

平成 30 年 6 月 4 日現在

機関番号：82401

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2013～2017

課題番号：25800221

研究課題名(和文)高次特異値分解によるテンソルネットワーク状態の最適化 量子系への応用

研究課題名(英文)Optimization of tensor network state using higher order singular value decomposition

研究代表者

上田 宏(Ueda, Hiroshi)

国立研究開発法人理化学研究所・計算科学研究機構・研究員

研究者番号：40632758

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,100,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では1次元量子/2次元古典多体系の解析に効果的である行列積状態の高次元系への拡張として議論されるテンソルネットワークを利用した手法の高度化を通じて、「高次特異値分解を利用したテンソル繰り込み群に現れるエンタングルメントスペクトル構造の解析」、「1次元フラストレート量子スピン系並びに高い対称性を持つSU(n)[n=3,4]スピン系における対称性に守られたトポロジカル相の同定」、「飽和磁場近傍に特化した実空間・スピン空間の対称性を考慮した厳密対角化法の開発」、そして「角転送行列繰り込み群を利用したエンタングルメントスケール解析の拡張」に成功した。

研究成果の概要(英文)：The tensor network method is an extension of the matrix product method, which is a powerful tool to analyze one-dimensional quantum / two-dimensional classical multi-body systems, and is applicable for high dimensional systems. In this study, through the sophistication of the tensor network method, we have succeeded in "Structural analysis of the entanglement spectrum in the tensor renormalization group using the higher-order singular value decomposition", "Identification of symmetry-protected topological phases in one-dimensional frustrated quantum spin systems and SU(n)[n = 3 and 4] spin systems", "Development of the exact diagonalization method adapted the symmetry of real space and spin space which is specialized for calculating low-energy states in the vicinity of saturation field", and "Generalization of entanglement scaling analysis using the corner transfer-matrix renormalization group method".

研究分野：計算物理

キーワード：密度行列繰り込み群 テンソルネットワーク 量子スピン系 古典スピン系 量子相転移 スケール解析 高次特異値分解 量子古典対応

1. 研究開始当初の背景

低次元フラストレート量子系は、幾何学的にフラストレートする相互作用と強い量子揺らぎの共存によって多彩な秩序状態が発現する舞台として注目されており、その基底状態・低エネルギー励起状態を平均場の取り扱いを超えて非摂動的に解析する試みが盛んに行われている。近年、(擬)1次元フラストレート量子系の解析に極めて有効な密度行列繰り込み群(DMRG)の変分状態である行列積状態を表現する形式の自然な拡張として、量子情報の分野で議論される量子多体系のエンタングルメントの概念を取り入れた「テンソルネットワーク(TN)法」が提案されている。本手法はモンテカルロ法などがタッチできない格子模型への適用が可能のためから低次元量子スピン系・電子系の静的・動的性質の解析への応用が有望視され、多くの研究者によりその最適化並びに具体的な模型への適用が試みられてきた。

2. 研究の目的

このような背景のもと、本研究ではTN法を利用して、2次元量子スピン系の基底状態および低エネルギー励起状態を精密に取り扱うための数値計算手法の構築を最終目的とする。そのためのステップとして、特に、「高次特異値分解(HOSVD)」と呼ばれるテンソル分解法を利用したTN法の動作原理を量子古典対応から明らかにする。併せて、実験的に合成された物質系の有効模型に対しての適用&解析も行っていく。その際、近年議論が盛んな「対称性に守られたトポロジカル(SPT)相、SPT相転移」という観点から相分類を行う。

3. 研究の方法

本研究ではDMRG法、角転送行列繰り込み群(CTMRG)法、HOSVDを利用したテンソル繰り込み群(HOTRG)法、厳密対角化法の計算コードを、Fortran90を利用して独自に作成し、スピン相関関数、せいてきこう1次元量子系/2次元古典系に現れる非自明な相転移の解析を行う。計算の実行は、本研究課題の研究費で調達したワークステーションに加えて、必要に応じて所属機関・部署が所有するクラスターマシン、スーパーコンピュータ(HOKUSAI@理研和光本所、京@理研計算科学研究機構)を利用した。

