

令和 2 年 6 月 2 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K05576

研究課題名(和文) テンソルネットワークを用いた非平衡定常系の数値的研究

研究課題名(英文) Numerical study of non-equilibrium systems by tensor network methods

研究代表者

原田 健自 (Harada, Kenji)

京都大学・情報学研究科・助教

研究者番号：80303882

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：伝染病の伝搬や乱流の発生など様々な物理現象の背後に共通する普遍性の理解を進めるために、これらの時間発展する非平衡系を数値的に安定して計算する手法を、量子情報分野で考案されたテンソルネットワークをベースにして開発した。さらに新手法を用いて、前記の非平衡系を単純化した有向浸透現象モデルに適用し、情報量の1種であるレニーエントロピーを評価し、この現象の特徴である吸収状態との関連を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

テンソルネットワークは量子情報分野のツールでこれまでに主に平衡系の研究に用いられてきた。我々は、時間発展する非平衡系においても、この手法は有効で、従来法では得ることが難しい量を計算することができることを示した。例えば、系の複雑さを表す平均情報量は従来のモンテカルロ法では求めることが困難であるが、そういった量もテンソルネットワークでは計算することが可能になる。この特性を利用して、多くの物理現象と関係のある有向浸透現象の情報量的特性を明らかにした。

研究成果の概要(英文)：To study the common feature behind various phenomena such as the spread of infectious diseases and the turbulence, we propose new numerical methods for the time-evolving non-equilibrium systems. They are based on a tensor network in the field of quantum information. We apply them to the directed percolation problem, which simplifies the phenomena mentioned above. We find the behavior of the informational quantity, as the Renyi entropy is hardly related to the absorbing state's existence.

研究分野：計算物理

キーワード：有向浸透現象 テンソルネットワーク 非平衡定常状態 レニーエントロピー 吸収状態相転移 有向浸透ユニバーサリティクラス 繰り込み群

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) 外場下の相互作用する粒子の拡散、疫病の伝搬、方向性のある浸透現象、結晶面の成長等、時間発展する相互作用系に出現する非平衡定常状態については、これまでに、解析解や数値シミュレーションの活用により、その理論的理解が大きく進んできたが、多くの未解決問題が残されている。特に従来法を超える数値的手法の開発は重要である。

(2) 量子系のエンタングルメント構造をコンパクトに記述するテンソルネットワークの活用が量子物性などの基底状態(平衡状態)の研究では進んできたが、非平衡系研究への活用はほとんど行われていない。

2. 研究の目的

(1) テンソルネットワークを用いた非平衡系に適した新手法の開発

1次元テンソルネットワークと関連する密度行列繰り込み群法の非平衡系の適用においては非エルミート作用素の扱いが必要となった。同様に、テンソルネットワークをベースにした新手法においても、数値的不安定化の低減を図りつつ、非平衡系のためのテンソルの非対称性への対応を進める。また、空間2次元の非平衡系で必要になる3次元テンソルネットワークを効率的に取り扱う手法を開発する。

(2) 非平衡定常状態の特徴付けと相転移現象の解明

平衡系においては、エンタングルメント構造など情報論的視点に立脚した定常状態の特徴付けが近年行われ発展してきている。非平衡系においても、古典量子対応を参考に、エンタングルメント構造に着目した非平衡定常状態の特徴付けの研究を進める。特に、非平衡系の揺らぎに関するスケールリング、及び、非平衡定常状態間の相転移現象、特に臨界現象について、テンソルネットワークの特性を生かした研究を行い、その普遍性を明らかにする。

3. 研究の方法

(1) テンソルネットワーク法の非平衡系のための高度化

平衡系の臨界現象では、テンソル繰り込み群法やテンソルネットワーク繰り込み群法の活用が盛んである。非平衡系では、時間発展作用素に時間方向の非対称性があるため、そのままでは適用できない。非対称テンソルでも精度を維持したテンソルネットワーク上の実空間繰り込み群法を開発を行う。

(2) 非平衡定常状態の高精度計算とテンソルネットワークを用いた特徴づけ

排除体積効果を持つ相互作用粒子の外場の下での拡散モデル(非対称単純排他過程)と疫病の伝搬から乱流の消滅など様々な物理現象を表す有向浸透現象モデルに、本研究計画で開発するテンソルネットワーク法を適用し、その非平衡定常状態や相転移現象の新しい特徴づけを研究する。

4. 研究成果

(1) エンタングルメント分岐の提案

量子状態のテンソルネットワーク表現では、量子状態中のエンタングルメント構造がネットワーク中の枝上のエンタングルメントフローで表現されていると考えられている。しかし、行列積状態のような単純な1次元テンソルネットワーク以外では、テンソルネットワーク中のエンタングルメントに関しては、ループエンタングルメント構造など複雑なエンタングルメント構造も考えられるため、その扱いは容易ではなかった。

