

高次テンソル繰り込み群を用いた

モノマー・ダイマーモデルの統計力学的研究

大塚 高弘、阿久津 泰弘
大阪大学 大学院理学研究科

1. はじめに

統計力学は、多数の粒子や要素が引き起こす集団的な振る舞いを追求する学問である。例えば、水が温度変化によって水蒸気（気体）や氷（固体）に状態変化する相転移現象などもこの範疇である。統計力学では、分配関数と呼ばれる基本的な量を決定することによって、様々な熱力学的性質を求めることが可能である。そのため、対象とするモデルの分配関数の計算は一つの重要な課題であるが、解析的に計算できる場合は限られており、数値的なアプローチを活用する必要がある。

統計力学分野において、3次元古典系や2次元量子系などの高次元系における分配関数の数値計算は古くからの課題であった。2次元系においては、密度行列繰り込み群[1, 2]が一つの確立された手法ではあるが、高次元への適用は困難である。そのため、様々な高次元系へ適用可能な手法開発の試みが行われてきた。その一つとして挙げられるのが、変分法を基本とした手法である projected entangled pair state (PEPS) [3, 4]である。PEPSの高次元系への適用が進む一方で、実空間繰り込みによるスケール変換に基づくテンソル繰り込み群解析 (Tensor Renormalization Group: TRG) [5]が開発された。TRGの中でも近年開発された高次テンソル繰り込み群 (Higher Order TRG: HOTRG) [6]は、高次元系への適用が可能な枠組みであり、新たな高次元解析の基盤としての期待が高まっている。しかし、現状 HOTRG の数値的な実用例は少数であるとともに、素朴にアルゴリズムを適用すると、コンピュータのメモリー消費量が莫大となるという課題を抱えており、完全な実用化には移行できていない状況にある。

本研究では、メモリー大量消費問題を回避すべく、

HOTRGの並列化プログラムの構築を行った。また、3次元古典系の一例であるモノマー・ダイマーモデルに適用を行い、エントロピーの測定や臨界現象の議論を行った。

2. 数値計算手法：高次テンソル繰り込み群

ここでは、高次テンソル繰り込み群(HOTRG)の基本的なアルゴリズムのレビューと本研究で開発をおこなった並列化アルゴリズムの説明を行う。

2.1 高次テンソル繰り込み群のアルゴリズム

HOTRGの基本的なアルゴリズムを磁性体の基本的なモデルである2次元イジングモデルを例に説明する。イジングモデルのハミルトニアンは、

$$\beta H = -K \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_{i+1}$$

であり、分配関数は以下のように与えられる。

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H}$$

ただし、 K は結合定数、 $\langle i,j \rangle$ は再近接に関する和、 $\{\sigma\}$ はスピンに関する和を表す。この分配関数を例に以下に手順を示す。

(1) 分配関数を局所テンソル表示する

分配関数を格子点上に定義されるテンソルの積に分解する (図1参照)。

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{\sigma\}} \prod_i T_{x_i x'_i y_i y'_i}$$
$$T_{x_i x'_i y_i y'_i} = \sum_{\alpha} W_{\alpha, x_i} W_{\alpha, x'_i} W_{\alpha, y_i} W_{\alpha, y'_i}$$

$$W = \begin{pmatrix} \sqrt{\cosh \beta} & \sqrt{\sinh \beta} \\ \sqrt{\cosh \beta} & -\sqrt{\sinh \beta} \end{pmatrix}$$

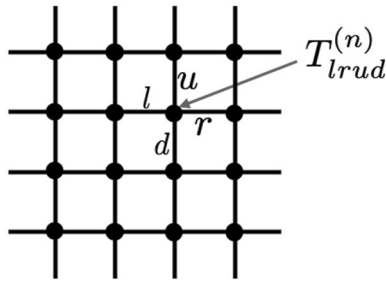


図 1. 分配関数の局所テンソル表示

(2-a) 縦方向の隣接するテンソルの縮約 (テンソル和) をとる (図 2 参照)

$$M_{XX'yy'} := \sum_i T_{x_1 x'_1 y i} T_{x_2 x'_2 i y'}$$

($X = x_1 \otimes x_2, X' = x'_1 \otimes x'_2$)

図 2. 隣接する局所テンソルの縮約

(2-b) 縦方向の縮約後の成分数を削減する

記憶成分数の発散を回避するため、高次特異値分解により成分削減を行う (図 3)。高次特異値分解については本節にて後述する。

$$T_{xx'yy'}^{(\text{new})} = \sum_{XX'} P_{xX} P_{x'X'} M_{XX'yy'}$$

図 3. 高次特異値分解による成分数削減

(3) 横方向に対しても同様に(2)のプロセスを行う

(4) (2)~(3)を収束するまで繰り返す

以上が HOTRG の大まかなプロセスである。3次元への拡張は、縮約の方向を増やすだけである。

(2-b)で用いた高次特異値分解について説明する。通常の特異値分解では与えられた行列に対し、異なる2つのユニタリ行列を用いて対角化を行う。従来のテンソル繰り込み群では[7]、特異値を大きい順に

