

令和6年度修了

時空間圧縮技術に基づく多軌道電子フォノン系
のための量子不純物ソルバー開発と応用

埼玉大学大学院
理工学研究科 物質科学専攻 物理学 PG
学籍番号 23MS113

石田洋音

指導教員 品岡寛 准教授

概要

強相関電子系と呼ばれる物質群では、電子間の強い量子もつれに起因した非自明な物性が見られる。特に、スピン・電荷と他の自由度が強く結合した複合系は、銅酸化物系や重い電子系の非従来型超伝導など興味深い物性が現れる。強相関電子系を扱う理論的な枠組みとし動的平均場理論 (DMFT) が普及している。DMFT は動的な相関効果を扱う平均場理論であり、Mott 絶縁体など強相関電子系特有の現象を理論的に記述できる。しかし、平均場近似された系 (不純物系) であっても依然多体系であるため解くのは難しい。数値的にも多くの計算コストが要求される問題である。不純物系を数値的に解くために、通常は高次摂動項のモンテカルロ積分に基づく連続時間量子モンテカルロ法 (CT-QMC) が用いられるが、多自由度複合系への適用は CT-QMC の深刻な負符号問題のため、高対称な系など簡単な問題に限られる。そのため、CT-QMC とは異なる指導原理に基づく手法が求められている。

近年、Tensor Cross Interpolation (TCI) と呼ばれる、関数の時空間依存性を圧縮するテンソルネットワーク (TN) 法に基づく能動学習アルゴリズムにより、負符号問題を回避しながら高次積分可能なことが分かってきた [1, 2]。これらの先行研究をきっかけに不純物問題への応用が進んだが、未だ単軌道系などの低自由度系に留まっている。その根本的原因是、既存の連続時空間の離散化法では関数に潜む低ランク構造を正確に捉えられないことである。また、既存の TCI では積分次数が高くなるにつれ、関数の重要な構造を適切に学習できなくなる問題点 (Ergodicity problem) も指摘されており、これも広い応用を妨げる一因である。

一方、TCI とは独立した TN 法として、連続時空間を真の低ランク構造を持つ TN 形式に離散化する方法である quantics 表現が注目されている。quantics 表現により量子多体系の相関関数が低ランク構造を持つことが明らかにされた [3]。TCI と quantics 表現を組み合わせた先行研究 [4] では、低次元空間ではあるが、TCI により高速に quantics 表現の低ランク構造を反映した TN を構成できることが示された。

本研究では、quantics 表現と TCI を組み合わせた手法を基に多軌道電子フォノン複合系の解析を行った。問題点として指摘されていた高次元での不安定性を取り除くために、TCI アルゴリズムの改良を行い、より安定的な動作を実現した。そして、多軌道電子フォノン複合系の Feynman ダイアグラムの低ランク構造を明らかにし、高速な多次元積分が可能であることを示した。

目次

第 1 章	序論	6
1.1	強相関電子系の数値計算：現状と課題	6
1.2	テンソルネットワーク法の近年の進展	7
1.3	本研究の目的	10
1.4	本論文の構成	10
第 2 章	動的平均場理論	12
2.1	有効模型によるアプローチ	12
2.1.1	電子相関の効果	13
2.1.2	Hubbard モデル	14
2.2	動的平均場理論	15
2.3	量子不純物問題	17
2.3.1	反復摂動法	17
2.3.2	厳密対角化法	18
2.3.3	連続時間量子モンテカルロ法	18
第 3 章	テンソルネットワーク	19
3.1	行列分解と低ランク近似	19
3.1.1	特異値分解	20
3.1.2	行列の低ランク近似	20
3.2	テンソルネットワークの定義と基本事項	22
3.2.1	テンソルの定義	22
3.2.2	テンソルネットワーク	24
3.2.3	テンソル分解	26
3.3	Tensor train	27
3.3.1	TT の構成方法	29
3.3.2	TT 形式での計算: ボンド次元と計算量	31

3.3.3	TT 形式の和と積分	32
第 4 章	Quantics tensor train	35
4.1	連続的な関数のテンソル化	35
4.2	Quantics 表現の Tensor train	36
4.2.1	2 進数分解に基づくテンソル化	36
4.2.2	Quantics tensor train	37
4.2.3	多変数への拡張	37
4.3	低ランク構造	38
4.4	QTT で圧縮できる例	39
4.5	QTT 形式の Riemann 和	41
第 5 章	Tensor cross interpolation	42
5.1	Cross interpolation	42
5.1.1	Matrix cross interpolation	42
5.1.2	Partially rank-revealing LU 分解	45
5.2	Tensor cross interpolation 公式	46
5.2.1	TCI の特徴	47
5.2.2	Tensor cross interpolation の定義	47
5.2.3	ピボットリストの入れ子条件	49
5.3	局所的なピボット探索アルゴリズム	50
5.4	ピボットの挿入	51
5.4.1	ピボット挿入アルゴリズム	52
5.4.2	Ergodicity problem	52
第 6 章	テンソルネットワークの場の量子論への応用	54
6.1	不純物ソルバー	54
6.1.1	単軌道不純物問題の高次摂動展開	55
6.1.2	金属-絶縁体転移の記述	56
6.2	Quantics 表現 + TCI	59
6.3	先行研究で残る課題	60
第 7 章	多軌道電子格子モデルの低ランク構造	61
7.1	本研究のモチベーション	61
7.2	問題設定	61
7.2.1	フラーレン化合物の超伝導	61

7.2.2	Jahn-Teller-Hubbard モデル	62
7.2.3	Green 関数	63
7.2.4	2 次自己エネルギーの QTT 表現と内部自由度の和	65
7.2.5	自己無撞着計算	66
7.3	安定的な TCI アルゴリズム	67
7.3.1	大域ピボット探索	67
7.3.2	局所探索 + 大域探索	70
7.4	計算結果：1 次自己無撞着計算	70
7.5	計算結果：2 次自己エネルギー	71
7.5.1	Cross section	72
7.5.2	TCI の収束性	73
7.5.3	ボンド次元	73
7.5.4	インデックスの順序による影響	74
7.6	計算結果：Ergodicity problem	74
第 8 章	結論	76
付録 A	線形代数の補足	77
付録 B	Green 関数法	85
付録 C	中間基底とスパースサンプリング	91
付録 D	多軌道電子格子モデルの計算条件	95

第 1 章

序論

1.1 強相関電子系の数値計算：現状と課題

バンド理論は物性物理学の研究において大きな成功を納めた理論の一つである．特に，バンド計算の手法として用いられることの多い密度汎関数理論 (Density functional theory: DFT)[5, 6] は，多くの金属 [7] や半導体 [8]，絶縁体 [5] で基底状態の計算が可能である．

しかし，バンド理論だけでは理解が難しい例も見つかっている．有名な例として，DFT は半導体のエネルギーギャップを過小評価してしまうことが知られている [8–10]．また，NiO などの遷移金属の酸化物はバンド理論が破綻する物質群として有名である [11]．これらの物質群は，実験的に絶縁体になることが知られている．しかし，遷移金属の 3d 軌道は部分的にしか占有されていないため，バンド理論からは金属的な振る舞いをする予想される．このような，バンド理論からは金属的とされるが，実際は絶縁体となる物質は Mott 絶縁体と呼ばれている [12, 13]．遷移金属酸化物以外でバンド理論と実験が異なる結果を示す物質は，4f 電子が伝導に寄与する重い電子系 [14] や鉄系超伝導体 [15] などが知られている．

バンド理論の帰結と実際の物質での振る舞いの間の乖離は，電子相関の影響によるものである．バンド理論は，Coulomb 相互作用を一つの電子が感じる平均的なポテンシャルとして近似する一体近似である．Coulomb 相互作用の遮蔽が効く場合，Coulomb 相互作用のエネルギーに対して電子の運動エネルギーが相対的に大きくなるため，一体近似が正確な結果を与える．しかし，3d, 4f 軌道など局在性の強い軌道の電子は運動エネルギーが小さくなり，さらに局在性ゆえに強い Coulomb 反発を受ける．そのため運動エネルギーと相互作用のエネルギーが拮抗し一体近似が破綻する．このような電子相関の影響が大きな系を強相関電子系という．

強相関電子系の難しさは，電子の遍歴性を担う運動エネルギーと，局在性を担う

Coulomb 相互作用のエネルギーが競合することにある．このことをシンプルに表すモデルとして，Hubbard モデルが知られている [16]．Hubbard モデルのハミルトニアンは電子の遍歴性を表す項と局在性を表す項の 2 種類の項で構成されており，それぞれの強さを表すパラメータ t, U の大小により，金属から絶縁体への Mott 転移を記述できる．Hubbard モデルはシンプルなモデルでありながら，強相関電子系の性質を探るために重要であり，現在でも盛んに研究されている．しかし，Hubbard モデルの 2 種類の項はそれぞれ正反対の性質を担うため，両者を同時に扱うことは，解析的にはもちろん数値的にも難しい問題である．

動的平均場理論 (Dynamical mean field theory: DMFT) は，Hubbard モデルを数値計算により近似的に解くアプローチとして提案された [17]．DMFT では元の格子系の一部を周りの自由度を表す媒質に不純物として埋め込み，格子系と不純物系を自己無撞着に解く．この方法により，局所的な電子相関を正確に取り入れた解析が可能になる．DMFT により，Mott 転移の理論的記述に成功した [18]．

DMFT により，局所的な電子相関を取り入れた解析が可能にはなるが，数値的にはいまだ難しい問題がある．DMFT の自己無撞着計算の中で，最も大きなボトルネックは，不純物系を解く部分である．この部分を計算する手法は不純物ソルバーと呼ばれ，数値繰り込み群法 [19]，厳密対角化法 [20]，密度行列繰り込み群法 [21–23]，連続時間量子モンテカルロ法 [24–26] など，様々な方法が考案されている．特に連続時間量子モンテカルロ法は，不純物ソルバーとして汎用的な方法であり，応用例も多数存在する．しかし，問題の系によって負符号問題と呼ばれる計算量が指数的に増大してしまう問題が現れることにより，適用できる系には制限がある．特に，現実物質に近い多くの自由度を持つ系は負符号問題が深刻になることが知られている [27–31]．近年，量子モンテカルロ法に替わる新たな手法として，テンソルネットワーク学習法を利用した方法が提案された [1, 2]．

1.2 テンソルネットワーク法の近年の進展

テンソルネットワークとは多次元配列 (テンソル) で表される対象を，小さなテンソルの積に分解し効率的に扱う数値的手法の総称である．テンソルが低ランク構造と呼ばれる性質を持つ場合，より少ない要素数のテンソルネットワーク形式により巨大な情報を現実的な計算リソースで扱うことが可能になる．そのため，物理学や情報科学など巨大なデータを取り扱う必要のある幅広い分野に応用されている．

テンソルネットワークの情報科学分野での利用として，画像処理への応用を紹介する．カラー画像とは，2 次元状に配置された各ピクセルに RGB に対応する 3 組の数値が割り当てられた 3 次元テンソル形式で表される．カラー映像の場合は時間経過順にカラー画像を並べるため 4 次元テンソルとなる．高解像度の画像や長時間の映像はそれだけ巨大な

データとなり、様々な画像処理が困難である。このようなデータは典型的に低ランク構造を有することが経験的に知られており [32], テンソル分解によりパラメータを削減しより少ない情報量で表現できる。多次元データを少数のパラメータで表現するテンソルネットワーク法は、大規模データを効率的に扱うことができる点から、機械学習の学習モデルとしても利用される [33] など、応用の幅は広い。

物理学の研究において、テンソルネットワーク法に基づくアプローチとしては、1992 年 White による密度行列繰り込み群 (Density Matrix Renormalization Group: DMRG)[34–37] や (実空間) テンソル繰り込み群 (Tensor Renormalization Group: TRG)[38] がよく知られている。

DMRG は 1 次元量子系の基底状態を求める手法である。波動関数 $|\Psi\rangle$ とハミルトニアン $\mathcal{H}$ をテンソルネットワークで近似し、変分法に基づきエネルギー期待値 $E = \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle$ を最小化するよう逐次的に波動関数をアップデートする。1 次元系の場合、 $|\Psi\rangle$ を表すテンソルネットワークは典型的に高い圧縮性を持つ。そのため大きな系の情報を少ない情報量で表現し、効率的な基底状態の探索が可能である。

TRG は古典統計モデルの分配関数を計算する方法である。分配関数は系の大きさ程の多数の Boltzmann 因子の縮約として表現される。縮約を実行するための計算量は、系のサイズに対して指数的に増加する。TRG では、テンソルネットワークを利用した繰り込み変換によって系の粗視化を行う。系のサイズが $N = 2^n$ であるような格子系を TRG では、一度の繰り込み変換で系のサイズは $1/\sqrt{2}$ 倍される。また、繰り込み変換の際にテンソル分解を行い、系の性質に重要な情報のみを残す近似を行うことで情報の圧縮を行う。繰り込みによる $1/\sqrt{2}$ 倍のスケール変換と情報圧縮を繰り返すことで、最終的に小さい情報量しか持たない 1 サイト系にまで問題のスケールが変換される。TRG はこのようにして、テンソルネットワーク法の情報圧縮を利用することで、大きな系の問題を小さな系の問題に変換し分配関数を計算する。

DMRG と TRG のどちらもテンソルネットワーク法の情報の圧縮性を利用している。さらに、DMRG で $\mathcal{H}|\Psi\rangle$ を計算するように、テンソルネットワーク法は圧縮形式を保ったまま演算を実行することもできる。このような性質があることから、近年では本質的に離散自由度を持つ系への応用を超え、連続的な場の理論への利用が盛んに研究されている。ここでは連続的な場の理論への応用事例として、本研究でも用いる Quantics Tensor Train (QTT), Tensor Cross Interpolation (TCI) を中心にいくつか紹介する。

QTT とは、連続的な自由度を 2 進数表示 (quantics 表示) に基づき離散化し、多変数関数を多次元テンソル化するための方法、およびそのテンソルの分解形式である [39]。2 進数表現の各桁は指数的に異なるスケールを表す。そのためいくつかの長さスケールが混在する関数の場合、スケールごとに情報を分離することができる。乱流は異なる長さスケールが混在する典型的な例である。文献 [40] では、QTT を用いた流体シミュレー

ションを行った。流体計算では空間中で定義された速度場を離散化し偏微分方程式 (ここでは非圧縮性 Navier-Stokes 方程式) を解く。Quantics 表現により長さスケールを分離することに成功し、計算量のスケーリングの観点で、従来の計算手法 (Direct Numerical Simulation) より高い性能を示すことが示された。特に Reynolds 数が大きな場合、従来法と比べ指数的に効率的になる。

Quantics 表現は空間や時間の長さスケールが分離可能であるという仮説に基づく手法である。そのため、応用範囲は流体計算にとどまらず広範に及ぶ。文献 [3] は、QTT 場の量子論に適用した事例である。1 粒子, 2 粒子の相関関数について、実時間, 虚時間, 実周波数, 松原周波数, 波数などの依存性を quantics 表現により離散化し QTT を構成する。これら量子系の相関関数は、異なるスケール間の相関が小さくスケールの分離が可能であることが示された。Quantics 表現により高い圧縮性を実現し、Fourier 変換の実行、Dyson 方程式や Bethe-Salpeter 方程式の効率的に解くことが可能である。

一方、巨大なテンソルからの適応的な要素のサンプリングにより圧縮形式のテンソルネットワークを構成する方法として TCI が知られている。特に多次元積分など指数的に多くの要素が必要とされる計算において、次元の呪いを回避できる手法として強力である [41]。TCI の物理への応用も、多次元積分に利用するものが多い。場の理論では、粒子同士の相互作用を摂動として扱い、求める物理量を相互作用について摂動展開する。摂動の各項を評価するためには多次元の積分が必要であり、摂動次数が高くなると積分変数も増加する。文献 [1] では、非平衡量子不純物問題の実時間 Green 関数を相互作用で摂動展開する。そして、TCI を用いて各摂動項の被積分関数の圧縮表現を求め、高次積分を実行する。このような高次摂動の評価に従来用いられる量子モンテカルロ法 (Quantum Monte Carlo: QMC) と比較し、TCI が QMC に比べサンプリング点数に対する積分の収束性が高いことが示された。また、文献 [2] ではこの方法を不純物問題に適用し、TCI を DMFT の不純物ソルバーとして利用した。この結果得られた虚時間 Green 関数は、従来法である連続時間量子モンテカルロ法で得られる結果に比べて高精度であることが示された。しかし、摂動次数が高くなることで TCI で探索する空間が指数的に大きくなるため、探索に失敗し、重要な構造を見落とす問題点 (Ergodicity problem) が指摘されている [1, 2]。

さらに、quantics 表現されたテンソルから TCI を用いて TT を推定する複合的な手法も研究されている。文献 [4] では quantics TCI を 2 次元格子系に適用し、Green 関数の波数依存性を圧縮している。圧縮された TT 形式の Green 関数はチャーン数の計算に用いられ、圧縮形式を保ったまま積分可能である。

また、1 粒子の相関関数を超えて、多粒子相関関数へ適用する試みもある。一般に高次相関関数は非常に大きな計算コストを伴う。そのため効率的に圧縮する方法が重要である。文献 [42] は、量子系の相関関数が quantics 表現に基づきスケール分離可能であることを示した先行研究 [3] を発展させ、系のパラメータにより、1 粒子および 2 粒子相関関数

の QTT データサイズがどのように振る舞うかを調べた。特に温度依存性に着目した結果では、QTT のデータサイズ (あるいは圧縮性) を表す指標であるボンド次元が低温で飽和することを示唆しており、quantics 表現により極低温での数値計算の可能性が示された。

さらに、パルケ方程式群と呼ばれる、2 粒子レベルの物理量についての自己無撞着方程式に応用した例もある [43]。パルケ方程式群は、Schwinger-Dyson 方程式、Bethe-Salpeter 方程式、パルケ方程式を含む連立方程式である。この研究では、Hubbard 原子と単軌道不純物 Anderson モデルを扱う。これらのモデルの場合、周波数に依存するようなメモリコストの大きな量を自己無撞着に決定する必要がある。quantics TCI を用いることで、低ランク構造を利用した効率的な圧縮が可能であり、小さなボンド次元でありながらも、高精度の自己無撞着解が得られた。

ここまでで紹介した研究は QTT や TCI の応用事例の一部であり、他にも多くの応用事例の報告がなされている。場の量子論への応用という観点では、QTT、TCI とともに未だ発展段階の技術であり、調べられていない未知の領域や解決すべき課題は山積している。例えば、多軌道モデルや単軌道 Hubbard モデルを超えた相互作用を含むモデルなどの低ランク構造は分かっていない点も多い。量子系の低ランク構造についての統一的な理解のためにも、先行研究を超える複雑なモデルの調査は必須である。技術的な面でも、より安定したアルゴリズムや、他のテンソルネットワーク手法との融合などの発展が求められる。理論的・技術的な側面からの多面的なアプローチが必要な課題である。

1.3 本研究の目的

現実的な強相関物質の計算を行うためには、多くの自由度を取り込んだ複雑なモデルを扱う必要がある。自由度の増加に伴い、一般的にはメモリコストや計算時間は指数的に増大するため、コスト削減のために効率的な表現方法が必須である。そこで、情報圧縮技術として、QTT と TCI に着目した。本研究では、現実物質の計算に向けた第一ステップとして、軌道・フォノンの自由度を含む電子フォノンモデルで QTT と TCI のベンチマークを行う。

また、本研究で用いたモデルは、先行研究で指摘された TCI アルゴリズムの ergodicity problem が顕著に現れる例であった。そこで、より安定した動作を可能にするため、TCI アルゴリズムを改良する。

1.4 本論文の構成

次の第 2 章では、強相関電子系において強力な手法である動的平均場理論について紹介し、現段階における数値手法とその限界を示す。第 3 章では、テンソルネットワークに

についての基本的な事項を説明する．行列の低ランク近似をもとに，テンソル分解およびテンソルの低ランク近似を解説する．特に重要な tensor train 形式のテンソルネットワークについては，種々の演算や計算量についてまとめた．第 4 章では，多変数関数のテンソル化手法として quantics tensor train を説明し，典型的な関数で低ランク構造を議論する．第 5 章では，tensor train を効率的に構成する手法として，tensor cross interpolation を説明する．第 6 章では，quantics tensor train と tensor cross interpolation を場の量子論に応用した先行事例を紹介する．これらの手法を用いることの有効性と残る課題を整理する．第 7 章では，これまでに説明した場の量子論とテンソルネットワークの手法を用いて，多軌道電子格子モデルの解析を行い，得られた結果について議論する．最後に第 8 章では結論と今後の研究の展開について述べる．

