から構成

されていることが判明した。今後の発展として、様々な準正多面体の対称性を持つ離散ハイゼンベルグ模型の臨界現象を確定して行くことと、これらを双曲格子に乗せた場合に、幾何学構造が与える影響を探ることを計画している。

(4)前項に関連して、6 状態クロック模型の臨界現象についても、エンタングルメント・エントロピーを用いた有限サイズ・スケーリング解析を行い、コストリッツ・サウレス転移の転移温度を推定した。スケーリング解析にあたっては、同転移に特徴的な対数補正を含むスケーリング関数を用い、転移温度については 2 桁ほどの数値精度を確保することができた。

一方で、エンタングルメント・エントロピーのピーク位置を手掛かりにして有限サイズ・スケーリングを行なった結果、スケーリング関数自体の導出が不明確なものになってしまった。実際は、グラフの肩の位置がサイズ毎に一致するべきであると考えられ、ベイズ統計等を用い、これまでに得られたデータを解析し直す必要がある。これらの計算結果については、arXiv:1612.07611 として取りまとめているが、このような理由もあり、論文としては掲載に至っていない。追加的な解析を、今後行なって行く。また、弱く双曲的に曲がった格子上にクロック模型を置く方法による「有限曲率スケーリング」についても、検討して行きたい。

(5)エネルギースケールに階層を持つという意味において、フラクタル的な構造を持つ物理系もまた、エネルギースケール変形を受けたものであると考えることができる。フラクタル構造は、例えば下図のような再帰的に構成され、部分と全体に相似関係があるものだ。



フラクタル格子には様々な種類があるが、図に示した構造の場合には、TERG 法と呼ばれる実空間繰り込み群手法が有効に使える。我々は、イジング模型について、高次特異値分解を用いた TERG 法 (論文[5]参照) によ

て、この系の比熱を求めた。(論文[2]参照) その結果は、比熱が特に何の特異性も示さないように見えるものであった。しかし、詳細にデータ解析を行ってみると、弱い特異性が比熱に内在されており、相転移点で比熱の温度微分が発散していることが判明した。

このようにして検出された相転移の臨界指数は、共形場理論から導かれる、2次元系のそれとは全く異なる値であり、このフラクタル系の臨界現象が2次元系の普遍性を持っていないことが判明した。相転移自体は存在しているので、臨界次元の1次元よりも高い次元の臨界現象であることは確実であるが、繰り込み群の流れから有効的な空間次元を割り出すことについては、今後の課題となっている。

フラクタル格子上での相転移解析を行う手段が確立できたことから、ボツツ模型、クロック模型など、様々な模型について同様に相転移解析を行って行く道筋が見つかったことになる。この方向へと、数値解析を継続して行く予定である。また、相互作用がフラクタル的な変調を受けた系や、フラクタル上でスムーズなエネルギースケール変形が存在する場合についても、解析を進めて行く。

(6)エトワーズ・アンダーソン模型に代表される、スピングラス系の模型は、様々な距離のエネルギースケール変調が重なったものであると見ることができる。ランダムネスの下で、系が持つエンタングルメント・エントロピーが、どのような振る舞いを示すかは、大変興味深い問題である。

より単純な模型として、2次元Jイジング模型の相転移解析を、TEBD法によって試験的に解析した。その結果として、強磁性相と常磁性相の間では、エンタングルメント・エントロピーに特異性が現れることが、これまでに判明している。(学会発表[4]) 内部エネルギーに何の特異性も生じない、いわゆる西森ポイント直上で、同エントロピーの特異性が確認できることは、自由エネルギー自体には「西森ポイント上であっても」特異性が残っていることを示唆している。

今後は、エンタングルメント・エントロピーのマルチスケールな構造を、ランダム系に自動的に対応するよう改造された MERA 形式を使って求め、ランダムネスに起因するエンタングルメントの発達とその機構について、試験的な研究を進めて行く予定である。

(\*)最後に、エネルギースケール変形について、最近の国内の動向について触れておく。境界効果を完全に消去する正弦2乗変形の特質は、実は共形場理論で良く知られたモジュラーハミルトニアンを使って説明できることが、奥西らによって明らかにされた。また、有限サイズ効果を低減する手法としての正弦2乗変形は、堀田らによってカゴメ格子