4. 研究成果

まず本研究では、HOTRGが多体系の臨界的性質の高精度解析を達成する物理的背景を、実空間繰り込みを議論するうえで欠かすこと出来ない「エンタングルメント構造の役割」と「量子古典対応」の観点から議論し

た。具体的には、HOTRGの繰り込みの固定点に現れるエンタングルメントスペクトルの解析を2次元古典/1次元量子イジング模型で行った。その結果以下の2点を明らかにした：(1)非臨界系では繰り込み変換に関連するスペクトルの固定点はBaxterの角転送行列の直積から得られるスペクトルと一致、(2)臨界系においてはHOTRGの固定点は既知のDMRGやMPSを利用した手法の固定点と異なり、非自明なエンタングルメント構造を持つ[上田, 奥西, 西野, PRB 89, 075116 (2014)]。

次に、擬1次元量子多体系に現れる自発的対称性の破れを記述する秩序変数で特徴づけ困難なSPT相/相転移を検出するためのiDMRG法(TN法的一种)を自作し、これを擬1次元銅酸化物に現れる低温での磁性を有効的に表す模型として知られるフラストレートスピン $S=1/2$ XXZジグザグ交替鎖及び双1次・双2次交換相互作用を持つSU(3)スピン鎖の基底状態解析に適用した。その結果、フラストレートスピン鎖に存在する2つの実空間反転を破ったダイマー相間に現れる連続相転移が時間反転対称性によって守られたSPT相転移であることを明らかにし、エンタングルメントエントロピー(EE)の示すスケールング則から共形場理論のセントラル・チャージ $c=1$ で特徴づけられる臨界性を持つ相転移であることを明らかにした[上田, 小野田, PRB 89, 024407 (2014)]。また、SU(3)鎖に現れる $Z_3 \times Z_3$ 対称性によって守られた Z_3 SPT相とダイマー相の間に連続相転移が存在し、EEの示すスケールング則から $c=16/5$ で特徴づけられる非自明な臨界性が現れることを明らかにした[森本, 上田, 桃井, 古崎, PRB 90, 235111 (2014)]。

TN法の高度化を推し進めるためには、スピン空間や実空間の対称性を同時に考慮していくことが肝要である。そのための予備的な研究として、2次元量子スピン系の飽和磁場付近の解析に特化した数値対角化手法を作成した。これを利用して、先行研究において最大108サイトの対角化の計算で消失が示唆された三角格子上のスピン $1/2$ 量子XXZ模型の飽和磁場近傍における量子相に関して、最大1296サイトの対角化計算を実施することで、量子相消失の示唆の手続きに誤りがあることを示すことに成功した[山本, 上田, 他4名, PRB 96, 014431 (2017)]。

また本研究では、2次元古典系の相転移近傍においてTN法的一种であるCTMRGを実施することで相転移の臨界性とシミュレーション精度の関係を明らかにし、秩序変数に頼らずに1次元量子多体系並びに2次元古典系の臨界現象を正確にとらえるためのスケールング手法を開発した。2次元正方格

子上の離散化されたハイゼンベルグ模型 (正 20 面体模型) の統計力学的性質を角転送行列及び本研究課題で開発したスケーリング理論を用いて解析し, 2 次元共形場理論のミニマル模型で説明できない非自明な秩序・無秩序の 2 次相転移が存在することを明らかにした [上田, 奥西, 西野, PRE **96**, 062112 (2017)].

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 6 件)

(1) Hiroshi Ueda, Kouichi Okunishi, et.al., “Critical behavior of the two-dimensional icosahedron model”, Phys. Rev. E **96**, 062112 (2017), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.96.062112> [査読有].