第 2 章

動的平均場理論

2.1 有効模型によるアプローチ

固体の物性は，主として電子の振る舞いにより決まる．そして，電子の運動は Schrödinger 方程式により決定される．固体中には電子の他に原子核が存在し，互いに影響を与え合う．このような系を記述するハミルトニアン $\mathcal{H}$ は以下である：

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^L \frac{\mathbf{P}_i^2}{2M_i} + \sum_{i<j}^L \frac{e^2 Z_i Z_j}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|} + \sum_{i<j}^{N_e} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^{N_e} \frac{e^2 Z_i}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (2.1.1)$$

$m, -e, \mathbf{r}_i$, は i 番目の電子の質量，電荷，位置座標， $M_i, Z_i e, \mathbf{R}_i$ は i 番目の原子核の質量，電荷，位置座標である． N_e, L はそれぞれ系の電子数および原子核の数である． $\mathcal{H}$ の第 1, 2 項は電子と原子核の運動エネルギー，第 3 項は原子核同士の Coulomb 相互作用，第 4 項は電子同士の Coulomb 相互作用，第 5 項は電子と原子核の Coulomb 相互作用である．

多体固有状態を $|\Psi\rangle$ として $\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ を解くことができれば固体を完全に理解することができる．しかし，これはアボガドロ数 $N_A \sim 10^{23}$ オーダーの連立方程式であり，厳密に解くことは現実的ではない．そこで，ハミルトニアンに近似を入れる．まず，電子と原子核の質量の違いに着目し，原子核の位置座標を固定する (Born-Oppenheimer 近似)：

$$\mathcal{H}_{\text{BO}} = \sum_{i=1}^{N_e} \underbrace{\left(\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_i) \right)}_{\equiv h(\mathbf{r}_i)} + \sum_{i<j}^{N_e} \underbrace{\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}}_{\equiv U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}. \quad (2.1.2)$$

$\mathcal{H}_{\text{OB}}$ は Born-Oppenheimer 近似をしたハミルトニアンである． V は $\mathcal{H}$ の第 5 項で原子核について和を取ったものである．また， $\mathcal{H}$ の第 3 項は原子核のみの項であり，電

子については定数のため無視している．Born-Oppenheimer 近似により電子と原子核を分離できた．固体中の電子の振る舞いを調べるためには，多電子状態を $|\psi\rangle$ として， $\mathcal{H}_{\text{BO}} |\psi\rangle = \varepsilon |\psi\rangle$ を解けば良い．

しかし， $\mathcal{H}_{\text{BO}}$ は依然として多体相互作用を含むハミルトニアンであり，解析は難しい．簡単な例として，電子間相互作用がない場合は式 2.1.2 は第 1 項のみになり，各電子ごと独立したハミルトニアン $h(\mathbf{r}_i)$ の和となる．そのため多電子状態は自明に 1 電子状態の積となり，Slater 行列式で書くことができる．

電子間相互作用を考慮した 1 電子近似として，Hartree-Fock 近似 [44–46] が用いられる．Hartree-Fock 近似は，電子間相互作用を 1 つの電子が感じる平均的なポテンシャルへ近似 (平均場近似) し，1 電子問題へ帰着させる．Hartree-Fock 近似の場合，2 つの電子の散乱などの動的な相関効果は含まれていない．

Hartree-Fock 近似を超えて，ある程度の相関効果を取り込む方法として密度汎関数理論 (Density functional theory: DFT) に基づく Kohn-Sham 法が知られている．Kohn-Sham DFT 法では，元の系と同じ一電子密度を再現するような相互作用のない仮想的な系 (Kohn-Sham 系) を考える．Kohn-Sham 系の (補助的な) 波動関数は Slater 行列式で書くことができる．Kohn-Sham 系においては，非局所的な交換項は落とされ，その効果は交換相関ポテンシャルと呼ばれる一体のポテンシャルとして導入される．その意味で，DFT も Hartree-Fock 近似と同様に一体描像である．

しかし，交換相関ポテンシャルの形は一般に複雑であるため実用的には何らかの近似が必要である．主要な交換相関ポテンシャルの近似法としては，局所密度近似 (Local density approximation: LDA)[5, 6] や一般化勾配近似 (Generalized gradient approximation: GGA)[47–49] などが用いられる．交換相関ポテンシャルの近似法は他にも多く提案されており，その分だけ Hartree-Fock 近似よりも自由度の高い手法といえ，電子状態 (バンド) 計算をするために現在最もよく利用されている．

2.1.1 電子相関の効果

Hartree-Fock 近似や DFT といった，一体描像による記述は金属と絶縁体を説明することに成功した． s 軌道や p 軌道など，空間的な広がりが大きな軌道では Coulomb 相互作用が遮蔽され，相互作用の効果に比べ，電子の運動エネルギーが優位になる．そのため，それぞれの電子が独立な一体描像で記述できる．しかし， d 軌道や f 軌道の電子が伝導に寄与する系の場合，軌道の局在性から一体描像が破綻してしまう．例として，NiO をはじめとした遷移金属酸化物は， d 軌道が部分的に占有されており，DFT を用いた計算では，LDA, GGA とともに金属的であると予想される．しかし実際には，遷移金属酸化物は絶縁体の場合が多い．これらの物質群では酸素を介して伝導するため軌道同士の重なり積分が

小さくなる．また，軌道の局在性から，同一軌道内側の電子間に働く Coulomb 斥力が大きくなる．これらの原因により電子の遍歴性が減少し，相互作用の強い極限では電子は完全に局在し絶縁体となる．このような電子相関に起因する絶縁体は Mott 絶縁体と呼ばれる [13]．

電子相関が強い物質群は強相関電子系と呼ばれ，遷移金属酸化物の他にも高温超伝導 [50] や f 電子の有効質量が増大する重い電子系 [51] などが知られている．このような強相関電子系を理論的に扱うためには，DFT のような一体描像を超えた理論的手法が必要である．

2.1.2 Hubbard モデル

強相関系を扱う有効モデルとして，Hubbard モデルを導入する．

第二量子化で書いた電子のハミルトニアンは以下である．

$$\mathcal{H} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma}(\mathbf{r}). \quad (2.1.3)$$

$\psi_{\sigma}^{\dagger}/\psi_{\sigma}$ は電子の生成/消滅演算子である． σ はスピンを表す．生成/消滅演算子を，次のように展開する．

$$\psi_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{i\alpha} \phi^{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) c_{i\alpha\sigma}, \quad (2.1.4)$$

$$\psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) = \sum_{i\alpha} \phi^{\alpha*}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) c_{i\alpha\sigma}^{\dagger}. \quad (2.1.5)$$

サイト $\mathbf{R}_i$ 周りに局在する Wannier 関数 $\phi^{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ を基底として， $c^{\dagger}/c$ は生成/消滅演算子である． i, α はそれぞれサイトと軌道を表すインデックスである．この表示のもと，ハミルトニアンは以下のように書かれる．

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} \sum_{\alpha\beta} \sum_{\sigma} t_{ij}^{\alpha} c_{i\alpha\sigma}^{\dagger} c_{j\beta\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_{\sigma\sigma'} U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta} c_{i\alpha\sigma}^{\dagger} c_{j\beta\sigma'}^{\dagger} c_{k\gamma\sigma'} c_{l\delta\sigma}. \quad (2.1.6)$$

t_{ij}^{α} , $U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta}$ はそれぞれ以下の重なり積分で定義した．

$$t_{ij}^{\alpha\beta} = - \int d\mathbf{r} \phi^{\alpha*}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) h(\mathbf{r}) \phi^{\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (2.1.7)$$

$$U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta} = \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi^{\alpha*}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \phi^{\beta*}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi^{\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k) \phi^{\delta}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l). \quad (2.1.8)$$

ここで， $U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta}$ はサイト i, j, k, l を跨ぐ Coulomb 相互作用である．Wannier 関数の局在性のため，(2.1.8) 式から $i = j = k = l$ が大きな値を持つことがわかる．したがって最も

寄与の大きな部分だけを残す以下のような近似を行う．

$$U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta} \simeq \delta_{ij}\delta_{jk}\delta_{kl}U_{iiii}^{\alpha\beta\gamma\delta}. \quad (2.1.9)$$

この近似により，2つの電子間の Coulomb 相互作用は同一サイト内のみで考える． $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ は，実際には複数の軌道を取りうる．ここでは簡単のため単軌道を考える．さらに，各サイトで Coulomb 相互作用は同じ値を取るものとする．第1項は，Wannier 関数の局在性から最近接サイト間のみ有限とし，全てのサイト間で大きさは同じものとする．以上を踏まえて，ハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -t \sum_{ij\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (2.1.10)$$

となる．ここで， $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ は数演算子である．このハミルトニアンは Hubbard モデルと呼ばれ，電子相関を含む最も単純なモデルである． $U = 0$ の場合，第1項は強束縛模型であり，電子がサイト間をホッピングを表す遍歴的なモデルである． $U \rightarrow \infty$ かつ半充填の場合，電子は局在化する． U と t の関係により，遍歴性と局在性が競合したモデルである．

電子間相互作用を考慮して Hubbard モデルを解くための手法として，動的平均場理論 [17] が使われる．DMFT は動的な平均場を考えることことで，量子揺らぎを表現できるようになる．詳細は 2.2 節で説明する．

2.2 動的平均場理論

Hubbard モデルは，以下のように電子の遍歴性と局在性の相反する項が競合するモデルである．

$$\mathcal{H}_{\text{Hubbard}} = -t \sum_{ij\sigma} d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}. \quad (2.2.1)$$

ここで， $d_{i\sigma}^\dagger/d_{i\sigma}$ は電子の生成/消滅演算子であり，数演算子は $n_{i\sigma} = d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma}$ である．グランドカノニカル分布を考え，化学ポテンシャルの項を加えた． $U = 0$ (強束縛模型) と $U \rightarrow \infty$ (孤立原子) の極限は解析的に解くことができる．本節では，両極限の間を議論するための理論的な方法として，相互作用する格子系を有効的な不純物モデルにマップし自己無撞着的に格子系と不純物系を解く動的平均場理論 (Dynamical mean field theory: DMFT) を説明する．Green 関数についての必要事項は付録 B にまとめた．

格子内の1つのサイトに着目し，残りの自由度を非相互作用バスと，着目したサイトとバスとを繋ぐ混成項に置き換える．着目したサイトはバスに埋め込まれた不純物と見なす

ことができ、以下の不純物 Anderson モデルとなる:

$$\mathcal{H}_{\text{SIAM}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} (V_{\mathbf{k}\sigma} d_\sigma^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \text{h.c.}) + U n_\uparrow n_\downarrow - \mu(n_\uparrow + n_\downarrow). \quad (2.2.2)$$

$c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger/c_{\mathbf{k}\sigma}$ はバスの電子の生成/消滅演算子である. $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ は非相互作用バスのエネルギー分散, $V_{\mathbf{k}\sigma}$ は不純物サイトとバスを繋ぐ混成の強さを表す.

Anderson モデルのパラメータ $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, $V_{\mathbf{k}\sigma}$ は, 元の格子を再現するように決定される. バスの性質はこれらのパラメータを含む以下の関数により規定される.

$$\Delta_\sigma(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{|V_{\mathbf{k}\sigma}|^2}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}}}, \quad (2.2.3)$$

$$\mathcal{G}_\sigma(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \mu - \Delta_\sigma(i\omega_n)}. \quad (2.2.4)$$

それぞれ混成関数, キャビティ Green 関数と呼ばれる. DMFT は自己無撞着条件は, 不純物系の Green 関数 $G_{\text{imp}}(i\omega_n)$ が格子系の局所的な Green 関数 $G_{\text{loc}}(i\omega_n) = G_{ii}(i\omega_n)$ と一致することである. 格子系の Green 関数を $G(\mathbf{k}, i\omega_n)$ として,

$$\int d\mathbf{k} G(\mathbf{k}, i\omega_n) = G_{\text{imp}}(i\omega_n) \quad (2.2.5)$$

である. $\int d\mathbf{k}$ は第一 Brillouin ゾーン内の規格化された波数積分を表す. 格子系の自己エネルギー $\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)$ は非相互作用 Green 関数を $G_0(\mathbf{k}, i\omega_n)$ として以下である:

$$\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = G_0^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) - G^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n). \quad (2.2.6)$$

同様に不純物系の自己エネルギーは

$$\Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) = \mathcal{G}^{-1}(i\omega_n) - G_{\text{imp}}^{-1}(i\omega_n) \quad (2.2.7)$$

である. DMFT で行う近似は, 次のように格子系の自己エネルギーを, 波数依存しない不純物系の自己エネルギーとすることである.

$$\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) \simeq \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) \quad (2.2.8)$$

この近似のもと, 自己無撞着条件は以下のように書かれる.

$$\int d\mathbf{k} \frac{1}{i\omega_n - \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n)} = G_{\text{imp}}(i\omega_n). \quad (2.2.9)$$

G_{imp} , Σ_{imp} はどちらも不純物系のパラメータ $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, $V_{\mathbf{k},\sigma}$ や $\Delta(i\omega_n)$, $\mathcal{G}(i\omega_n)$ により決まるため, (2.2.9) はこれらに対する自己無撞着方程式である. 自己無撞着計算 (DMFT ループ) は以下のような流れで行われる.

Step 1. 与えられた $\mathcal{G}(i\omega_n)$ に対して, 不純物系の Green 関数 $G_{\text{imp}}(i\omega_n)$ を求める.

DMFT ループの最初の 1 周の場合は, 初期値として適当な $\mathcal{G}$ を与える.

Step 2. 以下で不純物系の自己エネルギーを求める.

$$\Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) = \mathcal{G}^{-1}(i\omega_n) - G_{\text{imp}}^{-1}(i\omega_n) \quad (2.2.10)$$

Step 3. DMFT の近似 $\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) \simeq \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n)$ を行い, 格子系の局所的な Green 関数を以下で求める.

$$G_{\text{loc}}(i\omega) = \int d\mathbf{k} \frac{1}{i\omega_n - \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n)} \quad (2.2.11)$$

Step 4. キャビティ Green 関数に対して, 自己無撞着条件を課す.

$$\mathcal{G}^{-1} = G_{\text{imp}}^{-1}(i\omega_n) + \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) = G_{\text{loc}}^{-1}(i\omega_n) + \Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) \quad (2.2.12)$$

Step 5. Step 1 に戻り, 以下繰り返す.

DMFT ループの中で, 最も計算コストの大きい部分は Step 1 である. Step 1 は量子不純物問題と呼ばれ, 計算手法は不純物ソルバーと呼ばれる. 次の節では, いくつかの不純物ソルバーを紹介する.

2.3 量子不純物問題

本節では, 動的平均場理論の自己無撞着計算のなかで数値的なボトルネックとなる量子不純物問題について, いくつかの不純物ソルバーを紹介する.

2.3.1 反復摂動法

反復摂動法 (Iterative Perturbation Theory: IPT)[18] は, 半充填条件下で特に有用な手法である. 不純物系の自己エネルギーとして, U で展開した以下のような 2 次摂動の自己エネルギーを用いる.

$$\Sigma_{\text{imp}}(i\omega_n) \simeq \frac{U}{2} + U^2 \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \mathcal{G}(\tau)^3 \quad (2.3.1)$$

ただし, $\mathcal{G}(i\omega_n)$ は電子正孔対称性を満たすため $\mathcal{G} - U/2$ とシフトしている. もともとは弱結合の Anderson モデルの研究から得られた結果だが, 強結合極限も再現することが示された [52]. IPT は強相関電子系特有の減少である Mott 転移を記述することができる.

2.3.2 厳密対角化法

不純物 Anderson モデルを数値的に厳密である対角化を用いて解く方法を説明する [20]. キャビティ Green 関数を構成するバスの連続自由度 $V_{\mathbf{k}\sigma}$, $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ を離散化する. 離散化後のバス自由度により, 同様に離散化された不純物 Anderson モデルが得られる. 離散化されたハミルトニアンを対角化し, 不純物の Green 関数を求める. 離散化されたバスの数の増大に伴い Hilbert 空間は指数的に巨大になるため, 通常 15 サイト程度が限界である [53, 54]. 多軌道系の場合では扱えるサイト数はさらに少なくなる.

2.3.3 連続時間量子モンテカルロ法

連続時間量子モンテカルロ法 (Continuous-Time Quantum Monte Carlo: CT-QMC) は, 不純物 Anderson モデルの分配関数を多対摂動論に基づきダイアグラム展開し, それらダイアグラムを確率的にサンプリングすることで評価する [26].

CT-QMC には大きく分けて相互作用 U で展開する弱結合展開 (CT-INT) [24, 55] と, バスと不純物の混成 V で展開する混成項展開 (CT-HYB) [56] の 2 つの相補的なアプローチがある. 弱結合展開はサイト数に対するスケーリングが冪的であり, サイト数の大きな系を扱える. しかし, 複雑な相互作用や多軌道系の場合は負符号問題が現れる. 混成項展開は, CT-INT と比較して強結合領域において平均的な摂動次数が小さく, Mott 転移近傍の計算に適する. さらに低温領域であっても効率的に計算可能である. しかし, 計算量が軌道数に対して指数的に増大してしまう点が課題である.

第 3 章

テンソルネットワーク

テンソルネットワーク (Tensor network) とは、多次元配列で表現された対象を扱うための数値的枠組みである。特に対象となる多次元配列が非常に巨大な場合、テンソルネットワークにより情報を圧縮しすることで効率的な数値計算が可能となる。

第 1 節ではテンソルネットワークの情報圧縮に必要な行列分解と行列の低ランク近似について説明する。第 2 節ではテンソルネットワークを定義し、ダイアグラムによる表現方法を導入する。また、テンソルネットワーク形式での積分法を説明する。第 3 節では巨大なテンソルに対して高速にテンソル分解を行うアルゴリズムである TCI について説明する。第 4 節では連続変数の関数をテンソルとして表現するための離散化の方法として quantics 表現を説明する。

3.1 行列分解と低ランク近似

ある行列 A を複数の行列 $(B, C, D, \dots)$ の積に分解することを行列分解という:

$$A = BCD \dots \quad (3.1.1)$$

分解によって複雑な行列から本質的な部分を抽出する、行列演算の計算量を改善ができる、など行列分解にはさまざまな利点がある。さらに、行列 A をよりランクの小さい行列として近似する低ランク近似は、行列の持つ構造を利用してより少ない情報量で行列表現できる。そのため信号処理や画像圧縮、機械学習などの情報科学分野はもちろん、量子化学、計算物理まで幅広い分野で応用されている。そして、テンソルネットワークで巨大なテンソルを扱うことができるのも、行列を低ランク近似できるためである。ここでは主にテンソルネットワークへの利用を念頭に行列分解を説明する。

3.1.1 特異値分解

一般の複素行列 A に対して,

$$\begin{cases} Av_i = \sigma_i u_i \\ A^\dagger u = \sigma_i v_i \end{cases} \quad (3.1.2)$$

を満たす数 σ_i , ベクトル u_i, v_i を特異値, 特異ベクトルという. 一般に特異値と特異ベクトルは複数あるため添字 i でラベル付けをしている. ここでは $i = 1, \dots, n$ とする. 特異値は非負実数であることが知られており, ラベルは値が大きな順に付けるとする. 特異値を対角成分とする行列 $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$ は特異行列と呼ばれる. 特異ベクトルを列とする行列

$$U = (u_1 \cdots u_n), \quad V = (v_1 \cdots v_n) \quad (3.1.3)$$

はユニタリ行列である. Σ, U, V を用いて A を以下のように分解する:

$$A = U \Sigma V^\dagger. \quad (3.1.4)$$

または特異値と特異ベクトルを用いて,

$$A = \sum_{i=1}^n \sigma_i u_i v_i^\dagger \quad (3.1.5)$$

と分解する. これらの分解は特異値分解 (Singular Value Decomposition: SVD) と呼ばれる. 特異値分解についての詳細は付録 A にまとめた.

3.1.2 行列の低ランク近似

ランク r の行列 A を, ランク $\chi < r$ の行列で近似する方法を低ランク近似という. Frobenius ノルムで測る精度の面で, 最適な低ランク近似は SVD を利用したものであることが知られている.