そこで、我々は、テンソルネットワーク中のエンタングルメントフローの分岐をするエンタングルメント分岐作用素の導入を提案した。また、このエンタングルメント分岐作用素の最適化は、参照テンソルネットワークのノルム最適化という形で実現できることを示した。

この新しい作用素により、エンタングルメントフローの扱いを容易にし、様々な新しい特性を従来のテンソルネットワーク法に加えることができる。

例えば、この新しい作用素を導入することで、臨界現象の数値計算精度を向上させたテンソルネットワーク

繰り込み群のループエンタングルメント消去と同等の効果を、高次元化が容易な高次特異値分解テンソル繰り込み群法に導入することができ、臨界現象の解析精度の大幅な向上を達成できた。

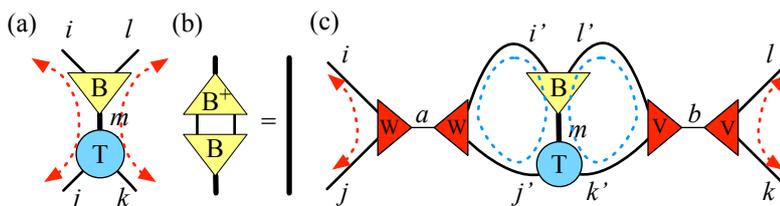


図1. (a) (b)エンタングルメント分岐作用素 B . (c)参照テンソルネットワーク。

(2) 非平衡系の情報論的エントロピーの評価

平衡系では、最近、情報量などに着目した研究が新しい理解をもたらしている。そこで、我々は、非平衡系での平均情報量の数値的評価を初めて試みた。

1次元非平衡系として代表的な有向浸透現象は、Domany-Kinzel セルオートマトンとしてモデル化されることが多い。この系は、伝搬確率などのパラメータを調整することで、活性要素が完全に消失した吸収状態に長時間極限で到達する吸収相から活性要素が残る活性化相に相転移を起こすことが知られている。さらに、この相転移は連続的（臨界的）で、多くの関連モデルや現象（疫病の伝搬、乱流）に共通する普遍性を示すことが知られている。このような非平衡系における普遍性は理論的には非常に重要であるが、まだその理解があまり進んでいない。

我々は、有限サイズの1次元セルオートマトンの状態確率分布を1次元テンソルネットワークで表現し、その時間発展を射影演算子を用いて近似計算した。状態確率分布のテンソルネットワーク表現を用いることで、シャノンエントロピーを拡張した情報量の1種であるレニーエントロピーを安定して評価することができるようになった。

(3) 1次元有向浸透現象でのレニーエントロピー

テンソルネットワーク法を用いることで、有向浸透現象におけるレニーエントロピーは活性要素密度のように秩序変数として振る舞うことがわかった。具体的には、活性相でのみ0以上の値に収束し、収束値は吸収状態相転移点（臨界点）から連続的に立ち上がる。また、臨界点での時間発展はベキ減衰で、その指数は時間方向と空間方向の相関長の発散を表す臨界指数の比である動的臨界指数 z の逆数になった。

さらに、活性相において、レニーエントロピーにカusp（特異点）が存在することも数値的に示した。通常の秩序変数では、カusp点において、特異性はなく、これはレニーエントロピーによって初めて検知された有向浸透現象の特徴の一つである。また、このカuspは有向浸透現象モデル全般に存在することも数値的に示した。

我々はレニーエントロピーの臨界緩和と活性相におけるカuspの存在は、吸収状態の存在という有向浸透現象の基本的特性のみその根拠があることを、状態確率分布に対する現象論的仮説に基づき説明した。この研究成果により、秩序変数の存在が知られていない非平衡系においても、レニーエントロピーなどの情報論的量を用いることで有向浸透ユニバーサルリティクラスの存在を検証できる方法を提示し、吸収状態転移の新しい側面を明らかにした。

(4) 非平衡系のためのテンソル繰り込み群法の改良

状態確率分布の時間発展を直接計算する上で述べた手法以外に、我々はテンソル繰り込み群法の改良についても研究を行った。特に、時間方向の非対称性を考慮し、斜交射影を用いたテンソル繰り込み群法を提案した。1次元系では、上で述べた直接的時間発展法と同等の精度を示すことがわかった。さらに、無限系の計算を行うことができるなど、非常に有用であることがわかった。しかし、2次元以上の系では、計算量のオーダーが大きく、近似精度を挙げた場合の実用的な計算手法として活用することができないこともわかった。上で述べた直接的手法でも、1次元テンソルネットワークのようなカノニカル形式が2次元以上のテンソルネットワークにはないために計算精度に関して同様の問題がある。従って、2次元以上の系でのテンソルネットワークに関しては、テンソルネットワークを用いた計算手法のさらなる改良が必要であることがわかった。