並べて、分配関数に対する寄与度が大きいものを保持することで近似を行う。HOTRG は特異値分解の一般化である高次特異値分解を基礎とする。高次特異値分解は、一般のテンソルに対して以下のように定義される。

$$M_{lrud} = \sum_{efgh} S_{efgh} U_{le}^L U_{rf}^R U_{ug}^U U_{dh}^D$$

S_{efgh} はコアテンソルと呼ばれ、順序構造や直行性を持つことから、特異値の一般化に対応する。このコアテンソルのノルムによって基底の寄与度が決定される。このように、行列に対してではなくテンソルに対して直接定義されるため、高次元への拡張が可能となる。

2.2 並列化アルゴリズム

HOTRG は、アルゴリズム自体の高次元化は比較的容易であるが、実用上消費メモリが莫大であるという課題がある。本研究では、繰り込み操作におけるテンソル成分の一部に対して並列化を行うことで、使用メモリの削減を行った。

3次元におけるテンソルの縮約操作では、メモリ保持が必要な成分数は最大で D^{10} まで到達する (図 4 参照)。ただし、 D はテンソルの1つの方向の成分数を示す。

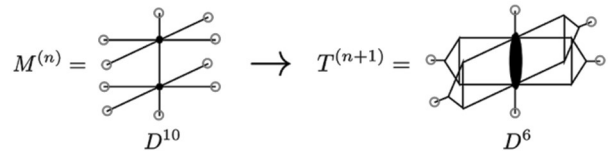


図 4. 3次元でのテンソルの縮約における保持成分。赤丸で示した成分の保持が必要。

そこで、縮約操作、特異値分解による成分数削減において関与しない成分を計算機の別のコアに振り分け並列化を行った (図 5 参照)。

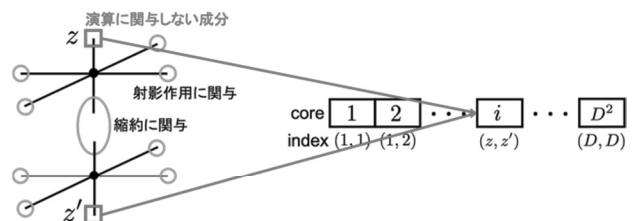


図 5. 並列化の概念図 (z 方向の縮約の例)

この工夫により、使用メモリを D^2 分減少させることができた。

3. モノマー・ダイマーモデルの概要

モノマー・ダイマーモデルは、格子にモノマーとダイマーを重ねることなく敷き詰めるモデルである (図 6 参照)。

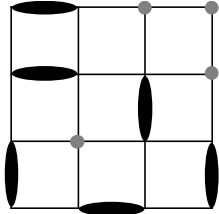


図 6. モノマー・ダイマーモデル (2次元の例)

モノマーが存在しない場合のモデルを特にダイマーモデルと呼ぶ。これらのモデルは非常に単純であるが、様々な興味深い性質を持つ。例えば、ダイマーモデルはイジングモデルと一対一の関係を持つことや[8]、物理量に特異性が現れる臨界的な性質を示すことが知られている[9]。

モノマー・ダイマーモデルの分配関数は、モノマー密度を制御するパラメータであるモノマー重み z を用いて以下のように与えられる。

$$\Xi_N(z) = \sum_{s=0}^N w_N(s) z^s$$

$w_N(s)$ は N 個の格子点に $(N-s)/2$ 個のダイマーと s 個のモノマーを配置する場合の数を表す。この分配関数の値は、2次元ダイマーモデルにおいてのみ解析解が知られており、一般的にモノマーが存在する場合や3次元系においては解析解が知られていない。

そこで、本研究では3次元ダイマーモデルの分配関数 (エントロピー) の測定および、モノマー・ダイマーモデルの臨界現象の解析を目標とした。

4. 3次元モノマー・ダイマーモデルの解析結果

4.1 ダイマーモデルのエントロピー測定

2.2節で導入した並列化アルゴリズムを3次元ダイマーモデルに適用することで、エントロピー測定を行った (図 7 参照) [11]。

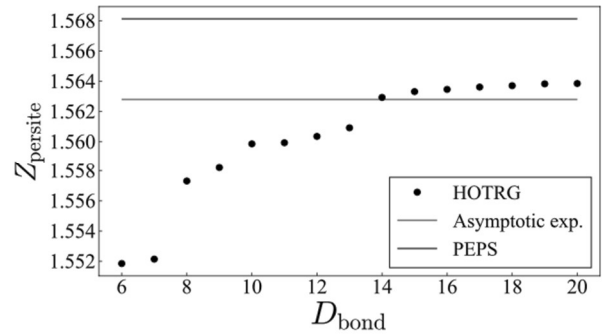


図 7. 3次元ダイマーモデルにおける1格子あたりの分配関数の値[11]。横軸は高次特異値分解における基底留保数。赤線は漸近展開法による近似計算値[12]、青線は数値計算による計算値[13]。