■SVD による低ランク近似

SVD を用いることで行列の低ランク近似 (圧縮) を行うことができる. ランク n の $n \times m$ 行列 A を考える. また, $n < m$ の横長の行列であるとする. この行列を SVD すると, ランクの定義から非ゼロな特異値は n 個あり,

$$A = \sigma_1 u_1 v_1^\dagger + \sigma_2 u_2 v_2^\dagger + \cdots + \sigma_n u_n v_n^\dagger \quad (3.1.6)$$

のようになる．特異値は $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_{n-1} \geq \sigma_n$ の規則で並ぶ． $\sigma_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^\dagger$ と $\sigma_n \mathbf{u}_n \mathbf{v}_n^\dagger$ では前者の方が支配的である．そのため，影響の少ない後ろの項を無視する近似を考える．次のように $\chi (< n)$ 以降をカットしたとする．

$$\begin{aligned}
 A &= U \Sigma V^\dagger \\
 &= \sigma_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^\dagger + \sigma_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{v}_2^\dagger + \dots + \sigma_\chi \mathbf{u}_\chi \mathbf{v}_\chi^\dagger + \dots + \cancel{\sigma_n \mathbf{u}_n \mathbf{v}_n^\dagger} \\
 &\simeq \sigma_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^\dagger + \sigma_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{v}_2^\dagger + \dots + \sigma_\chi \mathbf{u}_\chi \mathbf{v}_\chi^\dagger \\
 &\equiv \tilde{U} \tilde{\Sigma} \tilde{V}^\dagger (\equiv \tilde{A}).
 \end{aligned} \tag{3.1.7}$$

$\tilde{M}$ は行列 M から行や列を削除した行列を表す． $\tilde{A}$ のランクは χ である．このように特異値を捨てることでよりランクの低い行列で近似できる．

また，特異値を捨てない場合 (A.14) では U, V はユニタリ行列であった．特異値を捨ててしまうと， U, V は非正方行列 $\tilde{U}, \tilde{V}$ になってしまうためユニタリ行列ではないが， U の行ベクトルと V の列ベクトルは正規直交のため $U U^\dagger$ や $V V^\dagger$ は単位行列になる．ここで $M^\dagger$ は行列 M に対するエルミート共役を表す．

$$\begin{aligned}
 A &= \boxed{U} \quad \boxed{\Sigma} \quad \boxed{V^\dagger} \\
 &\simeq \boxed{\tilde{U}} \quad \boxed{\tilde{\Sigma}} \quad \boxed{\tilde{V}^\dagger} \equiv \tilde{A}
 \end{aligned}$$

図 3.1. 低ランク近似のイメージ：低ランク近似は，特異値を捨てることにより U と V を”細く”することで，メモリに記憶するデータ量を減らしている．

もともとの行列 A は mn 個の要素を持ち，全てを記憶しておく必要がある． A の SVD は $n \times n$ 行列 U ， $n \times n$ 対角行列 Σ ， $n \times m$ 行列 V の積である． U は n^2 個， Σ は n 個， V は nm 個の要素を持つ．そのため分解後のデータ量の合計は $n(n + m + 1)$ である． χ 以降の項を無視すると， $\tilde{U}$ は $n\chi$ 個， $\tilde{\Sigma}$ は χ 個， $\tilde{V}$ は χm 個のため，合計 $\chi(n + m + 1)$ である．データが圧縮される条件は

$$nm > \chi(m + n + 1) \quad \therefore \chi < \frac{nm}{n + m + 1} \tag{3.1.8}$$

である．右辺は n, m に対して単調に増加する． $N \times N$ の正方行列の場合は，圧縮するためにカットしなければならない特異値の数は $N/2$ に収束する． χ 個の特異値を残す場

合の圧縮率 η は

$$\eta = \frac{mn - \chi(m + n + 1)}{mn} \times 100 \% \quad (3.1.9)$$

である．残すべき特異値の数は少ないため，ほとんどの場合高い近似精度で圧縮できる．

特異値分解による行列の圧縮は，フロベニウスノルムの意味で最良の近似であることが知られている (付録 A)．すなわち A を近似した行列を $\tilde{A}$ ，許容誤差を ε として，

$$\varepsilon > \frac{\|A - \tilde{A}\|_F^2}{\|A\|_F^2} \quad (3.1.10)$$

を満たすように $\tilde{A}$ を決める．このとき，もっともランクの小さい $\tilde{A}$ を与えるのは SVD である．

3.2 テンソルネットワークの定義と基本事項

3.2.1 テンソルの定義

定義：テンソルとテンソルの表記

k 個の離散的な変数を指定することで値が 1 つ定まるような離散変数の多変数関数を k 階テンソル，または k 次元テンソルという． k はテンソルの次元という．

テンソルの離散変数は，インデックス，脚または単に変数などと呼ばれる． k 階テンソル T のインデックスが $i_1, i_2, \dots, i_k$ であるとき，テンソル T は，変数を明示して，

$$T_{i_1 i_2 \dots i_k}, \quad T^{i_1 i_2 \dots i_k}, \quad T_{i_1 \dots i_l}^{i_{l+1}, \dots, i_k}, \quad T(i_1, i_2, \dots, i_k), \quad (3.2.1)$$

などのように表す．インデックスの取りうる値の数をインデックスの次元という． k 階テンソル $T_{i_1 i_2 \dots i_k}$ を要素とする集合を $\mathbb{A}$ とし，インデックス $i_1, i_2, \dots, i_k$ の次元がそれぞれ $d_1, d_2, \dots, d_k$ であるとき，テンソルの値のクラスと各インデックスの次元をまとめて次のように表す．

$$T_{i_1 i_2 \dots i_k} \in \mathbb{A}^{d_1 \times d_2 \times \dots \times d_k} \quad (3.2.2)$$

本論文では，テンソルとは多次元配列のことを指す．定義で示した通り，あるテンソル T を表す表記法はさまざまあるが，全て同じ意味である．スカラー，ベクトル，行列はそれぞれ 0 階，1 階，2 階のテンソルである．高次元になりインデックスの数が増えると数式が煩雑になるため，次のようなダイアグラムによるテンソルの表現を導入する．テンソル自体を丸や四角形，三角形などのオブジェクトで表し，テンソルの持つインデックスの数だけオブジェクトに棒がつく．

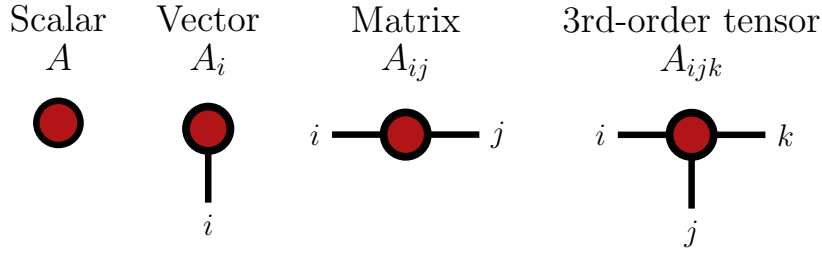


図 3.2. テンソルのダイアグラム表現

また, (3.2.3) のようなテンソル同士の共通するインデックスの和 (縮約) は, テンソルダイアグラムを用いて図 3.3 のように和をとるインデックスをつなげて表す.

$$D_{ijlm} = \sum_k A_{ijk} B_{klm}. \quad (3.2.3)$$

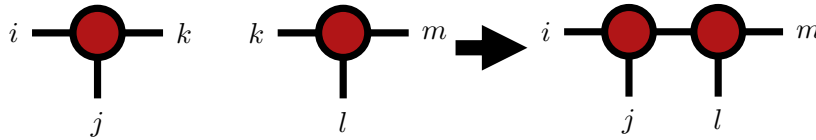


図 3.3. テンソル同士の縮約

同様にして行列のトレース (3.2.4) は, 図 3.4 のように行列から伸びる 2 本のインデックスをつなげて表現する. もしくは単位行列 δ_{ij} との縮約として理解することもできる^{*1}. このとき, δ_{ij} は棒のみで表されるテンソルと考えればよい.

$$\text{Tr } A = \sum_i A_{ii} = \sum_{ij} A_{ij} \delta_{ij}. \quad (3.2.4)$$

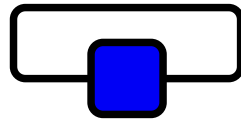


図 3.4. 行列のトレース

縮約の計算量

一般に, テンソルネットワークの縮約を取る際の計算量は, 縮約をとる順序に依存する. 例として全てのインデックスの次元が χ であるようなテンソル A, B, C が図 3.5 のようなネットワークを組む場合で, 縮約 $\sum_{\alpha\beta\gamma} A_{i\alpha\beta} B_{\beta\gamma} C_{jk\gamma\alpha}$ を考える.

^{*1} 単位行列との積 $\sum_k A_{ik} \delta_{kj}$ とは異なることに注意.

まず方法1の場合, はじめに A, B の縮約をとり, 次に AB と C の縮約をとる. この場合 A, B の縮約に必要な計算量は $\mathcal{O}(\chi^4)$ である^{*2}. 続いて AB と C の縮約では $\mathcal{O}(\chi^5)$ の計算量が必要となる. つまり方法1全体の計算量は $\mathcal{O}(\chi^5)$ となる.

次に方法2では, はじめに A, C の縮約をとり, 次に AC と B の縮約をとる. この場合 A, C の縮約に必要な計算量は $\mathcal{O}(\chi^6)$ である. 続いて AC と B の縮約では $\mathcal{O}(\chi^5)$ の計算量が必要となる. つまり方法2全体の計算量は $\mathcal{O}(\chi^6)$ となる.

この2つを比べると, 方法1のほうが計算量的に有利な縮約の順序であることがわかる. 一般に, 縮約の最適な順序を探す問題は NP 困難であり, 現実的な時間で最適解を探索することはできない. 最適ではなくとも, できるだけ計算量の少ない準最適な縮約順序を探索することは重要である.

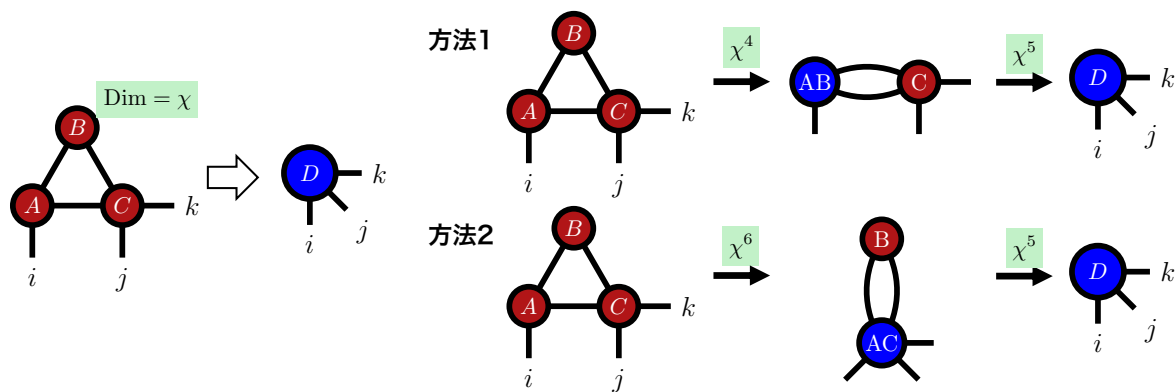


図 3.5. 縮約の順序による計算量

3.2.2 テンソルネットワーク

定義：テンソルネットワーク

複数のテンソルを縮約し形成されるネットワークをテンソルネットワークという.

テンソルネットワークのネットワーク構造はさまざまなものが考えられる. 図 3.6 はテンソルネットワークのいくつかの例である. Tensor Train (TT) は 3 階テンソルが 1 次元の鎖状に連なった構造を持つ. 波動関数理論の文脈では Matrix Product State (MPS) と呼ばれることもある. 1 次元状の TT を 2 次元に拡張したものが Projected Entangled Pair State (PEPS) である. また, 階層をもつ木構造を考えることもでき, Tree Tensor

^{*2} テンソルダイアグラムで描いたときの縮約の計算量は, インデックスの本数を数えることで簡単に見積もることができる. この際縮約のために繋がっているインデックスは 1 本と数える. 例えば方法1の A, B の縮約の場合は C を無視して, 縮約を取るインデックスが 1 本, 縮約を取らないインデックスが 3 本のため合計 4 本で計算量は $\mathcal{O}(\chi^4)$ となる.

Network (TTN) と呼ばれている。それぞれのネットワーク構造に得手、不得手があるため、どのような構造のテンソルネットワークを使うべきかは扱いたい問題に依存する。本研究では、主に TT 形式のテンソルネットワークを利用している。TT の性質については次節で詳しく説明する。

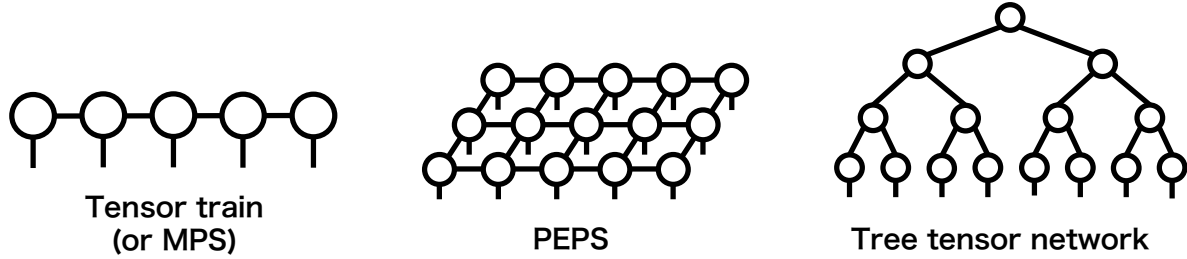


図 3.6. テンソルネットワークの例

テンソルネットワークを物理の問題へ適用する例を紹介する。1 次元イジングモデルのハミルトニアンは式 (3.2.5) である。系のサイズを N として、周期境界条件 ($s_N = s_1$) を課すことにする。

$$\mathcal{H} = -J \sum_i s_i s_{i+1} \quad (3.2.5)$$

分配関数は次のように転送行列 $T_{s_i s_{i+1}}$ の積として表せる。

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-\beta \mathcal{H}[\mathbf{s}]} = \sum_{\{s\}} T_{s_1 s_2} T_{s_2 s_3} \cdots T_{s_{N-1} s_N} \quad (3.2.6)$$

ここで $\mathbf{s}$ は N 個のスピンの配置を意味し、ハミルトニアンはスピン配置の関数として $\mathcal{H}[\mathbf{s}]$ と書いた。 $\sum_{\{s\}}$ は全ての可能なスピン配置に対して和を取ることを意味する。転送行列ひとつひとつが 2 階のテンソルであり、その縮約として表現されているため、この分配関数はテンソルネットワークである。ダイアグラムで表現すると図 3.7 となる。1 次元状に連なるテンソルのそれぞれが転送行列 T である。また、周期境界条件のため、両端のテンソル同士も縮約が取られている。図 3.7 は開放されたインデックスがないためスカラーを表すが、これは分配関数がスカラー量であることに対応している。

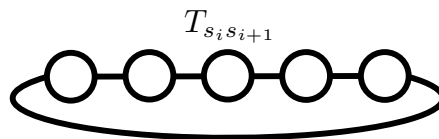


図 3.7. 1 次元イジングモデルの分配関数

3.2.3 テンソル分解

縮約の逆の操作として、次元の高いテンソルをより次元の低いテンソルに分解する方法を紹介する．例として4階テンソル $T_{ijkl} \in \mathbb{R}^{d_i \times d_j \times d_k \times d_l}$ を2つの3階テンソル $A_{ij\alpha} \in \mathbb{R}^{d_i \times d_j \times \chi}$, $B_{\alpha kl} \in \mathbb{R}^{\chi \times d_k \times d_l}$ に分解することを考える．図 3.8 は分解の様子をテンソルダイアグラムで表現したものである．テンソル分解は、基本的に高次元テンソルを行列に変形し、行列分解を行う．行列分解の方法は SVD や QR 分解, LU 分解などさまざまある．ここでは SVD を用いて説明する．

まず第一ステップとして、4階テンソルを2階テンソル(行列)に変形する．この際、複数のインデックスをまとめて次元の大きな1つのインデックスにするような操作が必要となる．これをインデックスの結合や unfolding という．結合するインデックスの組の作り方は複数通り考えられる．ここでは次のように (i, j) , (k, l) をそれぞれ結合し $T_{(ij)(kl)}$ のような行列に変形する．

$$T_{ijkl} \in \mathbb{R}^{d_i \times d_j \times d_k \times d_l} \rightarrow T_{(ij)(kl)} \in \mathbb{R}^{d_i d_j \times d_k d_l} \quad (3.2.7)$$

$T_{(ij)(kl)}$ はサイズ $d_i d_j \times d_k d_l$ の行列であるため、もとの T_{ijkl} と要素数は変わらない．四次元的に配置される T の要素を2次元的に並べ直したものである．要素へのアクセスの仕方は

$$\begin{cases} (ij) &= (i-1)d_j + j \\ (kl) &= (k-1)d_l + l \end{cases} \quad (3.2.8)$$

などと定義すると、 (i, j, k, l) と $((ij), (kl))$ が漏れなく重複なく対応する．より多くのインデックスを結合する場合は、文献 [57] の対応関係などを使えばよい．

こうして、4階テンソル T_{ijkl} から2階テンソル(行列) $T_{(ij)(kl)}$ を得る．次に得られた行列に対して行列分解を行う．ここでは分解方法として SVD を採用する．

$$T_{(ij)(kl)} = \sum_{\alpha=1}^D \sum_{\beta=1}^D A_{(ij)\alpha} \Sigma_{\alpha} \delta_{\alpha\beta} B_{\beta(kl)} \quad (3.2.9)$$

$$\simeq \sum_{\alpha=1}^{\chi} \sum_{\beta=1}^{\chi} \tilde{A}_{(jk)\alpha} \tilde{\Sigma}_{\alpha} \delta_{\alpha\beta} \tilde{B}_{\beta(kl)} \quad (3.2.10)$$

$A_{(ij)\alpha}, B_{\beta(kl)}$ はそれぞれ左特異行列, 右特異行列, Σ_{α} は特異ベクトルであり、要素は $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_D$ が大きい順に並んでいるとする． D は全特異値の数を表し、(3.2.9) は厳密な SVD である．ここで、 $\alpha = \chi$ 以降の特異値を捨てる低ランク近似をすると (3.2.10) となる． $\tilde{A}, \tilde{\Sigma}, \tilde{B}$ は低ランク近似後の小さくなった特異行列と特異ベクトルである．ここ

で改めて $A_{(ij)\alpha} = \tilde{A}_{(ij)\alpha}$, $B_{\alpha(kl)} = \sum_{\beta} \tilde{\Sigma}_{\alpha} \delta_{\alpha\beta} \tilde{B}_{\beta(kl)}$ と置き直すと,

$$T_{(ij)(kl)} \simeq \sum_{\alpha=1}^{\chi} A_{(ij)\alpha} B_{\alpha(kl)} \quad (3.2.11)$$

となり, 行列分解と低ランク近似が完了する. 最後に, (3.2.8) の対応規則に従って (ij) と (kl) の結合を解くと

$$T_{ijkl} \simeq \sum_{\alpha=1}^{\chi} A_{ij\alpha} B_{\alpha kl} \quad (3.2.12)$$

となって, 4 階テンソルを 2 つの 3 階テンソルに分解することができた. (3.2.12) では両辺を等号で結んでいるが, 低ランク近似をしているため, ここには捨てた特異値の分だけ (3.2.9) の意味で誤差が含まれることに注意. より高次のテンソルであっても, インデックスを結合し行列に変形することで, この分解は可能である. また, $T_{(ij)(kl)}$ の分解は SVD 以外の方法でもよい. 低ランク近似が必要な場面では, SVD が Frobenius ノルムの意味で最も良い方法ではあるが, QR 分解が使われる場合もある.

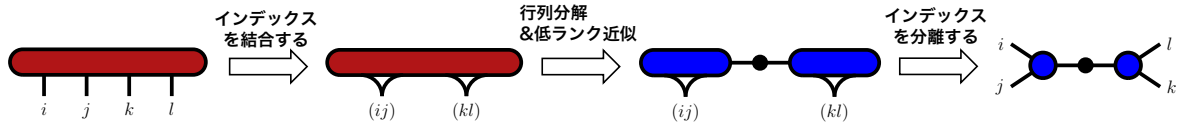


図 3.8. テンソル分解の様子

3.3 Tensor train

ここでは最も単純なテンソルネットワーク構造の 1 つとして Tensor Train (TT) 形式を紹介する^{*3}.