反強磁性量子スピン系の解析に用いられ、期待された通り、2次元量子系の基底状態解析に有用であることが確認されている。エネルギースケール変形についての研究は、今後更なる広がりを見せるものと期待している。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 5 件)

[1] R. Krcmar, A. Gendiar, and T. Nishino, “Phase diagram of a truncated tetrahedral model”, Phys. Rev. E94, 022134 (2016) [査読有]

[2] J. Genzor, A. Gendiar, and T. Nishino, “Phase Transition of the Ising Model on Fractal Lattice”, Phys. Rev. E98, 012141 (2016) [査読有]

[3] V. Zauner, M. Ganahl, H.G. Everts, and T. Nishino, “Time Evolution within a Comoving Window”, J. Phys: Cond. Matt. 27, 425602 (2015) [査読有]

[4] A. Gendiar, M. Daniska, R. Krcmar, and T. Nishino, “Mean-Field Universality Class Induced by Weak Hyperbolic Curvatures”, Phys. Rev. B90, 012122 (2014) [査読有]

[5] H. Ueda, K. Okunishi, and T. Nishino, “Doubling of Entanglement Spectrum in Tensor Renormalization Group”, Phys. Rev. B89, 075116 (2014) [査読有]

[学会発表](計 12 件)

[1] 西野 友年, “行列積状態からテンソルネットワークへ：形式と発展”, 日本物理学会, 2017.3.18, 大阪大学(大阪府)

[2] 西野 友年, “6状態クロック模型のBKT転移を、エンタングルメントから眺めてみれば、あまのかぐやま”, 日本物理学会, 2017.3.17, 大阪大学(大阪府)

[3] T. Nishino, “Entanglement Entropy of  $q=6$  Clock model”, TNSAA2016, 2016.12.12, 新竹大学(台湾)

[4] 笹川 佳則, 西野 友年, “+Jランダムイジングモデルのエンタングルメント・エントロピー”, 日本物理学会, 2016.9.17, 金沢大学(石川県)

[5] 西野 友年, “正方格子イジングモデルに空いた穴の周りのエンタングルメント”, 日本物理学会, 2016.9.14, 金沢大学(石川県)

[6] T. Nishino, “Renormalization Group Transformation applied to Interaction-Round-a-Face (IRF) Model”, DMRG Technics, 2015.6.23, Natal (Brasil)

[7] 西野 友年, “Higher Order Tensor Renormalization Group (HOTRG) によるフラクタル Ising 模型の相転移解析”, 日本物理学会, 2016.3.19, 東北学院大学(宮城県)

[8] T. Nishino, “Sine Square Deformation”, Numerical and Analytical Methods, 2014.9.10, CSPP Benasque (Spain)

[9] T. Nishino, “Plackett type local weight and tensor product state”, TNSAA, 中国科学院(北京)

[10] 西野 友年, “私は Vertex、あなたは IRF、テンソルネットワークも好き好き”, 日本物理学会, 2015.3.21, 早稲田大学(東京都)

[11] T. Nishino, “The most distant sites are neighbors under the sine square deformation”, Numerical Many Body Methods, 2013.12.9, Orange County Coorg (India)

[12] T. Nishino, “What should be Approximated in RG Schemes applied to Statistical Models?”, Tensor Network Algorithms, 2013.5.16, ETH Zurich (Swiss)

[図書](計 2 件)

[1] 西野 友年, 日本評論社、お理工さんの微分積分 (2016) 304

[2] 西野 友年, 講談社、今度こそわかる量子コンピューター (2015) 206

[その他]

ホームページ等

<http://quattro.phys.sci.kobe-u.ac.jp/dmrg.html> (密度行列繰込み群及びテンソルネットワーク形式についてのプレプリント集)

#### 6. 研究組織

(1) 研究代表者

西野 友年 (NISHINO, Tomotoshi)

神戸大学・大学院理学研究科・准教授

研究者番号：00241563

(\*) 海外研究協力者

Andrej Gendiar

Independent Researcher

Slovak Academy of Sciences

Roman Krcmar

Researcher

Slovak Academy of Sciences