(2) Daisuke Yamamoto, Hiroshi Ueda, et. al., “Exact diagonalization and cluster mean-field study of triangular-lattice XXZ antiferromagnets near saturation”, Phys. Rev. B **96**, 014431 (2017), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.014431> [査読有].

(3) Hiroshi Ueda and Shigeki Onoda, “Symmetry-protected topological phases and transition in a frustrated spin-1/2 XXZ chain”, Phys. Rev. B **90**, 214425 (2014), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.214425> [査読有].

(4) Takahiro Morimoto, Hiroshi Ueda, Tsutomu Momoi, and Akira Furusaki, “ Z_3 symmetry-protected topological phases in the SU(3) AKLT model”, Phys. Rev. B **90**, 235111 (2014), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.235111> [査読有].

(5) Hiroshi Ueda, Kouichi Okunishi, and Tomotoshi Nishino, “Doubling of entanglement spectrum in tensor renormalization group”, Phys. Rev. B **89**, 075116 (2014), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.075116> [査読有].

(6) Hiroshi Ueda and Shigeki Onoda, “Vector-spin-chirality order in a dimerized frustrated spin-1/2 chain”, Phys. Rev. B **89**, 024407 (2014), DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.024407> [査読有].

[学会発表](計 31 件)

(1) 国際会議招待講演 8 件

Hiroshi Ueda, “Classical analogue of finite entanglement scaling around the criticality”, Novel Quantum States in Condensed Matter 2017, 2017/10/27.

Hiroshi Ueda, “Real-space parallelization for infinite-size density matrix renormalization group”, Fourth Workshop on Tensor Network States: Algorithms and Applications, 2016/12/12.

Hiroshi Ueda, Real-space parallel “infinite-size density matrix renormalization group”, International Workshop on Tensor Networks and Quantum Many-Body Problems (TNQMP2016), 2016/6/27.

Hiroshi Ueda, “Matrix product state in symmetry protected topological phases”, 10sor network workshop --- Field 2 x 5 joint workshop on new algorithms for quantum manybody problems ---, 2015/5/14.

Hiroshi Ueda, “Doubling entanglement spectrum of tensor renormalization group”, CMSI International Symposium 2013 Extending the power of computational materials sciences with K-computer, 2013/10/22.

Hiroshi Ueda, “Fixed-point tensors in tensor renormalization group with higher order singular value decomposition”, CMSI Kobe International Workshop 2013: Recent Progress in Tensor Network Algorithms, 2013/10/17.

Hiroshi Ueda, “Field-induced gapped vector-chiral phase in a dimerized spin-1/2 XXZ zigzag chain”, SWISS-JAPAN WORKSHOP 2013 Trends in the Theory of correlated Systems, 2013/10/3.

Hiroshi Ueda and Shigeki Onoda, “Symmetry-protected topological phases and gapped vector-spin-chirality phases in a dimerized spin-1/2 XXZ zigzag chain”, NCTS Workshop on Quantum Condensation (QC13), 2013/8/29.

(2)国内会議招待講演 1 件

上田宏, “1次元ランダム系に対するDMRGと実空間並列DMRGの共通点”, 密度行列繰り込み群法における最近の展開, 2015/8/25

(3)その他国際会議講演 9 件

(4)その他国内会議講演 13 件

〔その他〕

(1) ホームページ

https://researchmap.jp/hiroshi_ueda

6. 研究組織

(1)研究代表者

上田 宏 (UEDA Hiroshi)

国立研究開発法人理化学研究所・計算科学

研究機構・研究員

研究者番号: 40632758

(2)協力研究者

西野 友年 (NISHINO Tomotoshi)

神戸大学・理学研究科・准教授

研究者番号: 00241563

奥西 巧一 (OKUNISHI Kouichi)

新潟大学・自然科学系・准教授

研究者番号: 30332646

丸山 勲 (Maruyama Isao)

福岡工業大学・情報工学部・准教授

研究者番号: 20422339