TT 形式とは, (3.3.1) のように 3 階テンソルが 1 次元状に並んだ構造のテンソルネットワークである [41]. テンソルダイアグラムで示すと図 3.9(a) である.

$$F_{\text{TT}} = \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{\mathcal{R}}} F_{\sigma_1 \alpha_1}^{(1)} F_{\alpha_1 \sigma_2 \alpha_2}^{(2)} F_{\alpha_2 \sigma_3 \alpha_3}^{(3)} \cdots F_{\alpha_{\mathcal{R}-1} \sigma_{\mathcal{R}}}^{(\mathcal{R})} \quad (3.3.1)$$

TT を構成している $F_{\alpha_{\ell-1} \sigma_{\ell} \alpha_{\ell}}^{(\ell)} \in \mathbb{C}^{\chi_{\ell-1} \times d_{\ell} \times \chi_{\ell}}$ は, TT コアと呼ばれる 3 階テンソルである. TT コアは 2 種類のインデックス $\sigma_{\ell}, \alpha_{\ell-1}, \alpha_{\ell}$ を持つ. σ_{ℓ} は図 3.9(a) の開放された

^{*3} 歴史的に物理の分野では 1 次元鎖状のテンソルネットワークは Matrix Product State (MPS) と呼ばれている. DMRG では波動関数を表現する道具として使われていたことに由来する. 本論文では, 1 次元鎖状テンソルネットワークは波動関数に限らずより広い概念であるため, TT と呼ぶことにする.

棒で表される, 次元 d_ℓ の実際のインデックスである. このインデックスは, ローカルインデックスや物理的インデックスと呼ばれる. $\alpha_{\ell-1}, \alpha_\ell$ は図 3.9(a) でテンソル同士を繋ぐインデックスである. 式 (3.3.1) のとおり, $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{\ell-1}$ はダミーのインデックスであり, ボンドと呼ばれる. 各ボンドの次元 $\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_{\mathcal{R}-1}$ はボンド次元と呼ばれる. また, ボンド次元の最大値 $\chi = \max_\ell \chi_\ell$ を TT のボンド次元と呼ぶ場合もある. $\mathcal{R}$ は F_{TT} のローカルインデックスの数であり, また TT の長さでもある.

TT の例として, 1 次元スピン系の波動関数を紹介する. 1 次元状にスピン s_i が並ぶ系の状態 $|\Psi\rangle$ は次のように表される.

$$|\Psi\rangle = \sum_{s_1 s_2 \dots s_{\mathcal{R}}} \psi_{s_1 s_2 \dots s_{\mathcal{R}}} |s_1, s_2, \dots, s_{\mathcal{R}}\rangle \quad (3.3.2)$$

係数 $\psi_{s_1 s_2 \dots s_{\mathcal{R}}}$ は波動関数であり, スピンインデックスの関数である. この系のハミルトニアンを $\mathcal{H}$ として, $\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ を解き, E が最小となる基底状態 $|\Psi\rangle$ を探索する問題を考える. 波動関数は系のサイズ $\mathcal{R}$ に対して指数関数的に大きなメモリコストが必要なテンソルであるため, 一般に探索は困難である. しかし, 波動関数を TT 形式に変換し自由度を制限することで計算量を削減することができる.

波動関数が以下の TT 形式に分解できたとする:

$$\psi_{s_1 s_2 \dots s_{\mathcal{R}}} = \sum_{\alpha_1 \dots \alpha_{\mathcal{R}-1}} \psi_{s_1 \alpha_1} \psi_{\alpha_1 s_2 \alpha_2} \dots \psi_{\alpha_{\mathcal{R}-1} s_{\mathcal{R}}}. \quad (3.3.3)$$

ここでボンド α_ℓ の次元 D_ℓ は指数的に大きい, 次元を χ_ℓ に制限する. 自由度が制限された波動関数は $\mathcal{R}$ に対して線形なメモリコストで表現できる. 次に状態に作用するハミルトニアンのテンソルネットワーク表現を考える. 状態にハミルトニアンを作用させると, 異なる状態に移る. したがって, 波動関数を表す TT にハミルトニアンを表すテンソルネットワークを作用させた結果は, また TT となる. ハミルトニアンとして, Matrix Product Operator (MPO) と呼ばれる図 3.9(b) のネットワークを考える. すると, 固有方程式 $\mathcal{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ はテンソルネットワークを用いて図 3.9(c) のように表現できる. テンソルネットワークで表したハミルトニアンや波動関数を用いて $E = \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle / \langle \Psi | \Psi \rangle$ の最小化問題を解く手法が DMRG である.

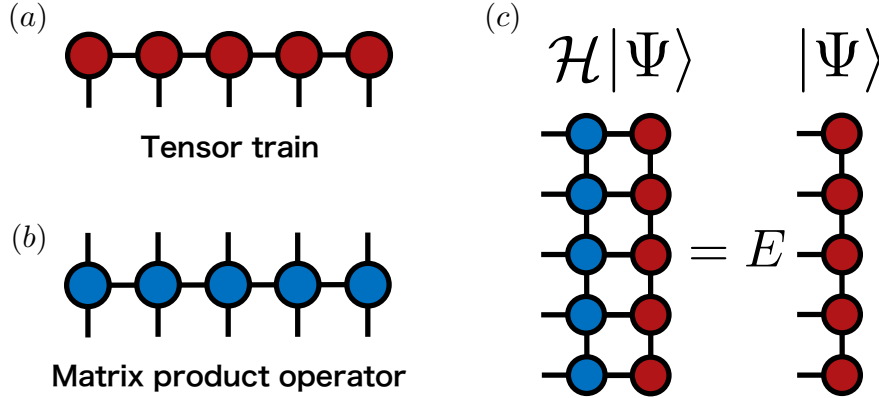


図 3.9. (a) Tensor train. (b) Matrix product operator. (c) MPS 形式で表したハミルトニアンの固有値問題.

3.3.1 TT の構成方法

ここでは指数的に大きなテンソルから自由度の制限された TT を構成する方法を説明する.

■特異値分解による TT 分解

高次元テンソル $F_{\sigma} \in \mathbb{C}^{d_1 \times d_2 \times \cdots \times d_{\mathcal{R}}}$, $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{\mathcal{R}})$ から TT を構成するには, 逐次インデックスの結合を行いながら Fig .3.8 の行列分解の操作を繰り返せばよい. インデックスの結合と分解の順序は任意性がある. 端から順に分解する場合を説明する. まず, F のインデックス $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_{\mathcal{R}})$ を結合し F を行列化する. 左端のインデックスを残し, サイズ $d_1 \times d_2 d_3 \cdots d_{\mathcal{R}}$ の行列 $F_{\sigma_1, (\sigma_2 \sigma_3 \cdots \sigma_{\mathcal{R}})}$ とすればよい. この行列に対して特異値分解と低ランク近似を行う.

$$F_{\sigma} = F_{(\sigma_1), (\sigma_2 \sigma_3 \cdots \sigma_{\mathcal{R}})} \simeq \sum_{\alpha_1=1}^{\chi_1} \tilde{F}_{\sigma_1 \alpha_1}^{(1)} F_{\alpha_1, (\sigma_2 \sigma_3 \cdots \sigma_{\mathcal{R}})}^{(1)} \quad (3.3.4)$$

F_{σ} と $F_{(\sigma_1), (\sigma_2 \sigma_3 \cdots \sigma_{\mathcal{R}})}$ は $\mathcal{R}$ 階テンソルと行列のため形状が異なるが, 表す対象が等しいという意味で等号を用いた. ランク χ_1 の低ランク近似を行い, 特異値行列は右側の行列 $\tilde{F}$ に吸収させた. 特異値の数 D_1 は $\min(d_1, d_2 d_3 \cdots d_{\mathcal{R}})$ であり, $D_1 \geq \chi_1$ である. 次に $\tilde{F}$ のインデックスの結合を一度解除し, 再度次のように結合する.

$$F_{\alpha_1, (\sigma_2 \sigma_3 \cdots \sigma_{\mathcal{R}})}^{(1)} \longrightarrow F_{(\alpha_1 \sigma_2), (\sigma_3 \cdots \sigma_{\mathcal{R}})}^{(1)} \quad (3.3.5)$$

再結合後の $\tilde{F}^{(1)}$ のサイズは $\chi_1 d_2 \times d_3 d_4 \cdots d_{\mathcal{R}}$ である. (3.3.4) に (3.3.5) を代入し, $\tilde{F}^{(1)}$ に対して特異値分解と低ランク近似を行う.

$$F_{\sigma} \simeq \sum_{\alpha_1=1}^{\chi_1} \tilde{F}_{\sigma_1 \alpha_1}^{(1)} \sum_{\alpha_2=1}^{\chi_2} F_{(\alpha_1 \sigma_2), \alpha_2}^{(2)} F_{\alpha_2, (\sigma_3 \cdots \sigma_{\mathcal{R}})}^{(2)} \quad (3.3.6)$$

特異値の数 D_2 は $\min(\chi_1 d_2, d_3 d_4 \cdots d_{\mathcal{R}})$ であり, $D_2 \geq \chi_2$ である. $F_{(\alpha_1 \sigma_2), \sigma_3}^{(2)}$ のインデックスの結合を解除し, 以下 $F^{(\mathcal{R})}$ まで同様の操作を繰り返す.

$$F_{\sigma} = \sum_{\alpha_1=1}^{\chi_1} \sum_{\alpha_2=1}^{\chi_2} \cdots \sum_{\alpha_{\mathcal{R}-1}=1}^{\chi_{\mathcal{R}}} \tilde{F}_{\sigma_1 \alpha_1}^{(1)} \tilde{F}_{\alpha_1 \sigma_2 \alpha_2}^{(2)} \cdots F_{\alpha_{\mathcal{R}-1} \sigma_{\mathcal{R}}}^{(\mathcal{R})} \quad (3.3.7)$$

このようにしてインデックスの結合と特異値分解, 低ランク近似を繰り返すことで TT を得る. このように F_{σ} から TT を得る操作を TT 分解などと呼ぶ. TT 分解は, テンソルダイアグラムを用いて図 3.10 のように表される.

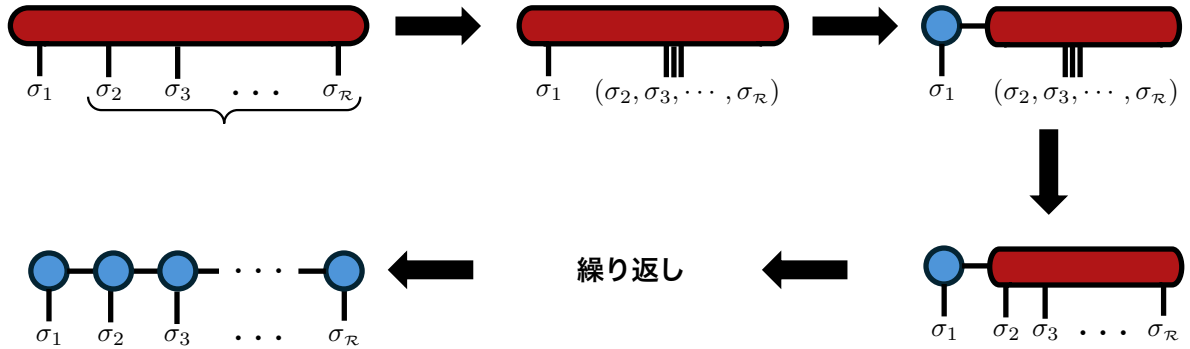


図 3.10. テンソルから TT を構成する操作

■TT の要素数

分解前のテンソル F_{σ} の要素数は $d_1 d_2 \cdots d_{\mathcal{R}}$ である. 簡単のため, ローカルインデックスの次元は全て d とする. 要素数は $d^{\mathcal{R}}$ となり, テンソルの次元が増加すれば指数的に要素数も増加する. 次に分解後の TT の要素数を考える. TT 分解の過程から, 低ランク近似を行わない場合の TT のボンド次元は $D_{\ell} = \min(d^{\ell}, d^{\mathcal{R}-\ell})$ となり, TT の中心に向かうほど指数的に増大し, 中心で最大値をとることがわかる. この場合の要素数は $\sum_{\ell} D_{\ell} D_{\ell+1} d < \mathcal{R} d^{\mathcal{R}}$ となり $\mathcal{R}$ に対して指数的に大きく, TT 分解の利点はない.

しかし, 低ランク近似をした場合 $\chi_{\ell} \ll D_{\ell}$ とでき, 要素数は $\sum_{\ell} \chi_{\ell} \chi_{\ell+1} d < \chi^2 d \mathcal{R}$ となる. ここで χ はボンド次元の最大値である. 特異値が高速に減衰する場合, χ_{ℓ} は D_{ℓ} に比べ大幅に小さくとることができる. D_{ℓ} の指数的な増大を抑えられる程度に χ_{ℓ} を小さくできる場合, 要素数は $\mathcal{R}$ に対して線形にスケールするため, 分解前のテンソル F_{σ}

を大幅に少ない要素数で表現することが可能である。このような性質を低ランク構造といい、テンソルが低ランク構造を持つかどうか、テンソルネットワークを利用した情報圧縮の要である。

F_σ が連続的な関数などを離散化して作られたテンソルの場合、低ランク構造は離散化の方法に強く依存することが知られている。低ランク構造を見出すことができる分解方法を探すことは極めて重要である。次の節で導入する quantics 表現は低ランク構造を見出す分解方法の 1 つである。

3.3.2 TT 形式での計算: ボンド次元と計算量

Tensor Train 形式を保ったまま演算を行う方法をいくつか紹介する。また、その演算によりボンド次元がどのように変化するのかも説明する。TT として $F_{\text{TT}}, G_{\text{TT}}$ を以下で定義する。TT としてのボンド次元はそれぞれ χ_F, χ_G とする。

$$F_{\text{TT}} = \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{\mathcal{R}-1}=1}^{\chi_F} F_{\sigma_1 \alpha_1}^{(1)} F_{\alpha_1 \sigma_2 \alpha_2}^{(2)} F_{\alpha_2 \sigma_3 \alpha_3}^{(3)} \cdots F_{\alpha_{\mathcal{R}-1} \sigma_{\mathcal{R}}}^{(\mathcal{R})} \quad (3.3.8)$$

$$G_{\text{TT}} = \sum_{\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{\mathcal{R}-1}=1}^{\chi_G} G_{\sigma_1 \beta_1}^{(1)} G_{\beta_1 \sigma_2 \beta_2}^{(2)} G_{\beta_2 \sigma_3 \beta_3}^{(3)} \cdots G_{\beta_{\mathcal{R}-1} \sigma_{\mathcal{R}}}^{(\mathcal{R})} \quad (3.3.9)$$

■定数倍とボンド次元

TT を $\lambda \in \mathbb{C}$ 倍するためには、TT コアのいずれかを λ 倍すればよい。

$$\lambda F_{\text{TT}} = \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{\mathcal{R}-1}=1}^{\chi_F} \left(\lambda F_{\sigma_1 \alpha_1}^{(1)} \right) F_{\alpha_1 \sigma_2 \alpha_2}^{(2)} F_{\alpha_2 \sigma_3 \alpha_3}^{(3)} \cdots F_{\alpha_{\mathcal{R}-1} \sigma_{\mathcal{R}}}^{(\mathcal{R})} \quad (3.3.10)$$

$F^{(1)}$ の成分が λ 倍になるだけで、TT コアのサイズは変わらない。そのためボンド次元も不変である。

■和とボンド次元

まずは TT 同士の和 $S_{\text{TT}} = F_{\text{TT}} + G_{\text{TT}}$ を考え、 S_{TT} のボンド次元が $\chi_S = \chi_F + \chi_G$ となることを確認する [42]。

$$\begin{aligned} S_{\text{TT}} &= F_{\text{TT}} + G_{\text{TT}} \\ &= \sum_{\alpha} F_{\sigma_1 \alpha_1}^{(1)} F_{\alpha_1 \sigma_2 \alpha_2}^{(2)} \cdots F_{\alpha_{\mathcal{R}-1} \sigma_{\mathcal{R}}}^{(\mathcal{R})} + \sum_{\beta} G_{\sigma_1 \beta_1}^{(1)} G_{\beta_1 \sigma_2 \beta_2}^{(2)} \cdots G_{\beta_{\mathcal{R}-1} \sigma_{\mathcal{R}}}^{(\mathcal{R})} \\ &= \sum_{\gamma} S_{\sigma_1 \gamma_1}^{(1)} S_{\gamma_1 \sigma_2 \gamma_2}^{(2)} \cdots S_{\gamma_{\mathcal{R}-1} \sigma_{\mathcal{R}}}^{(\mathcal{R})} \end{aligned} \quad (3.3.11)$$

ここで, $S_{\gamma_{\ell-1}\sigma_\ell\gamma_\ell}^{(\ell)}$ は次のような成分の TT コアである.

$$S_{\sigma_\ell}^{(\ell)} = \begin{pmatrix} A_{\sigma_\ell}^{(\ell)} & 0 \\ 0 & B_{\sigma_\ell}^{(\ell)} \end{pmatrix} \quad (3.3.12)$$

この行列の行のインデックスが $\gamma_{\ell-1}$, 列のインデックスが γ_ℓ である. それぞれ大きさは, 行列の表示から分かるとおり, $|\gamma_{\ell-1}| = |\alpha_{\ell-1}| + |\beta_{\ell-1}|$, $|\gamma_\ell| = |\alpha_\ell| + |\beta_\ell|$ である. したがって, S_{TT} のボンド次元は $\chi_S = \chi_F + \chi_G$ である. しかし, $G_{\text{TT}} = F_{\text{TT}}$ の場合を考えると, $S_{\text{TT}} = 2F_{\text{TT}}$ であり, 定数倍のためボンド次元は変わらないはずである. このように $\chi_S = \chi_F + \chi_G$ は必ずしも最適なボンド次元ではなく, 精度を保ってボンド次元を削減できる場合もある.

3.3.3 TT 形式の和と積分

■和

TT 形式でローカルインデックスについての総和を考える. 簡単のため行列の場合からはじめる. $d_1 \times d_2$ の行列 $M_{i_1 i_2}$ に対してインデックスの総和をとるとは, 以下の計算を行うことを意味する:

$$\sum_{i_1=1}^{d_1} \sum_{i_2=1}^{d_2} M_{i_1 i_2}. \quad (3.3.13)$$

実際に, 長さ d_1, d_2 で成分が全て 1 のベクトル $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ を用いて, $\mathbf{v}_1^\top M \mathbf{v}_2$ によって全成分の和になることがわかる.

行列 M_{ij} を以下のように 2 つの行列へ分解し低ランク近似する:

$$M_{ij} \simeq \sum_{\alpha=1}^{\chi} M_{i\alpha}^{(1)} M_{\alpha j}^{(2)}. \quad (3.3.14)$$

和は次のように計算される.

$$\sum_{i_1=1}^{d_1} \sum_{i_2=1}^{d_2} M_{i_1 i_2} = \sum_{i_1=1}^{d_1} \sum_{i_2=1}^{d_2} \left(\sum_{\alpha} M_{i_1 \alpha}^{(1)} M_{\alpha i_2}^{(2)} \right), \quad (3.3.15)$$

$$= \sum_{\alpha} \left(\sum_{i_1=1}^{d_1} M_{i_1 \alpha}^{(1)} \right) \left(\sum_{i_2=1}^{d_2} M_{\alpha i_2}^{(2)} \right). \quad (3.3.16)$$

i_1, i_2 の和と α の和の順番は交換可能である. 図 3.11(a) は行列の場合でローカルインデックスの和を表すダイアグラムである. ● は全成分が 1 のベクトルを表す.