我々のHOTRGによる計算値は、高次特異値分解における基底留保数 D_{bond} に対して単調増加かつ一定値に収束していく振る舞いが見えている。そのため、分配関数、および、エントロピー $(\log \Xi_N)/N$ の高精度解析ができていると考えられる。エントロピー値は $D_{bond} = 20$ のもので0.44715である。

4.2 モノマー・ダイマーモデルの臨界現象の解析

本研究で対象としている3次元立方格子のダイマーモデルは臨界性を示す[14]。そこで、モノマー密度が有限な場合を考え、モノマー重みに対するエントロピーの振る舞いを解析した。臨界点近傍では特異性を反映して、物理量の冪乗からのずれ (臨界指数) が現れるため、その測定を目標とした。測定結果は図 8 に示す通りである。

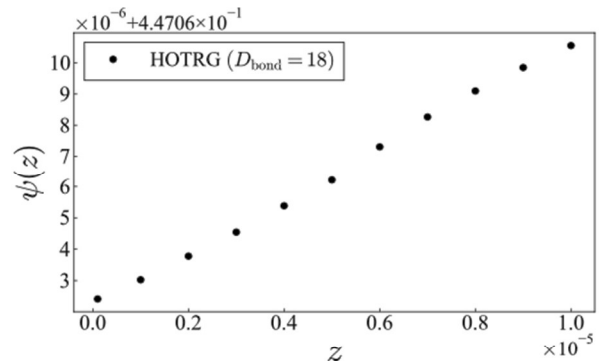


図 8. 3次元モノマー・ダイマーモデルにおけるエントロピーのモノマー重み依存性。

エントロピーの振る舞いは臨界性を反映して線形

からのずれを示していることがわかる。しかし今回の解析では、臨界指数を正確に決定するためには精度が不十分であった。今後、特異値の分布解析等によるモノマー・ダイマー系での精度向上の可能性の検討や、HOTRG における留保基底数を増やした計算などを行う必要がある。

5. おわりに

本研究では、高次元系に適用可能な数値計算手法である高次テンソル繰り込み群の最適化、および、3次元モノマー・ダイマーモデルへの実用を行った。並列化アルゴリズムの導入により、課題であった消費メモリの低減を行うことができ、より実用化に向けた進歩を遂げた。実際に、3次元ダイマーモデルのエントロピーの高精度測定にも成功した。一方で、モノマー・ダイマーモデルの臨界現象の議論には未だ精度が不十分という結果であった。そのため、精度向上に向けた方策を今後練る必要がある。

参考文献

- (1) Steven R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992); Steven R. White, Phys. Rev. **B 48**, 10345 (1993).
- (2) T. Nishino, J. Phys. Soc. Jpn. **64**, 3598 (1995).
- (3) Y. Hieida, K. Okunishi and Y. Akutsu, New. J. Phys. **1**, 7 (1999); T. Nishino, Y. Hieida, K. Okunishi, Y. Akutsu and A. Gendiar, Prog. Theor. Phys. **105**, 409 (2001); A. Gendiar, N. Maeshima and T. Nishino, Prog. Theor. Phys. **110**, 691 (2003).
- (4) A. Gendiar, N. Maeshima and T. Nishino, Prog. Theor. Phys. **110**, 691 (2003).
- (5) M. Levin and C. P. Nave, Phys. Rev. Lett. **99**, 120601 (2007).
- (6) Z. Y. Xie, J. Chen, M. P. Qin, J. W. Zhu, L. P. Yang, and T. Xiang Phys. Rev. **B 86**, 045139 (2012).
- (7) M. Levin and C. P. Nave, Phys. Rev. Lett. **99**, 120601 (2007).
- (8) P. W. Kasteleyn, J. Math. Phys. **4**, 287 (1963); M. E. Fisher, J. Math. Phys. **7**, 1776 (1966); C. Fan and F. Y. Wu, Phys. Rev. **B2**, 723 (1970).
- (9) P. W. Kasteleyn, J. Math. Phys. **4**, 287 (1963); M.E.Fisher and J.Stephenson, Phys. Rev. **132**, 1411 (1963).
- (10) P. W. Kasteleyn, Physica **27**, 1209 (1961); H. N. V. Temperley and M. E. Fisher, Philos. Mag. **6**, 1061 (1961); M. E. Fisher, Phys. Rev. **124**, 1664 (1961).
- (11) T. Otsuka and Y. Akutsu, J. Phys. Soc. Jpn. **91**, 055003 (2022).
- (12) J. F. Nagle, Phys. Rev. **152**, 190 (1966).
- (13) L. Vanderstraeten, B. Vanhecke and F. Verstraete, Phys. Rev. **E 98**, 042145 (2018).
- (14) D. A. Huse, W. Krauth, R. Moessner, and S. L. Sondhi, Phys. Rev. Lett. **91**, 167004 (2003).