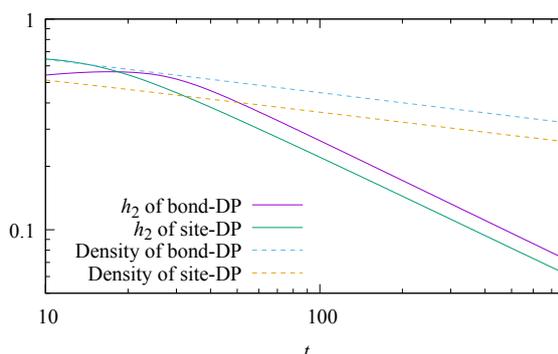


図2. ボンド・サイト有向浸透現象におけるレニーエントロピーの臨界緩和。

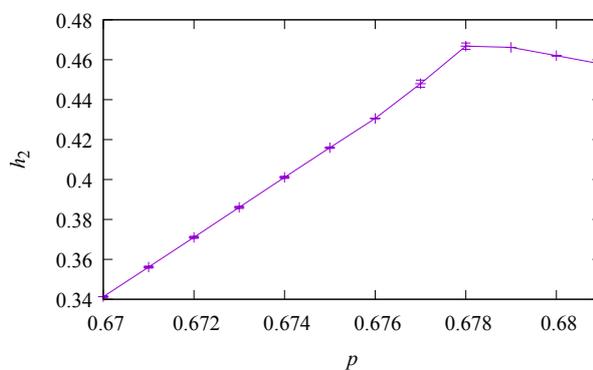


図3. ボンド有向浸透現象モデルでのレニーエントロピー。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Kenji Harada and Naoki Kawashima	4. 巻 123
2. 論文標題 Entropy Governed by the Absorbing State of Directed Percolation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physcal Review Letters	6. 最初と最後の頁 90601
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevLett.123.090601	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kenji Harada	4. 巻 97
2. 論文標題 Entanglement branching operator	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 45124
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.97.045124	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計18件（うち招待講演 4件 / うち国際学会 7件）

1. 発表者名 Kenji Harada
2. 発表標題 Tensor network technique for stochastic process
3. 学会等名 Computational Approaches to Quantum Many-body Problems（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kenji Harada
2. 発表標題 Informational aspect of directed percolation problem
3. 学会等名 Computational Approaches to Quantum Many-body Problems（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鈴木佳奈
2. 発表標題 斜交射影を用いたテンソル繰り込み群によるセルオートマトンシミュレーション
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 原田健自
2. 発表標題 強く非等方的な臨界点における不変性
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kenji Harada
2. 発表標題 New numerical approaches for directed percolation
3. 学会等名 Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) 2019-2020 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 原田健自
2. 発表標題 エンタングルメント分岐とその活用
3. 学会等名 物性研短期研究会「量子情報・物性の新潮流」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 原田健自
2. 発表標題 エントロピーを用いた(1+1)次元有向浸透現象の動的過程の特徴付け
3. 学会等名 日本物理学会 2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kenji Harada
2. 発表標題 Entropy of the (1+1)-dimensional directed percolation
3. 学会等名 International Conference on Advances in Physics of Emergent orders in Fluctuations (APEF2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kenji Harada
2. 発表標題 Entropy of the (1+1)-dimensional directed percolation
3. 学会等名 Tensor Network States: Algorithms and Applications (TNSAA) 2018-2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kenji Harada
2. 発表標題 Entropy of the (1+1)-dimensional directed percolation
3. 学会等名 APS March Meeting 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 原田健自
2. 発表標題 吸収状態に支配される有向浸透現象のエントロピー
3. 学会等名 日本物理学会 第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鉦落佳奈
2. 発表標題 テンソルネットワークによる有向浸透現象の数値的研究
3. 学会等名 日本物理学会 2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 星野佑樹
2. 発表標題 有向浸透現象におけるエントロピーのモンテカルロ計算
3. 学会等名 日本物理学会 第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 原田健自
2. 発表標題 テンソルネットワークを用いた1次元非平衡モデルの時間発展シミュレーション
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 原田健自
2. 発表標題 Entanglement Branching and Tensor Renormalization Group
3. 学会等名 研究集会「テンソルネットワークスキームとテンソル計算ソフトウェアの周辺」
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 原田健自
2. 発表標題 エンタングルメント分岐を用いたテンソル繰り込み群
3. 学会等名 日本物理学会 2017 年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kenji Harada
2. 発表標題 Entanglement branching operator
3. 学会等名 Novel Quantum States in Condensed Matter 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kenji Harada
2. 発表標題 Tensor Network Approach to Non-Equilibrium Systems
3. 学会等名 International Symposium on Fluctuation and Structure out of Equilibrium 2017
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

研究紹介 http://www-np.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~harada/study.html

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----