以上を TT へ拡張する. $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_{\mathcal{L}})$ とし, それぞれの次元は d とする. $\mathcal{L}$ 階テンソル F_{σ} の圧縮された TT 表現は以下である:

$$F_{\sigma} \simeq \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_{\mathcal{L}}} F_{\sigma_1 \alpha_1}^{(1)} F_{\alpha_1 \sigma_2 \alpha_2}^{(2)} \dots F_{\alpha_{\mathcal{L}-1} \sigma_{\mathcal{L}}}^{(\mathcal{L})}. \quad (3.3.17)$$

ローカルインデックス σ に対する和は

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} F_{\sigma} &\simeq \sum_{\sigma} \left(\sum_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_{\mathcal{L}}} F_{\sigma_1 \alpha_1}^{(1)} F_{\alpha_1 \sigma_2 \alpha_2}^{(2)} \dots F_{\alpha_{\mathcal{L}-1} \sigma_{\mathcal{L}}}^{(\mathcal{L})} \right), \\ &= \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_{\mathcal{L}}} \left(\sum_{\sigma_1} F_{\alpha_1 \sigma_1}^{(1)} \right) \left(\sum_{\sigma_2} F_{\alpha_1 \sigma_2 \alpha_3}^{(2)} \right) \dots \left(\sum_{\sigma_n} F_{\alpha_{\mathcal{L}-1} \sigma_{\mathcal{L}}}^{(\mathcal{L})} \right) \end{aligned} \quad (3.3.18)$$

である. 行列の場合と同様にローカルインデックスごとに和を実行できる. ローカルインデックス 1 つあたりの和は $\mathcal{O}(d)$ であり, ボンドに対する和は $\mathcal{O}(\chi^2 \mathcal{L})$ である. したがって TT の和は $\mathcal{O}(d \chi^2 \mathcal{L})$ で実行できる. F_{σ} が低ランク構造を持つ場合, 計算量は d や $\mathcal{L}$ に線形である. 図 3.11(b) は多次元テンソルの場合の場合でローカルインデックスの和を表すダイアグラムである.

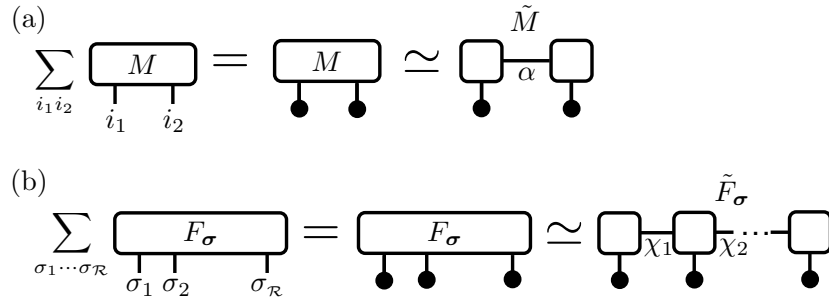


図 3.11. TT の和と積分

■積分

TT 形式の圧縮を保ったまま, 区分求積法の実行が可能である. 以下のような, 超立方体を積分範囲とする多次元積分を考える:

$$I = \int_{[0,1]^n} dx_1 dx_2 \dots dx_n f(x_1, x_2, \dots, x_n). \quad (3.3.19)$$

積分領域が超立方体でない場合でも, 変数ごとに範囲が独立していれば適切な変数変換によって超立方体内部の積分に帰着できる. この積分を区分求積法により実行する場合, 変

数 x_i の区間を $(x_{i1}, \dots, x_{id_i})$ のように d_i 分割し、以下の和を行う。

$$I \simeq \frac{1}{d_1 d_2 \dots d_n} \sum_{i_1=1}^{d_1} \sum_{i_2=1}^{d_2} \dots \sum_{i_n=1}^{d_n} f(x_{1i_1}, x_{2i_2}, \dots, x_{ni_n}). \quad (3.3.20)$$

簡単のため以下では $d_i = d$ とする。積分に必要な計算量は $\mathcal{O}(d^n)$ であり、指数的に大きい。ここで、被積分関数を TT 形式で圧縮する。TT のボンド次元を χ とし、低ランク構造がある (χ は指数的に大きくならない) とする。TT は以下である。

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) \rightarrow F_{x_1, x_2, \dots, x_n} = \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n} F_{\alpha_1}^{(1)}(x_1) F_{\alpha_1 \alpha_2}^{(2)}(x_2) \dots F_{\alpha_{n-1}}^{(n)}(x_n) \quad (3.3.21)$$

TT コアは実際の変数とダミー変数の区別を強調するために上記のように表した。 x_i は既に離散化されたインデックスである。TT 形式では各変数が TT コアごとに分離されている。そのため多次元積分も以下のように変数ごとの 1 次積分の積に分離できる。

$$I \simeq \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n} \left(\int_0^1 dx_1 F_{\alpha_1}^{(1)}(x_1) \right) \left(\int_0^1 dx_2 F_{\alpha_1 \alpha_2}^{(2)}(x_2) \right) \dots \left(\int_0^1 dx_n F_{\alpha_{n-1}}^{(n)}(x_n) \right), \quad (3.3.22)$$

$$= \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_{n-1}} \tilde{F}_{\alpha_1}^{(1)} \tilde{F}_{\alpha_1 \alpha_2}^{(2)} \dots \tilde{F}_{\alpha_{n-1}}^{(n)} \quad (3.3.23)$$

ここで、1 次元積分を表す和を形式的に $\frac{1}{d} \sum_{x_i} = \int_0^1 dx_i$ と表した。また、 $\tilde{F}^{(i)} = \sum_{x_i} F^{(i)}(x_i)$ である。1 次元積分 1 つあたりの計算量は $\mathcal{O}(d)$ である。また、ダミーインデックスについての和は $\mathcal{O}(\chi^2 n)$ のため、積分全体では $\mathcal{O}(d \chi^2 n)$ である。低ランク構造を持つことを仮定しているため、次元に対して線形にスケールする計算量で積分を実行できる。

第 4 章

Quantics tensor train

本章では連続的な変数を持つ関数をテンソルにマップし、テンソルネットワークの枠組みで扱うための方法を説明する。連続変数の関数はそのままでは計算機で扱うことができないため、離散化する必要がある。関数を離散化しテンソルに変換する際、さまざまなテンソル化の方法が考えられる。そして、テンソルで表された関数の低ランク構造は、テンソル化の方法に強く依存する。本節で導入する quantics 表現とは関数をテンソル化する方法の 1 つであり、多くの関数に対して低ランク構造を見出し、指数的な圧縮を可能にすることが先行研究により明かされてきた。

4.1 連続的な関数のテンソル化

連続変数の関数をテンソルへ変換するためには、変数の離散化方法とテンソルの形状を決める必要がある。2 つをまとめてテンソル化の操作とする。

まずは 1 変数関数 $f(x) : x \in [0, 1) \rightarrow \mathbb{C}$ を離散化・テンソル化することを考える。最も簡単な離散化の方法は $x \in [0, 1)$ を $(x_1, x_2, \dots, x_d)$ と d 個の値に分割することである。ここで、 $0 \leq x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_d \leq 1$ である。分割の幅は均等である必要はないが、ここでは均等な幅 $\Delta x = x_i - x_{i-1} = 1/d$ で分割しているものとする。変数の均等分割により、関数は次のような d 成分の 1 階テンソル (ベクトル) に変形される:

$$f(x) \rightarrow (f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_d)). \quad (4.1.1)$$

n 多変数関数 $f(\mathbf{x}) : \mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in [0, 1)^n \rightarrow \mathbb{C}$ の場合も同様である。各変数を均等幅で d 個に分割する: $x_i \rightarrow (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{in})$ 。関数は以下のように n 階テンソル F へテンソル化される:

$$f(\mathbf{x}) \rightarrow F_{i_1 i_2 \dots i_n} = f(x_{1i_1}, x_{2i_2}, \dots, x_{ni_n}). \quad (4.1.2)$$

または、1 次元上に変形し dn 成分のベクトルとして表現することもできる。

一般に、このような均等メッシュを用いて変数の値の大小順に並べるテンソル化は、関数の性質を活用しにくいいため効率的ではない。関数が細かい構造を持つ場合、その構造を表現するために十分小さな分割幅を設定する必要があるため d が増大する。そして、多次元の場合は次元に対して指数的にテンソルが巨大化する。関数の性質を利用する離散化方法として、例えば適応的に分割幅を変える方法がある。関数の変化が急な区間は分割幅を小さくして、変化が緩やかな区間は分割幅を大きくする。こうすることで変化が緩やかな区間の分割数を削減でき、それだけ d を小さくできる。関数の構造が事前にわかっている場合や、次元の低い関数の場合はこのような方法で簡単に効率化できるが、一般の多変数関数では関数の構造に応じて分割幅を調整することは難しい。

4.2 Quantics 表現の Tensor train

4.2.1 2進数分解に基づくテンソル化

Quantics 表現とは、2進数表示に基づくテンソル化法である。先ほどは、1つの連続変数 x を1つの離散化された変数 x_i へ変換するものだった。ここでは1つの連続変数を以下のように $\mathcal{R}$ 個の離散変数の組 $(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{\mathcal{R}})$, $\sigma_\ell = \{0, 1\}$ で表す:

$$x \simeq \sum_{\ell=1}^{\mathcal{R}} \frac{\sigma_\ell}{2^\ell} = (0.\sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_{\mathcal{R}})_2 \rightarrow (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{\mathcal{R}}). \quad (4.2.1)$$

これは先ほどと同様で、分割幅 $1/2^{\mathcal{R}}$ の均等分割である。ただし、先ほどは1列に並んだ変数の値を、2値の離散変数 (バイナリー変数) σ_ℓ を用いて $\mathcal{R}$ 次元に変形している。これは x の2進数表示に対応しており、変数 σ_ℓ は2進数表示の各桁を表す。したがって、各桁が担う長さスケールは指数的に異なる:

$$\begin{cases} \sigma_1 & \rightarrow 1/2 \text{ スケール (最大)} \\ \sigma_2 & \rightarrow 1/2^2 \text{ スケール} \\ \vdots & \\ \sigma_{\mathcal{R}} & \rightarrow 1/2^{\mathcal{R}} \text{ スケール (最小)}. \end{cases} \quad (4.2.2)$$

また、(4.2.1) は有限桁の2進数表示のため、 $\mathcal{R} + 1$ 桁目以降が離散化誤差になる。1変数関数 $f(x) : x \in [0, 1) \rightarrow \mathbb{C}$ の場合、この関数のテンソル化 F は、

$$F_{\sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_{\mathcal{R}}} = f((0.\sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_{\mathcal{R}})_2) \quad (4.2.3)$$

である。

4.2.2 Quantics tensor train

はじめに 1 変数関数 $f(x) : x \in [0, 1) \rightarrow \mathbb{C}$ の場合で quantics 表現のテンソルを TT へ圧縮することを考える. これ以外の定義域の場合でも, 有限区間であれば適切に変数変換をすればよい. $\mathcal{R}$ 階テンソル F は, SVD などの方法により以下のように TT に変換することができる.

$$F_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{\mathcal{R}-1}} = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_{\mathcal{R}-1}} F_{\sigma_1 \alpha_1}^{(1)} F_{\alpha_2 \sigma_2 \alpha_3}^{(2)} \dots F_{\alpha_{\mathcal{R}-1} \sigma_{\mathcal{R}}}^{(\mathcal{R})} \quad (4.2.4)$$

$$\simeq \sum_{\alpha_1}^{\chi_1} \dots \sum_{\alpha_{\mathcal{R}-1}}^{\chi_{\mathcal{R}-1}} F_{\sigma_1 \alpha_1}^{(1)} F_{\alpha_1 \sigma_2 \alpha_2}^{(2)} \dots F_{\alpha_{\mathcal{R}-1} \sigma_{\mathcal{R}}}^{(\mathcal{R})} \quad (4.2.5)$$

$$\equiv F_{\sigma_1}^{(1)} \cdot F_{\sigma_2}^{(2)} \cdot (\dots) \cdot F_{\sigma_{\mathcal{R}}}^{(\mathcal{R})}. \quad (4.2.6)$$

ここで, $F_{\alpha_i \sigma_i \alpha_{i+1}}^{(i)}$ は 3 階テンソルであり, サイズは $2 \times \chi_{i-1} \times \chi_i$ である. (4.2.5) の $\simeq$ は (4.2.4) を低ランク近似したことを意味し, 低ランク近似後の α_i のボンド次元は χ_i である. このように得られた TT は Quantics Tensor Train (QTT) と呼ばれる [39, 58].

4.2.3 多変数への拡張

次に $\mathcal{N}$ 次元空間で定義された関数 $f(\mathbf{x}) : \mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_{\mathcal{N}}) \in [0, 1)^{\mathcal{N}} \rightarrow \mathbb{C}$ をテンソル化する. 各変数は $\mathcal{R}$ 桁の 2 進数へ離散化し, 得られたテンソルを F とする. i 番目の変数の 2 進数表示は以下である.

$$x_i = \sum_{\ell=1}^{\mathcal{R}} \frac{\sigma_{i\ell}}{2^\ell} \rightarrow (\sigma_{i1}, \sigma_{i2}, \dots, \sigma_{i\mathcal{R}}) \quad (4.2.7)$$

$\sigma_{i\ell}$ の添字は, 1 つ目に変数の通し番号, 2 つ目が長さスケールを表す. 次にインデックスの順序を決める. 簡単な順序としては次の 2 通りが考えられる.

- (a) 連続変数の順番 (i の順に並べる)
- (b) バイナリー変数のスケールの順番 (ℓ の順に並べる)

図 4.1 は, 2 変数の場合でそれぞれを TT のダイアグラムで表したものである. 色は長さスケールを表す. 一般に, TT のボンド次元はインデックスの並び順にも依存する. 多変数の場合のボンド次元については次の小節以降で説明する.

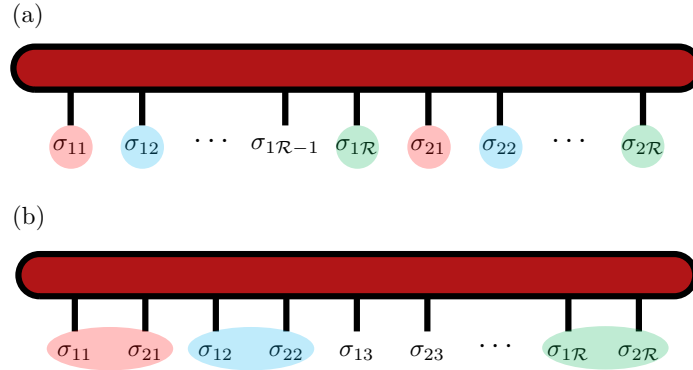


図 4.1. 多変数 QTT を構成する際のインデックス順序. 色はバイナリー変数のスケールを表す. (a) 変数の順に並べる (i 順). (b) 長さスケールの順に並べる (ℓ 順).

4.3 低ランク構造

$\mathcal{N}$ 変数関数 f を考える. 各変数を $\mathcal{R}$ 桁の quantics 表現によってテンソル化し, f を表すテンソル F を得たとする. F を TT に分解したものを $\tilde{F}$ とすると, $\tilde{F}$ は $\mathcal{L} = \mathcal{N}\mathcal{R}$ 階の QTT となる. ボンド次元は χ_ℓ ($\ell = 1, 2, \dots, \mathcal{L} - 1$) とする. TT コア 1 つあたりのデータ量 (要素数) は $2 \times \chi_{l-1} \times \chi_\ell$ である. したがって QTT 全体のデータ量 D は

$$D = \sum_{\ell=1}^{\mathcal{L}-1} 2\chi_{\ell-1}\chi_\ell \quad (4.3.1)$$

となる. 最大ボンド次元を χ とすると, D は次のように上から抑えられる.

$$D \leq 2\chi^2\mathcal{L} \quad (4.3.2)$$

厳密な TT を構成する場合, 最大ボンド次元は $\mathcal{L}$ に対して指数的に大きくなる. したがってデータ量も $\mathcal{L}$ の指数で増大する. そのためこのままでは QTT を使う利点がないが, 近似によりボンド次元を小さく抑えることができればデータ量を削減できる. 許容誤差の範囲でどこまでボンド次元を削減できるかは関数 f の構造やインデックスの並び順に依存する. ボンド次元を小さく抑えることができる場合 (χ が $\mathcal{L}$ の冪程度), 関数 f は低ランク構造を持つという. 低ランク構造を持つかどうかは実際にボンド次元を調べなければわからないが, 解析的に低ランク構造を有することがわかっている関数もある. また, 圧縮性の悪い関数であっても, インデックスの並び順を工夫することでより良い低ランク構造を見出すこともできる. 特に多変数関数の場合はインデックスの並び順は重要である. 典型的な例は 4.4 節で紹介する.

4.4 QTT で圧縮できる例

ここでは QTT によって情報圧縮可能な例、つまり低ランク構造を持つことが分かっている関数をいくつか紹介する。より多くの例は、QTT を場の量子論に適用した先行研究 [3] に詳しい。

■指数関数

指数関数 e^{ax} はボンド次元 1 で厳密な TT を構成できる [3, 42]。

$$\begin{aligned} e^{ax} &= \exp \left(a \sum_{\ell=1}^{\mathcal{R}} \frac{\sigma_{\ell}}{2^{\ell}} \right) \\ &= \exp \left(a \frac{\sigma_1}{2} \right) \exp \left(a \frac{\sigma_2}{2^2} \right) \cdots \exp \left(a \frac{\sigma_{\mathcal{R}}}{2^{\mathcal{R}}} \right) \end{aligned} \quad (4.4.1)$$

$$= \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_{\mathcal{R}-1}=1}^1 \left[e^{a\sigma_1/2} \delta_{1\alpha_1} \right] \left[e^{a\sigma_2/2^2} \delta_{\alpha_1\alpha_2} \right] \cdots \left[e^{a\sigma_{\mathcal{R}}/2^{\mathcal{R}}} \delta_{\alpha_{\mathcal{R}-1}1} \right]. \quad (4.4.2)$$

(4.4.2) の通り、ボンド次元 $|\alpha_{\ell}| = 1$ である。また、(4.4.1) のようにローカルインデックスが分離された積で書かれる場合、上と同様に Dirac のデルタを挟み込むことができ、ボンド次元は 1 である。

■三角関数

三角関数は 2 つの指数関数の和として表現できるため、ボンド次元は 2 となる (Sec. 3.3.2)。

$$\cos x = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2}, \quad \sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i} \quad (4.4.3)$$

■Green 関数

ポール表現されたスペクトルの Green 関数を考える。スペクトルは

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{i=1}^{N_p} c_i \delta(\varepsilon - \varepsilon_i) \quad (4.4.4)$$

である。 N_p はポールの数である。松原振動数、虚時間の Green 関数はそれぞれ以下で与えられる：

$$G(i\omega_n) = \int d\varepsilon \frac{\rho(\varepsilon)}{i\omega_n - \varepsilon} = \sum_{i=1}^{N_p} \frac{c_i}{i\omega_n - \varepsilon_i} \quad (4.4.5)$$

$$G(\tau) = - \sum_{i=1}^{N_p} \frac{c_i e^{-\tau \varepsilon_i}}{1 + e^{-\beta \varepsilon_i}}. \quad (4.4.6)$$

β は逆温度である． $G(\tau)$ は指数関数の和であるため， ボンド次元 N_p で TT を構成できる．

■単位行列

サイズが $2^{\mathcal{R}} \times 2^{\mathcal{R}}$ の単位行列を考える． 単位行列は全ての特異値が自明に 1 であるため， 低ランク近似ができない行列である． しかし， quantics 表現を用いることで低ランク構造を持ち， 圧縮できるようになる． 単位行列は 2 変数関数 $\delta(x_1 - x_2)$ を離散化して得られる． x_1, x_2 それぞれを quantics 表現により離散化する：

$$\delta(x - y) \rightarrow \delta_{\sigma_{11}\sigma_{21}} \delta_{\sigma_{12}\sigma_{22}} \cdots \delta_{\sigma_{1\mathcal{R}}\sigma_{2\mathcal{R}}} . \quad (4.4.7)$$

元々の行列の場合， 成分は $2^{2\mathcal{R}}$ 個だが， QTT 表現の場合は合計 $4\mathcal{R}$ 個となり， 指数的に少ない要素数で表現できる．

■対角的な構造を持つ関数

以下のような 2 変数関数を考える．

$$f(x_1, x_2) = \frac{\gamma}{(x_1 - x_2)^2 + \gamma^2} . \quad (4.4.8)$$

$f(x_1, x_2)$ は図 4.2(a) のように $x_1 = x_2$ 付近で大きな値を取る． ピークは γ 程度幅を持つ． $\gamma \rightarrow 0$ でデルタ関数になる． x_1, x_2 それぞれを 12 桁で quantics 表現し， テンソルを構成する． 図 4.2(b) は QTT のインデックス順序ごとのボンド次元を示す． 点線は非圧縮 (特異値の切り捨てをしない場合) のボンド次元で， TT の中心に向け指数的に増大することがわかる． 連続変数の順番 (i 順)， 長さスケールの順番 (ℓ 順) 共に非圧縮の場合よりは圧縮できるが， 長さスケール順はさらに 10 倍程圧縮が可能である． データサイズで考えると， 非圧縮の場合は縦軸と横軸それぞれ 2^{12} グリッドのため ~ 10 MB である． しかし， 圧縮したものはそれぞれ i 順が ~ 100 KB， ℓ 順が ~ 1 KB と大幅にデータ量の削減に成功している．

連続変数順と長さスケール順の圧縮性の違いは， 異なる長さスケールごとの相関が小さいことを表している． 長さスケール順に並べる場合は TT の左から長さスケールが単調に小さくなるのに対して， i 順の場合は TT の中央で最小スケールのインデックスから最大スケールのインデックスに切り替わってしまい， これが圧縮性に影響を与えていると考えられる．

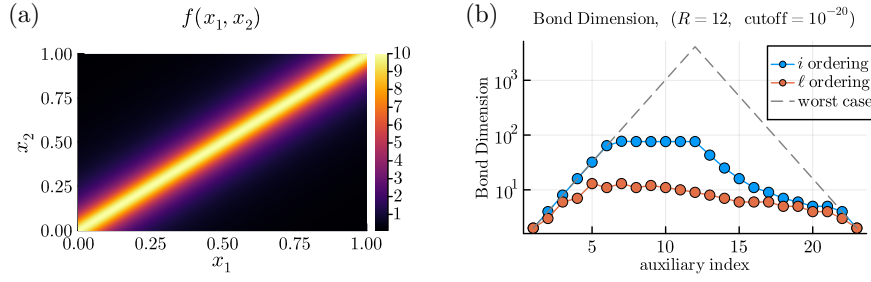


図 4.2. (a) $f(x_1, x_2)$, $\gamma = 0.1$ のプロット. (b) 連続変数順 (i 順), 長さスケール順 (l 順), 非圧縮のボンド次元. 長さスケール順のインデックス配置の方がより圧縮できる.

4.5 QTT 形式の Riemann 和

Riemann 和 (区分求積法) は, 定積分 $I = \int_a^b dx f(x)$ を数値的に計算する最も単純な方法である. 積分区間 $[a, b]$ を間隔 h の微小区間に分割し, それぞれの区間で関数を 0 次近似する. 一般的に知られているように, この方法の誤差は区間の幅 h に比例するため非効率である. 精度を上げる一つの方法は区間内の関数をより高次の多項式で補完することである. 例えば, 効率的な数値積分法として知られる Gauss 求積法は, 関数を直交多項式で近似する. このような方法は性質の良い関数の場合は効率的である一方, 鋭いピークや不連続点 (面) など非常に局所的な構造を持つ関数の場合は逆に非効率になる.

QTT による低ランク構造を利用することで局所構造に影響を受けない積分法を紹介する. QTT による数値積分は Riemann 和に基づく. 関数が低ランク構造を持つ場合は指数的にグリッド幅を小さくできるため, Riemann 和の h は $2^{-\mathcal{R}}$ となり誤差は指数収束する. 簡単のため区間は $[0, 1)$ とする. 積分区間を等間隔 $h = 2^{-\mathcal{R}}$ に分割する. 分割数は $2^{\mathcal{R}}$ である.

$$I = \int_0^1 dx f(x) \simeq \frac{1}{2^{\mathcal{R}}} \sum_{i=1}^{2^{\mathcal{R}}} f(x_i) \quad (4.5.1)$$

$$= \frac{1}{2^{\mathcal{R}}} \sum_{\sigma_1=1}^2 \sum_{\sigma_2=1}^2 \cdots \sum_{i_{\mathcal{R}}=1}^2 F_{\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_{\mathcal{R}}} \quad (4.5.2)$$

$$= \frac{1}{2^{\mathcal{R}}} \sum_{\sigma_1=1}^2 \cdots \sum_{\sigma_{\mathcal{R}}=1}^2 \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_{\mathcal{R}-1}} F_{\sigma_1 \alpha_1}^{(1)} F_{\alpha_1 \sigma_2 \alpha_2}^{(2)} \cdots F_{\alpha_{\mathcal{R}-1} \sigma_{\mathcal{R}}}^{(\mathcal{R})} \quad (4.5.3)$$

$$= \sum_{\alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_{\mathcal{R}-1}} \left(\frac{1}{2} \sum_{\sigma_1=1}^2 F_{\sigma_1 \alpha_1}^{(1)} \right) \left(\frac{1}{2} \sum_{\sigma_2=1}^2 F_{\alpha_1 \sigma_2 \alpha_2}^{(2)} \right) \cdots \left(\frac{1}{2} \sum_{\sigma_{\mathcal{R}}=1}^2 F_{\alpha_{\mathcal{R}-1} \sigma_{\mathcal{R}}}^{(\mathcal{R})} \right). \quad (4.5.4)$$

第 5 章

Tensor cross interpolation

5.1 Cross interpolation

前章までは SVD に基づく TT の構成を説明していた。しかし、SVD の定義から、分解には行列要素全てが必要となり、巨大な行列の場合は計算コストが増加する。そこで、SVD に代わる分解方法として、Cross Interpolation (CI)[59] に基づく TT 構成の定式化を紹介する。CI は、分解する行列やテンソルの一部の要素のみを利用するため、巨大な行列・テンソルの場合より効率的である。まずは CI に基づく行列分解を説明し、それを多次元に拡張する形で CI による TT 構成法 (Tensor Cross Interpolation: TCI)[59, 60] を説明する。

5.1.1 Matrix cross interpolation

行列 A はサイズ $m \times n$ で、ランク χ とする。行と列のインデックスの集合を $\mathbb{I} = \{1, 2, \dots, m\}$, $\mathbb{J} = \{1, 2, \dots, n\}$ とする。また、 $\mathbb{I}$, $\mathbb{J}$ から $\tilde{\chi}$ 個のインデックスを抜き出した部分集合として $\mathcal{I} = \{i_1, i_2, \dots, i_{\tilde{\chi}}\} \subset \mathbb{I}$, $\mathcal{J} = \{j_1, j_2, \dots, j_{\tilde{\chi}}\} \subset \mathbb{J}$ を定義する。 A から $\mathcal{I}$, $\mathcal{J}$ を抜き出した部分行列を $A(\mathcal{I}, \mathcal{J})$ と書く。この定義から、 $A = A(\mathbb{I}, \mathbb{J})$ である。例として、 A が次のようなサイズ 5×6 の行列であるとする。

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} & a_{56} \end{pmatrix} \quad (5.1.1)$$

$\mathcal{I} = \{1, 3\}$, $\mathcal{J} = \{2, 3, 6\}$ のとき、 $A(\mathcal{I}, \mathcal{J})$ は

$$A(\mathcal{I}, \mathcal{J}) = \begin{pmatrix} a_{12} & a_{13} & a_{16} \\ a_{32} & a_{33} & a_{36} \end{pmatrix} \quad (5.1.2)$$

である。

以降, $\tilde{\chi} < \chi$ として, $\mathcal{I}, \mathcal{J}$ は $A(\mathcal{I}, \mathcal{J})$ が正則になるよう選ぶとする. また, CI では $\mathcal{I}, \mathcal{J}$ による部分行列はピボット行列とも呼ばれるため, $P = A(\mathcal{I}, \mathcal{J})$ と書くことにする. P の成分をピボット, $\mathcal{I}, \mathcal{J}$ をピボットリストと呼ぶ.

CI は, ピボットリストによって選ばれた行と列をもとに行列 A の近似的な分解を与える.

$$A(\mathbb{I}, \mathbb{J}) \simeq A(\mathbb{I}, \mathcal{J})P^{-1}A(\mathcal{I}, \mathbb{J}) = \tilde{A}(\mathbb{I}, \mathbb{J}) \quad (5.1.3)$$

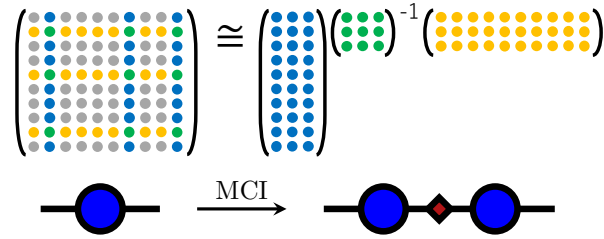


図 5.1. MCI の概念図. (上) 黄色が $\mathcal{I}$, 青色が $\mathcal{J}$, 交差する成分がピボットである. 灰色の成分は CI では利用されない. (下) テンソルダイアグラムで表した CI による行列分解.

CI による近似は以下の性質を持つ.

- (i). 任意の $\tilde{\chi} (< \chi)$ に対して, $\mathcal{I}, \mathcal{J}$ によって指定された行と列の成分は, 厳密にもとの行列 A の成分に一致している. つまり

$$\tilde{A}(\mathcal{I}, \mathbb{J}) = A(\mathcal{I}, \mathbb{J}), \quad \tilde{A}(\mathbb{I}, \mathcal{J}) = A(\mathbb{I}, \mathcal{J}) \quad (5.1.4)$$

- (ii). $\tilde{\chi} = \chi$ のとき, $\tilde{A} = A$ である.

CI による近似の精度は選ばれるピボットの数 $\tilde{\chi}$ に依存する. つまり, $\tilde{\chi}$ を大きくとれば良い近似になりやすい. また, ピボットをうまく選択することで与えられた $\tilde{\chi}$ での精度を高めることができる. 選択方法として, Maximal Volume Algorithm や 5.1.2 で説明する Partial rank-revealing LU 分解などが知られている.

■CI の具体例とピボット選択アルゴリズム

具体例をもとに性質 (i), (ii) が成り立つことを確認する. また, ピボット選択方法として, Maximal Volume Algorithm を紹介する.

以下のような行列 A を考え、CI を行う.

$$A = \begin{pmatrix} 9 & 3 & 7 & 3 & 4 & 0 \\ 2 & 7 & 9 & 6 & 6 & 8 \\ 4 & 0 & 9 & 0 & 6 & 9 \\ 4 & 5 & 6 & 8 & 5 & 5 \\ 5 & 4 & 0 & 6 & 6 & 4 \end{pmatrix} \quad (5.1.5)$$

例として $\mathcal{I} = \{1, 2, 3\}$, $\mathcal{J} = \{1, 2, 3\}$ と選ぶと, 次のように A を分解できる.

$$\begin{pmatrix} 9 & 3 & 7 & 3 & 4 & 0 \\ 2 & 7 & 9 & 6 & 6 & 8 \\ 4 & 0 & 9 & 0 & 6 & 9 \\ 4 & 5 & 6 & 8 & 5 & 5 \\ 5 & 4 & 0 & 6 & 6 & 4 \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} 9 & 3 & 7 \\ 2 & 7 & 9 \\ 4 & 0 & 9 \\ 4 & 5 & 6 \\ 5 & 4 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 9 & 3 & 7 \\ 2 & 7 & 9 \\ 4 & 0 & 9 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 9 & 3 & 7 & 3 & 4 & 0 \\ 2 & 7 & 9 & 6 & 6 & 8 \\ 4 & 0 & 9 & 0 & 6 & 9 \end{pmatrix} \equiv \tilde{A} \quad (5.1.6)$$

右辺の積をとり, 元の行列 A との差をとると, 以下のようになる.

$$E = A - \tilde{A} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3.53882 & 1.27294 & 2.40471 \\ 0 & 0 & 0 & 2.18118 & 6.60706 & 10.5553 \end{pmatrix}. \quad (5.1.7)$$

ピボットとして選ばれた行と列に関しては A と $\tilde{A}$ で一致しており, 性質 (i) が成り立つことがわかる. また, $\text{rank} A = 5$ であるため, 例えば $\mathcal{I} = \mathcal{J} = \{1, 2, 3, 4, 5\}$ などとすれば A と $\tilde{A}$ が厳密に一致する (性質 (ii)) ことも確認できる.

式 (5.1.7) を見ると, 確かに選択された行と列では一致しているが, 右下の成分は値が大きく異なることがわかる. 選択されない成分にどの程度の誤差がのるのは, 行と列の選択方法に依存する. 選択のアルゴリズムはいくつか知られており, ここでは Maximal Volume Algorithm (MVA) を紹介する. MVA はピボット行列の行列式が大きくなるように行と列を選択する方法である. $\chi = 3$ の場合, A の行と列の選び方の組みは ${}_5C_3 \times {}_6C_3 = 200$ 通りある. ただし, 200 通りの中からピボット行列の逆行列が存在しない場合は除いて計算する. 全ての可能な組み合わせでピボット行列の行列式と最大値ノルムをプロットしたものが図. 5.2 である. MVA は経験的な方法のため, 行列式とノルムに単調な関係は必ずしも存在しないが, 傾向としてピボット行列の行列式が大きいほど誤差の最大値ノルムは小さくなることがわかる.

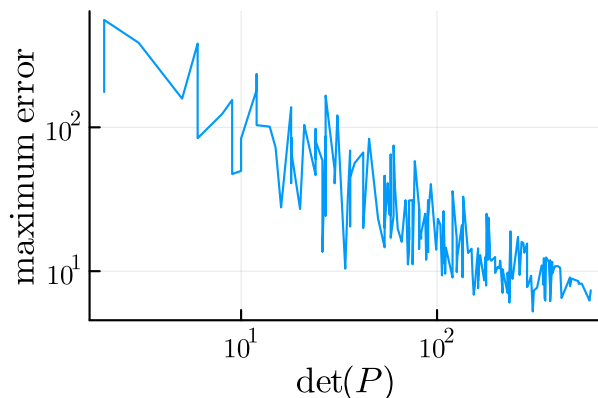


図 5.2. すべての可能な行と列の組に対するピボット行列の行列式と最大値ノルムの関係

5.1.2 Partially rank-revealing LU 分解

ピボットの選択方法として、行列式に着目した MVA を説明した。ここでは、CI による分解をより安定に行うための方法を紹介する。

行列 A を行列分解し $\tilde{A}$ を得る際、 $\tilde{A}$ のランクを任意に決められるような分解を rank-revealing 分解という。行列 A を $A = XDY$ と分解するとき、 X, Y が良条件^{*1}の行列かつ D が対角行列の場合、この分解は rank-revealing な分解である。本節では、 X, Y がそれぞれ下三角行列、上三角行列となる^{*2}ような、rank-revealing な LU 分解を説明する。

LU 分解とは、行列 A を $A = LDU$ と分解するものである。ここで L, D, U はそれぞれ下三角行列、対角行列、上三角行列である。分解にはガウスの消去法というアルゴリズムを用いるのが一般的である。Partial rank-revealing LU 分解 (prrLU 分解) とは LU 分解の 1 種であり、次の 2 つの性質を持つ。

1. Rank-revealing である：選択されたピボット数と行列ランクが関連付いている。
2. Partial である：ガウスの消去法を任意のタイミングで停止することができ、その時の行列ランクはピボット数である。

行列 A に対するランク χ の prrLU 分解は以下である：

$$PAQ = \tilde{L}\tilde{D}\tilde{U} + \varepsilon. \quad (5.1.8)$$

^{*1} ある行列 A に対して、条件数という数値計算の安定性を示す指標を定義することができる。定義の仕方は複数通り存在するが、その 1 つが $\text{cond } A = \sigma_{\max}(A)/\sigma_{\min}(A)$ である。 $\sigma_{\max}(A), \sigma_{\min}(A)$ はそれぞれ行列 A の最大、最小特異値である。条件数の小さい場合は良条件、大きい場合は悪条件という。特異値による定義の場合、条件数の最小値は 1 である。一般にユニタリ行列の条件数は 1 である。

^{*2} rank-revealing LU 分解の場合、 X, Y が常に正方であるとは限らない。ここでは X, Y の一部が上 (下) 三角行列になっていることを単に上 (下) 三角行列と表現している。

ここで, P, Q は行や列の入れ替えを表す基本行列の積, $\tilde{L}, \tilde{U}$ はそれぞれ

$$\tilde{L} = \begin{pmatrix} L_{11} \\ L_{21} \end{pmatrix}, \quad \tilde{U} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \end{pmatrix} \quad (5.1.9)$$

であり, L_{11} と U_{11} はサイズ $\chi \times \chi$ の下三角行列と上三角行列である. D はサイズ $\chi \times \chi$ の対角行列である. ε は残差を表す行列であり, $(\chi + 1, \chi + 1)$ 成分以下に非ゼロの要素を持つ. この分解はガウスの消去法を繰り返し用いることで導出できる. 導出過程の詳細は付録 A にまとめた.

prrLU 分解と行列の CI は等価な分解であることが知られている. (5.1.8) の第 1 項は下の左辺ように書くことができる:

$$\begin{pmatrix} L_{11}DU_{11} \\ L_{21}DU_{11} \end{pmatrix} (L_{11}DU_{11})^{-1} (L_{11}DU_{11} \quad L_{11}DU_{12}) = \begin{pmatrix} A_{11} \\ A_{21} \end{pmatrix} (A_{11})^{-1} (A_{11} \quad A_{12}) \quad (5.1.10)$$

右辺について, $A_{ij} = A(\mathcal{I}_i, \mathcal{J}_j)$ である. A_{ij} と L, U との対応は以下である.

$$A_{11} = P = L_{11}DU_{11}, \quad A_{21} = L_{21}DU_{11}, \quad A_{12} = L_{11}DU_{12}, \quad (5.1.11)$$

$$\begin{pmatrix} A_{11} \\ A_{21} \end{pmatrix} (A_{11})^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{11} \\ L_{21}L_{11}^{-1} \end{pmatrix}, \quad (A_{11})^{-1} (A_{11} \quad A_{12}) = (\mathbb{1}_{11} \quad U_{11}^{-1}U_{12}). \quad (5.1.12)$$

図 5.3 は上記関係を表す概念図である. 中央は元の行列 A^{*3} であり, 左辺は MCI による分解, 右辺は prrLU 分解である.

以上のように, MCI と prrLU 分解は数学的に等価である. しかし, 逆行列の計算が必要な MCI に対して, prrLU 分解は逆行列を明示的に計算する必要が無いいため, 数値的により安定である.

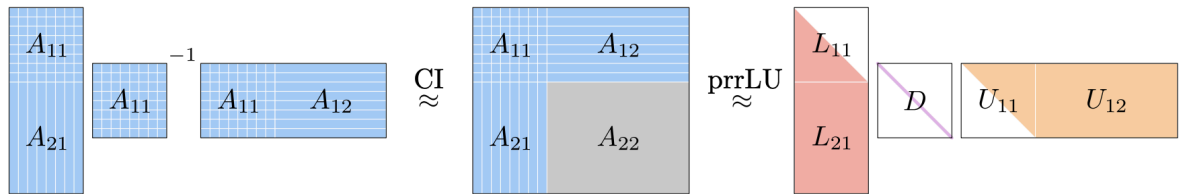


図 5.3. MCI と prrLU の関係. [60] から転載.

5.2 Tensor cross interpolation 公式

TT を構成する方法として, SVD を利用して行列分解を繰り返す方法は低ランク近似をする場合は Frobenius ノルムの意味で最良な近似である. しかし, 分解するテンソルが

^{*3} ただし, 選択された行と列が左上に位置するよう, 適切な置換 P, Q を行っている.

非常に巨大な場合、SVD による構成は計算コストが高く、困難である。SVD は全ての行列要素をメモリに格納する必要があり、なおかつ計算量が行列サイズの 3 乗でスケールするためである。本研究で対象とする関数は要素数が $\sim \mathcal{O}(10^{12})$ ほどのテンソルへ離散化されている。このような巨大なテンソルを TT 分解するためには SVD とは異なる手法が必要である。

本節では Tensor Cross Interpolation (TCI) と呼ばれる、テンソルから少数の要素をサンプリングすることにより TT を推定する手法を紹介する。フロベニウスノルムの意味で最良な低ランク近似を与える SVD と比較すると、TT のボンド次元に対する精度は劣るが、大きなテンソルほど計算速度は SVD を凌駕することが知られている [4]。

5.2.1 TCI の特徴

大きなテンソル F_σ から近似的な TT $\tilde{F}_\sigma$ を求めるアルゴリズムを考えたい。しかし、メモリの制約により SVD のような行列要素を全て利用する分解アルゴリズムは使用することができない。そこで、SVD とは異なる新たな分解アルゴリズムとして TCI が提案された [41, 58]。TCI は以下の性質を満たす。

1. F が低ランク構造を持っていて、 $\tilde{F}$ を推定するために必要なサンプリング点の数が $d^\mathcal{L}$ より十分に小さい。
2. なんらかのノルムで測った誤差 $\|F - \tilde{F}\|$ がサンプルされたすべての要素に対して許容誤差 ε より小さくなる。
3. 任意のインデックス σ に対し、 F の要素は高速に評価可能である。

5.2.2 Tensor cross interpolation の定義

TCI のアルゴリズムを説明するためにいくつかの新しい記号を導入する。本節では推定するテンソルを F_σ 、TCI により推定された TT を $\tilde{F}_\sigma$ と表す。 $F_\sigma, \tilde{F}_\sigma$ は $\mathcal{L}$ 階テンソルであり、 $\sigma = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_\mathcal{L}\}$ は $\mathcal{L}$ 個のインデックスをまとめた表記である。インデックス σ_ℓ ($\ell = 1, \dots, \mathcal{L}$) の次元を d_ℓ とし、インデックス σ_ℓ のとりうる値は ℓ のインデックス集合 $\mathbb{S}_\ell$ の元とする。つまり $\sigma_\ell \in \mathbb{S}_\ell$, $|\mathbb{S}_\ell| = d_\ell$ である。

インデックス集合の直積集合として、マルチ行インデックス集合 $\mathbb{I}_\ell$ 、マルチ列インデックス集合 $\mathbb{J}_\ell$ を以下で定義する。

$$\begin{cases} \mathbb{I}_\ell = \mathbb{S}_1 \times \mathbb{S}_2 \times \dots \times \mathbb{S}_\ell \\ \mathbb{J}_\ell = \mathbb{S}_\ell \times \mathbb{S}_{\ell+1} \times \dots \times \mathbb{S}_\mathcal{L} \end{cases} \quad (5.2.1)$$

定義より、 $\mathbb{I}_\mathcal{L} = \mathbb{J}_1$ が導かれる。また、 $\mathbb{I}_\mathcal{L}, \mathbb{J}_1$ は全てのローカルインデックスを含むため

$\sigma \in \mathbb{I}_{\mathcal{L}}$ (or $\mathbb{J}_1$) である. マルチ行インデックス i_ℓ , マルチ列インデックス j_ℓ はそれぞれ $\mathbb{I}_\ell, \mathbb{J}_\ell$ の要素であり,

$$\begin{cases} i_\ell = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_\ell) \\ j_\ell = (\sigma_\ell, \sigma_{\ell+1}, \dots, \sigma_{\mathcal{L}}) \end{cases} \quad (5.2.2)$$

である. したがって $i_\ell \oplus j_{\ell+1} = \sigma$ が成り立つ.

次に $\mathbb{I}, \mathbb{J}$ の部分集合としてピボットというインデックスのリストを導入する. ピボットのリスト $\mathcal{I}_\ell, \mathcal{J}_\ell$ はそれぞれ $\mathbb{I}_\ell, \mathbb{J}_\ell$ の部分集合である.

$$\mathcal{I}_\ell \subseteq \mathbb{I}_\ell, \quad \mathcal{J}_\ell \subseteq \mathbb{J}_\ell. \quad (5.2.3)$$

ピボットリストを用いて, Tensor Cross Interpolation の公式 (TCI 公式) に必要な 3 種類のテンソルを定義する.

まず, 0 個のローカルインデックスを持つピボット行列 P_ℓ はテンソル F_σ の 0 次スライスとして

$$[P_\ell]_{ij} \equiv F_{i \oplus j} \quad (5.2.4)$$

と定義される. $i \in \mathcal{I}_\ell, j \in \mathcal{J}_{\ell+1}$ である. また, P_ℓ は正方行列であり, 行列サイズ χ_ℓ は $\chi_\ell = |\mathcal{I}_\ell| = |\mathcal{J}_{\ell+1}|$ である. この際, ピボット行列の逆行列 P_ℓ^{-1} が存在するようにピボットリストが選択されている必要がある.

次に 1 個のローカルインデックスを持つ T テンソル T_ℓ はテンソル F_σ の 1 次スライスとして

$$[T_\ell]_{i\sigma j} \equiv F_{i \oplus \sigma \oplus j} \quad (5.2.5)$$

と定義される. $i \in \mathcal{I}_{\ell-1}, \sigma \in \mathbb{S}_\ell, j \in \mathcal{J}_{\ell+1}$ $T_{i\sigma j}$ はローカルインデックスを分離した記法 $[T_\ell^{\sigma_\ell}]_{ij}$ と書く場合もある.

最後に, 2 個のローカルインデックスを持つ Π テンソル Π_ℓ はテンソル F_σ の 2 次スライスとして

$$[\Pi_\ell]_{i\sigma\sigma'j} = F_{i \oplus (\sigma, \sigma') \oplus j} \quad (5.2.6)$$

と定義される. $i \in \mathcal{I}_{\ell-1}, \sigma \in \mathbb{S}_\ell, \sigma' \in \mathbb{S}_{\ell+1}, j \in \mathcal{J}_{\ell+2}$ である.

TCI 公式は (5.2.4), (5.2.5) を用いて以下で定義される.

$$F_\sigma \simeq \tilde{F}_\sigma = T_1^{\sigma_1} P_1^{-1} \dots T_\ell^{\sigma_\ell} P_\ell^{-1} T_\ell^{\sigma_{\ell+1}} \dots P_{\mathcal{L}-1}^{-1} T_{\mathcal{L}}^{\sigma_{\mathcal{L}}}, \quad (5.2.7)$$

$$\begin{array}{c} F_\sigma \\ \hline \sigma_1 \quad \sigma_2 \quad \dots \quad \sigma_{\mathcal{L}} \end{array} \simeq \begin{array}{c} \tilde{F}_\sigma \\ \hline i_0 \times \bullet \xrightarrow{T_1} \bullet \xrightarrow{P_1^{-1}} \bullet \xrightarrow{T_2} \bullet \xrightarrow{\dots} \bullet \xrightarrow{P_{\mathcal{L}-1}^{-1}} \bullet \xrightarrow{T_{\mathcal{L}}} \bullet \times j_{\mathcal{L}+1} \\ \hline \sigma_1 \quad \quad \quad i_1 \quad \sigma_2 \quad \quad \quad j_{\mathcal{L}} \quad i_{\mathcal{L}-1} \quad \sigma_{\mathcal{L}} \end{array} \quad (5.2.8)$$

TCI 公式による TT の推定は、テンソル F_σ または関数 $f(\mathbf{x})$ をインプットとして、T テンソルとピボット行列の積に分解された $\tilde{F}_\sigma$ を返す。

TCI 公式の精度や安定性はピボットリストの選び方に依存する。本節の最後に、安定性のためにピボットリストに課す条件を整理し、次の節ではピボットリストの選択を行うための相補的な 2 種類のアルゴリズム、局所的なピボット選択とピボットの挿入について説明する。

5.2.3 ピボットリストの入れ子条件

ピボットリスト $\mathcal{I}_\ell, \mathcal{J}_\ell$ に対して、以下のように入れ子関係を定義する。

1. ピボットリスト $\mathcal{I}_\ell, \mathcal{I}_{\ell-1}, \mathbb{S}_\ell$ に対して $\mathcal{I}_\ell \subseteq \mathcal{I}_{\ell-1} \times \mathbb{S}_\ell$ の関係があるとき、 $\mathcal{I}_\ell$ は $\mathcal{I}_{\ell-1}$ に対して入れ子になっているといい、 $\mathcal{I}_{\ell-1} < \mathcal{I}_\ell$ と書く。別の表現として、 $\mathcal{I}_\ell$ の任意の元から最後のインデックスを除いたものが $\mathcal{I}_{\ell-1}$ に属しているともいえる。またこの時、ピボット行列 P_ℓ は T_ℓ のスライスになる。
2. ピボットリスト $\mathcal{J}_\ell, \mathcal{J}_{\ell+1}, \mathbb{S}_\ell$ に対して、 $\mathcal{J}_\ell \subseteq \mathbb{S}_\ell \times \mathcal{J}_{\ell+1}$ の関係があるとき、 $\mathcal{J}_\ell$ は $\mathcal{J}_{\ell+1}$ に対して入れ子になっているといい、 $\mathcal{J}_\ell > \mathcal{J}_{\ell+1}$ と書く。別の表現として、 $\mathcal{J}_{\ell+1}$ の任意の元から最初のインデックスを除いたものが $\mathcal{J}_\ell$ に属しているともいえる。またこの時、ピボット行列 $P_{\ell-1}$ は T_ℓ のスライスになる。

上記の入れ子関係を用いて以下の入れ子条件を定義する。

(i) ℓ までの左入れ子条件:

$$\mathcal{I}_0 < \mathcal{I}_1 < \cdots < \mathcal{I}_\ell \quad (5.2.9)$$

(ii) ℓ からの右入れ子条件:

$$\mathcal{J}_\ell > \mathcal{J}_{\ell+1} > \cdots > \mathcal{J}_{\mathcal{L}+1} \quad (5.2.10)$$

(iii) 完全入れ子条件:

$$\mathcal{I}_0 < \mathcal{I}_1 < \cdots < \mathcal{I}_{\mathcal{L}-1} \quad \text{かつ} \quad \mathcal{J}_2 > \mathcal{J}_{\ell+1} > \cdots > \mathcal{J}_{\mathcal{L}+1} \quad (5.2.11)$$

以下の具体例をもとに入れ子条件について確認する。 $\mathcal{L} = 5$ で、 $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_5 \in \{0, 1\}$ とする。表 5.1 は一部の左入れ子条件が成り立つ例である。 $\mathcal{I}_1 = \{(1)\}$ より、 $\mathcal{I}_1 \times \mathbb{S}_2 = \{(1, 0), (1, 1)\}$ のため $\mathcal{I}_2 \subseteq \mathcal{I}_1 \times \mathbb{S}_2$ が成り立つため $\ell = 2$ までの左入れ子条件を満たす。しかし、 $\mathcal{I}_2 \times \mathbb{S}_3 = \{(1, 1, 0), (1, 1, 1)\}$ のため $(1, 0, 1) \in \mathcal{I}_3$ が漏れており $\mathcal{I}_3 \not\subseteq \mathcal{I}_2 \times \mathbb{S}_3$ となる。したがって $\ell = 3$ までの左入れ子条件は満たされない。

表 5.2 は完全入れ子条件が成り立つ例である。すべての $\mathcal{I}_\ell, \mathcal{J}_\ell$ について $\ell = 4$ までの左入れ子条件と $\ell = 2$ からの右入れ子条件を満たすことを確認できる。

ℓ	$\mathcal{I}_\ell$
1	$\mathcal{I}_1 = \{(1)\}$
2	$\mathcal{I}_2 = \{(1, 1)\}$
3	$\mathcal{I}_3 = \{(1, 1, 1), (1, 0, 1)\}$
4	$\mathcal{I}_4 = \{(1, 1, 1, 0), (1, 0, 1, 1)\}$

表 5.1. 一部の左入れ子条件が成立する場合.

ℓ	$\mathcal{I}_\ell$	$\mathcal{J}_{\ell+1}$
1	$\mathcal{I}_1 = \{(1)\}$	$\mathcal{J}_2 = \{(1, 1, 0, 0), (1, 0, 0, 0)\}$
2	$\mathcal{I}_2 = \{(1, 1), (1, 0)\}$	$\mathcal{J}_3 = \{(1, 0, 0), (0, 0, 0), (1, 1, 1)\}$
3	$\mathcal{I}_3 = \{(1, 1, 0), (1, 1, 1), (1, 0, 0)\}$	$\mathcal{J}_4 = \{(0, 0), (1, 1)\}$
4	$\mathcal{I}_4 = \{(1, 1, 0, 1), (1, 0, 0, 0)\}$	$\mathcal{J}_5 = \{(0), (1)\}$

表 5.2. 完全入れ子条件が成立する場合.

ある ℓ について左入れ子条件と右入れ子条件が成り立つとき, T_ℓ について以下の関係が成り立つ.

$$\tilde{F}_{i \oplus \sigma \oplus j} = [T_\ell]_{i \sigma j} = F_{i \oplus \sigma \oplus j} \quad (5.2.12)$$

これは, 推定された $\tilde{F}$ と推定元の F が, 選ばれたピボットにおいて厳密に一致することを表している. したがって, ピボットリストが完全入れ子条件を満たす場合, $\tilde{F}$ はすべての T_ℓ , P_ℓ で厳密であるため補完と言える.

5.3 局所的なピボット探索アルゴリズム

1 つめのアルゴリズムとして, 一部分のローカルインデックスに着目し, 局所的に最適なピボットを探す 2-site updates と呼ばれる方法を説明する. 2-site updates は, Sec. 5.1.2 で説明した prrLU 分解を基礎としている.

$\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{\mathcal{L}})$ をインデックスとする $\mathcal{L}$ 階テンソル F_σ から, TCI を用いて TT $\tilde{F}$ を構成する. このとき, 事前に決められた許容誤差 ε に対して, $\|F - \tilde{F}\|_\infty < \varepsilon$ を満たすよう構成されたとする. $\|\dots\|$ は最大値ノルムである.

はじめに, 初期ピボットとして $F_\sigma \neq 0$ となるような $\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_1, \dots, \hat{\sigma}_{\mathcal{L}})$ を決め, すべての $\ell = 1, 2, \dots, \mathcal{L}-1$ に対してピボットリストを $\mathcal{I}_\ell = \{(\hat{\sigma}_1, \dots, \hat{\sigma}_\ell)\}$, $\mathcal{J}_\ell = \{\hat{\sigma}_{\ell+1}, \dots, \hat{\sigma}_{\mathcal{L}}\}$ とする.

ℓ を $1, \dots, \mathcal{L} - 1$ の中で順に動かしながら, 以下の操作を繰り返す. まず, 4 階の $\Pi_{i_{\ell-1}\sigma_\ell\sigma_{\ell+1}j_{\ell+2}}$ テンソルを生成し, インデックスを結合することで以下のような行列に変形する.

$$[\Pi_\ell]_{i_{\ell-1}\sigma_\ell\sigma_{\ell+1}j_{\ell+2}} \longrightarrow [\Pi_\ell]_{(i_{\ell-1}\sigma_\ell)(\sigma_{\ell+1}j_{\ell+2})} \left(= F(\mathcal{I}_{\ell-1} \times \mathbb{S}_\ell, \mathbb{S}_{\ell+1} \times \mathcal{J}_{\ell+2}) \right) \quad (5.3.1)$$

行列化された Π テンソルを LU 分解する.

$$[\Pi_\ell]_{i_{\ell-1}\sigma_\ell\sigma_{\ell+1}j_{\ell+2}} \simeq [T'_\ell]_{i_{\ell-1}j'_{\ell+1}} [P'_\ell]_{j'_{\ell+1}i'_\ell}^{-1} [T'_\ell]_{i'_\ell j_{\ell+2}} \quad (5.3.2)$$

ここで, $i'_\ell \in \mathcal{I}'_\ell \subset \mathcal{I}_{\ell-1} \times \mathbb{S}_\ell$ と $j'_{\ell+1} \in \mathcal{J}'_{\ell+1} \subset \mathbb{S}_{\ell+1} \times \mathcal{J}_{\ell+2}$ は新たに選択されたピボットリストである. 分解の様子をダイアグラムで表したものが図 5.4 である. 古いピボットリスト $\mathcal{I}_\ell, \mathcal{J}_{\ell+1}$ を新たなピボットリスト $\mathcal{I}'_\ell, \mathcal{J}'_{\ell+1}$ で置き換える. このとき, 入れ子関係 $\mathcal{I}_{\ell-1} < \mathcal{I}'_\ell, \mathcal{J}'_{\ell+1} > \mathcal{J}_{\ell+2}$ が成り立つ. したがって ℓ までの左入れ子条件と ℓ からの右入れ子条件は満たされる. しかし, ひとつ隣の入れ子関係 $\mathcal{I}'_\ell < \mathcal{I}_{\ell+1}, \mathcal{J}_\ell > \mathcal{J}'_{\ell+1}$ が成り立つとは限らないため, TT 全体の完全入れ子条件は破れる可能性がある.

また, Π テンソルは $\mathcal{I}_{\ell-1} \times \mathbb{S}_\ell$ を行, $\mathbb{S}_{\ell+1} \times \mathcal{J}_{\ell+2}$ を列とする行列のため, LU 分解で探索できる範囲は F_σ 全体に比べ制限されている. そのためこのアルゴリズムは局所探索と呼ばれる. 局所探索アルゴリズムは, 局所的には準最適なピボットを与えるが, TT 全体を適切に推定するとは保証されていないことに注意が必要である.

以上の Π テンソルの生成と LU 分解による新たなピボットリストを決める操作を, 定められた許容誤差を満たすまで繰り返す.

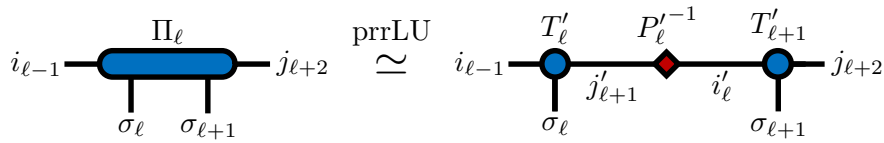


図 5.4. Π テンソルに対する LU 分解.

5.4 ピボットの挿入

局所探索アルゴリズムでは, LU 分解により局所的に最適なピボットが自動的に選択される. ここでは局所探索とは独立して, 任意のピボットを追加する方法を説明する.

次の小節でアルゴリズムの詳細を説明する. その後, どのような場合にピボット挿入が用いられるかを簡単な例で紹介する.

5.4.1 ピボット挿入アルゴリズム

TCIにより構成された $\mathcal{L}$ 階のTTがあるとする．つまり，ピボットリスト $\mathcal{I}_\ell, \mathcal{J}_\ell$, ($\ell = 1, \dots, \mathcal{L}$) を保持しているとする．このとき，任意のピボット $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_{\mathcal{L}})$ を加えることで，ピボットリストがどのような変更を受けるのかを考える．挿入するピボットはグローバルピボットと呼ばれる．すべての ℓ に対してグローバルピボットを分割する：

$$\sigma = (\underbrace{\sigma_1, \dots, \sigma_\ell}_{\equiv i_\ell}, \underbrace{\sigma_{\ell+1}, \dots, \sigma_{\mathcal{L}}}_{\equiv j_{\ell+1}}) = i_\ell \oplus j_{\ell+1}. \quad (5.4.1)$$

$i_\ell, j_{\ell+1}$ を対応するピボットリスト $\mathcal{I}_\ell, \mathcal{J}_{\ell+1}$ に追加する． $\mathcal{I}_{\ell+1}$ に追加されるピボット $i_{\ell+1}$ は， $i_{\ell+1} = i_\ell \oplus \sigma_{\ell+1}$ であるため， $\mathcal{I}_\ell < \mathcal{I}_{\ell+1}$ が満たされる． $\mathcal{J}$ についても同様である．したがって，グローバルピボットを挿入しても挿入前の入れ子条件が満たされる．

5.4.2 Ergodicity problem

前節で説明したピボットの探索アルゴリズムは，一部のローカルインデックスに着目し局所的に最適な分解を与えるアルゴリズムであった．グローバルなエラーを元に探索を行うわけではないため，ローカルミニマムに捉えられる可能性がある．この問題はergodicity problem と呼ばれる．

まずは簡単な例で，ergodicity problem を確認する．以下のような関数を考え，局所探索によりTTを構成する [60]．

$$f_m = \delta_{m,1} + \delta_{m,M} \quad (5.4.2)$$

$m = 1, 2, \dots, M$, $M = 2^{\mathcal{R}}$ である． $m = 1$ または $m = M$ の場合のみ1を返し，それ以外の m では0を返す関数である．

以下では $\mathcal{R} = 4$, $M = 2^4 = 16$ とする．TTのインデックスは $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4)$ であり，それぞれ2値変数($\sigma_i \in \{0, 1\}$)である．quantics表現を用いると， m との対応は

$$m = 1 + \sigma_1 \cdot 2^3 + \sigma_2 \cdot 2^2 + \sigma_3 \cdot 2^1 + \sigma_4 \cdot 2^0 \quad (5.4.3)$$

で与えられる．初期ピボットを $(0, 0, 0, 0)$ としてTCIを行う．図5.5はTCIの結果である．局所探索のみを行う場合， $m = 16$ (端点) が厳密な値とズレていることがわかる．グローバルピボットとして端点 $(1, 1, 1, 1)$ を加えた結果，全域で f_m を再現することができる．

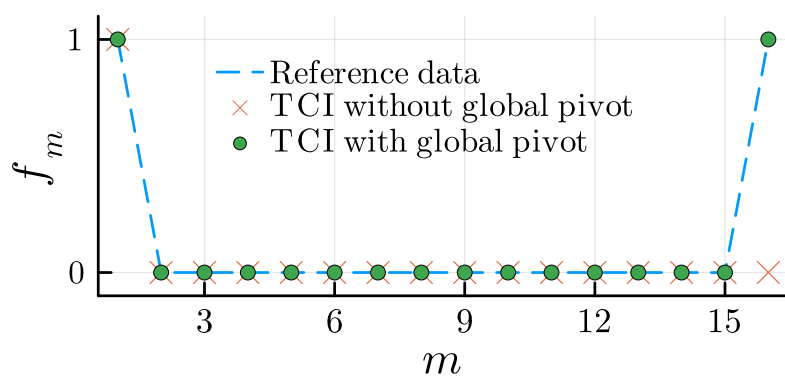


図 5.5. Ergodicity problem の確認.

第 6 章

テンソルネットワークの場の量子論への応用

本章では、quantics 表現と TCI を場の理論に応用した先行研究を紹介し、残された課題を明確化する。

6.1 不純物ソルバー

強相関電子系で DMFT を用いた解析を行う際の最も大きなボトルネックは量子不純物問題を解くことである。不純物ソルバーはいくつも考案されているが、現在最も汎用的に用いられる手法が連続時間量子モンテカルロ法 (Continuous-time quantum Monte Carlo method; CT-QMC) である [26]。CT-QMC では、Green 関数や分配関数を相互作用で摂動展開する。各項は Feynman ダイアグラムで表される多次元積分であり、積分値はモンテカルロサンプリングにより評価される。CT-QMC は不純物サイトの Coulomb 相互作用について展開する CT-INT や、不純物サイトとバスの混成について展開する CT-HYB など、いくつかの種類がある。

しかし、CT-QMC には以下のような制限がある。1 つめに、サンプリング点数 N に対して、 $\sim \mathcal{O}(1/\sqrt{N})$ でしか収束しないことが挙げられる。精度を 1 桁高くするために、サンプリング点数を 100 倍にしなければならない。収束性の問題以上に深刻な問題点として、負符号問題が挙げられる。負符号問題は確率分布の非負条件が破れることで、必要なサンプリング数が指数的に増大してしまう問題である。対称性の低い系では特に顕著に現れる。負符号問題は量子モンテカルロ法に起因して発生する問題のため、量子モンテカルロ法とは異なる指導原理に基づく手法を用いることで、少なくとも負符号問題は回避することができる。不純物ソルバーとして使われてきた量子モンテカルロ法以外の手法は、ほとんどが次元の呪いによる計算量増大の問題を持つ。

そこで、次元の呪いを回避しつつ負符号問題が現れない手法として、テンソルネットワークを用いた Feynman ダイアグラム (多次元積分) の評価が注目されている。ここでは TCI を用いた不純物ソルバーを提案した 2 つの論文を紹介する。

6.1.1 単軌道不純物問題の高次摂動展開

先行研究 [1] は、Schwinger-Keldysh 形式の高次摂動展開において、モンテカルロ法を TCI で置き換える手法を提案した。以下で提案された手法の概要を説明する。

相互作用を含む次のハミルトニアンを考える。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + U \mathcal{H}_{\text{int}} \quad (6.1.1)$$

$\mathcal{H}_0$ は非相互作用項、 $\mathcal{H}_{\text{int}}$ は相互作用項であり、 U は相互作用の大きさを表す。 U に依存する物理量 $Q(U)$ を、次のように相互作用 U について展開する。

$$Q(U) = \sum_n Q_n U^n, \quad Q_n = \int dv_1 \cdots dv_n \tilde{Q}_n(v_1, \dots, v_n) \quad (6.1.2)$$

Q_n は n 次積分であり、従来法による積分では摂動次数 n が増大するに伴い計算コストは指数的に増大する (次元の呪い)。それを避けるために通常は量子モンテカルロ法が使われているが、ここでは被積分関数を TT で表現し積分することを考える。各変数 $v_1, \dots, v_n$ それぞれを d 個のメッシュへ離散化し、次のような n 階の TT を構成する。

$$\tilde{Q}_n(v_1, \dots, v_n) \simeq M_1(v_1) \cdots M_n(v_n) \quad (6.1.3)$$

TT 形式では各変数が分離されていることがわかる。この分解のもと、評価する積分も以下のように 1 次元積分の積に分解される。

$$Q_n \simeq \left(\int dv_1 M_1(v_1) \right) \cdots \left(\int dv_n M_n(v_n) \right) \quad (6.1.4)$$

TT のボンド次元を χ とすると、TT を構成するために必要な TCI のサンプリング数は $\mathcal{O}(n\chi^2)$ である。さらにこの TT を用いた n 次元積分の評価は $\mathcal{O}(nd\chi^2)$ で行うことができるため、従来法 ($\sim \mathcal{O}(d^n)$) と比較して高速である。

図 6.1 は単一サイト Anderson 不純物モデルで物理量 Q を電荷として計算したベンチマーク結果である。図 6.1(a) では $n = 10$ の被積分関数を TCI で推定した結果と厳密な値を比較している。TCI により $\tilde{Q}_n$ の構造を正確に捉えていることがわかる。さら

に、図 6.1(b) より、TCI のサンプリング点数 N に対して、相対誤差が冪的に減衰する様子を表している。 $\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$ で減衰するモンテカルロ積分に対し、TCI による積分は $\mathcal{O}(1/N^2)$ で減衰するためより高速である。

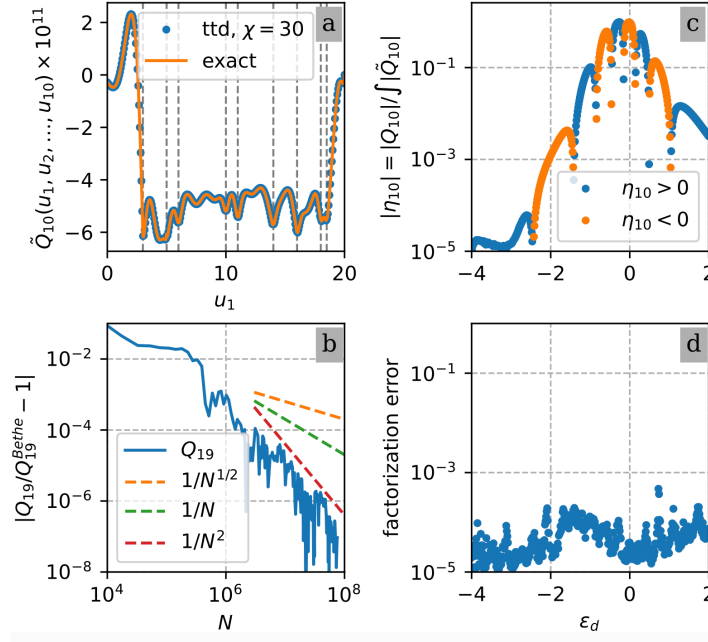


図 6.1. [1] から転載. (a) $n = 10, \chi = 30$ で推定された被積分関数と厳密な値との比較. (b) TCI のサンプリング点数に対するエラーの振る舞い. (c) モデルパラメータ ϵ_d に対する摂動項の平均的な符号. (d) $\chi = 50$ の場合の TT の相対誤差.

6.1.2 金属-絶縁体転移の記述

先行研究 [2] では、TCI を平衡状態の単一不純物 Anderson モデルに適用する．混成項展開に基づく摂動計算に必要な高次元積分を TCI で行い、松原グリーン関数や自由エネルギーを得る．

TCI は、既存手法である CT-QMC と比較して数桁高精度に松原グリーン関数を計算できることが示された．さらに、TCI を用いる場合、モンテカルロでは直接得ることが困難な熱力学量を簡単に計算できることから、TCI で得た自由エネルギーを用いて、金属相と Mott 絶縁相の間の転移を記述できることを示した．以下でその詳細を説明する．

単軌道不純物 Anderson モデルとして、以下のハミルトニアンを考える．

$$\mathcal{H} = \underbrace{\varepsilon_0 \sum_{\sigma} n_{\sigma} + U n_{\uparrow\downarrow}}_{\mathcal{H}_1} + \underbrace{\sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}}_{\mathcal{H}_B} + \underbrace{\sum_{\mathbf{k}\sigma} (V_{\mathbf{k}\sigma} d_{\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \text{h.c.})}_{\mathcal{H}_{IB}} \quad (6.1.5)$$

ε_0, U は不純物サイトの 1 粒子エネルギーとオンサイト Coulomb 相互作用である。 $\mathbf{k}$ はバスの状態を指定する連続的なラベルであり、 $\varepsilon_{\mathbf{k}}, V_{\mathbf{k}\sigma}$ はそれぞれバスのエネルギー分散と不純物との混成強度を表す。 $d_{\sigma}^{\dagger}/d_{\sigma}, c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}/c_{\mathbf{k}}$ はそれぞれ不純物とバスの生成/消滅演算子である。 また、 $n_{\sigma} = d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}$ である。

分配関数 Z と Green 関数 $G_{\sigma}(\tau)$ はそれぞれ

$$Z = \text{Tr} \{ e^{-\beta \mathcal{H}} \}, \quad G_{\sigma}(\tau) = - \langle \mathcal{T}_{\tau} d_{\sigma}(\tau) d_{\sigma}^{\dagger}(0) \rangle. \quad (6.1.6)$$

$\langle \cdots \rangle$ は $\mathcal{H}$ で取った期待値である。 これらを $\mathcal{H}_{IB}$ で展開すると、 以下のように k 次の寄与は k 次積分により与えられる。

$$Z = \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_{\tau_1}^{\beta} d\tau_2 \cdots \int_{\tau_{k-1}}^{\beta} d\tau_k \langle \mathcal{H}_{IB}(\tau_k) \cdots \mathcal{H}_{IB}(\tau_1) \rangle_{\mathcal{H}_0}. \quad (6.1.7)$$

ここで、 $\langle \cdots \rangle_{\mathcal{H}_0}$ は、ハミルトニアン $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_B$ で取った期待値である。 積分範囲はシンプレックス領域 $S_0^{\beta} = \{(\tau_1, \tau_2, \cdots, \tau_k) \in \mathbb{R}^k \mid 0 \leq \tau_1 \leq \tau_2 \leq \cdots \leq \tau_k \leq \beta\}$ であるが、TCI は超立方体領域 $[0, \beta]^k = \{(v_1, v_2, \cdots, v_k) \in \mathbb{R}^k \mid \forall i \in \{1, 2, \cdots, k\}, 0 \leq v_i \leq \beta\}$ で定義された関数を推定するため、積分変数をシンプレックス領域から超立方体領域へマップするための変数変換を行なっている。

$U = 0$ と $U \neq 0$ の 2 つの場合を考える。 図 6.2 は $U = 0$ の結果である。 不純物と結合するバスの状態密度は無限次元 Bethe 格子のものが採用されている。 この系は厳密に解くことができる。 図 6.2(a) は TCI により計算された Green 関数と厳密解の比較である。 次数を上げるにつれ厳密解に近づき、 $k \simeq 10$ 程度以上で厳密解とほとんど一致することが見て取れる。 図 6.2(b) は $\tau = \beta/2$ における Green 関数の精度と展開次数やボンド次元の関係を調べた結果である。 右側の図は、いくつかのボンド次元に対して展開次数と精度を比較している。 ボンド次元が 60, 120 の場合、精度は 10^{-5} を超え、ボンド次元 240 の場合では 10^{-7} にまで達する。 これは、CT-QMC の精度限界 ($\sim 10^{-5}$) よりも数桁高く、TCI が解析接続の際の誤差軽減などの応用計算にも有用であることを示している。

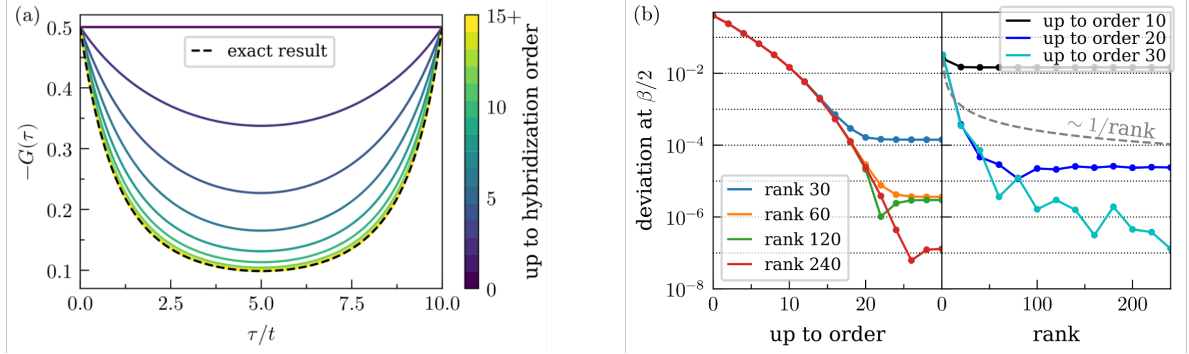


図 6.2. [2] から転載.

次に $U \neq 0$ の場合を考える．この系は厳密に解くことができないため，CT-QMC の結果との比較を行なっている．図 6.3 は CT-QMC と TCI を用いて，いくつかの相互作用の大きさ U に対して $\beta = 20/t$ における Green 関数を計算した結果である．CT-QMC と TCI は同じダイアグラムを元に計算している．CT-QMC による結果と TCI による結果は誤差の範囲で一致していることがわかる．しかし，確率的なノイズを持つモンテカルロに対し，TCI の場合は確率的ノイズがないという利点がある．そのことから，CT-QMC と比較し，より高精度に計算することができる．

しかし，次数が高くなると探索空間が広がり，被積分関数が有限の寄与を与える領域が小さくなるため有効なピボットを探すのが困難になる．実際， $k \geq 30$ では推定結果が不安定になることが指摘されている．

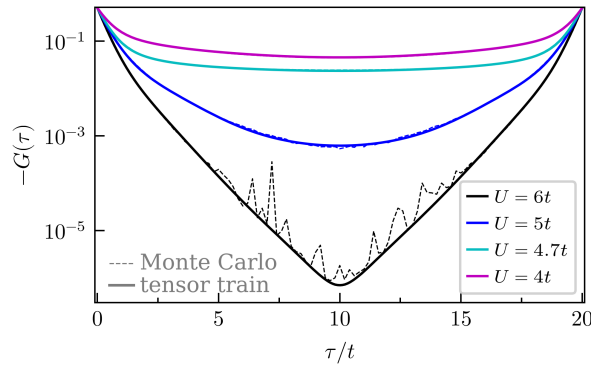


図 6.3. [2] から転載.

最後に，TCI では熱力学量を直接得ることができる点を確認する．自由エネルギーは分配関数から計算できる．しかし，CT-QMC の場合は分配関数を直接計算することが困難なため，自由エネルギーは間接的な方法で求める必要がある．しかし，TCI を用いる場合は (6.1.7) から直接計算できるため， $F = -k_B T \log Z$ から自由エネルギーを得られる．

図 6.4 は，複数の温度で TCI から求めた自由エネルギーの U 依存性を調べたものであ

る。中央と左のプロットは金属相から相互作用を増加させたもの、絶縁相から相互作用を減少させたものの2種類を計算している。図の通り、臨界温度 $\beta \sim 15/t$ より低温ではヒステリシスが存在する。したがって両相の間で転移が存在することがわかる。

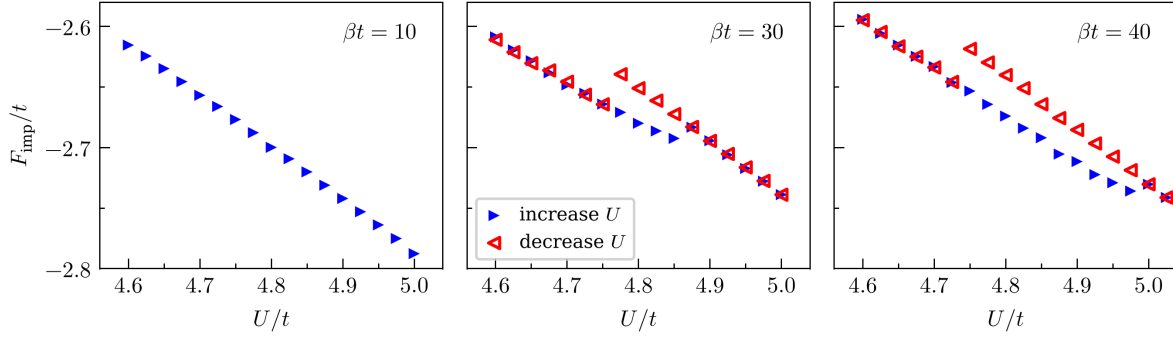


図 6.4. [2] から転載。

ここでは、平衡量子不純物問題を解くために、従来使われている CT-QMC に代わる手法として、TCI による多次元積分が提案された。TCI の利点として、CT-QMC より高精度で確率的ノイズを持たず、なおかつ CT-QMC では直接計算することが難しい熱力学量を簡単に得られることが示された。しかし、TCI の課題として、次元が高くなると探索空間を効率的にサンプルできなくなる点が指摘された。この問題を解決するためには、TCI アルゴリズムの改良が必要である。

6.2 Quantics 表現 + TCI

前節では、摂動展開の各項の多次元積分を量子モンテカルロ法から TCI へ置き換える研究を紹介した。本節では、quantics 表現と TCI を組み合わせて関数の波数依存性を圧縮する手法について、先行研究を紹介する。

先行研究 [4] は、波数依存するグリーン関数の QTT を構成するために TCI を利用する手法を提案している。この手法のベンチマークとして Haldane モデルを考える。グリーン関数の波数依存性を quantics 表現により離散化し、圧縮された QTT を構成する。

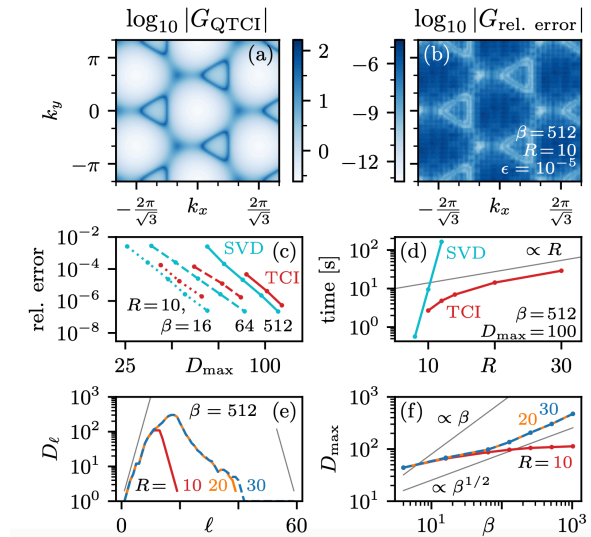


図 6.5. [4] から転載。

以下が Haldane モデルの Bloch ハミルトニアンである.

$$H(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^3 [\sigma_1 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i) + \sigma_2 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i)] + \sigma_3 \left[m - 2t_2 \sum_{i=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_i) \right] \quad (6.2.1)$$

σ_μ は Pauli 行列である. $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, $\mathbf{a}_i$ は最近接格子点へのボンド, $\mathbf{b}_i$ は次近接格子点へのボンドをそれぞれ表す. m は 2 つの相の間の転移を与えるパラメータである. が $|m| < m_c = t_2 3\sqrt{3}$ の場合は Chern 数が -1 の Chern 絶縁体, $|m| > m_c$ の場合は Chern 数が 0 の自明な相である. グリーン関数の波数依存性は以下で与えられる.

$$G(\mathbf{k}, i\omega_0) = \text{Tr} \left[\frac{1}{i\omega_0 - H(\mathbf{k}) - \mu} \right], \quad \omega_0 = \frac{\pi}{\beta}. \quad (6.2.2)$$

図 6.5(a), (b) はそれぞれ quantics TCI により構成した Green 関数の値と厳密値との相対誤差であり, 正確に推定できていることを示している. 図 6.5(c), (d) は QTT の構成について SVD と TCI を比較したものである. (c) では与えられたボンド次元に対して構成された TT の精度を比較しており, TCI は SVD より数%大きなボンド次元で SVD の精度に匹敵することがわかる. また (d) は, TT の長さ R (関数の解像度に対応) に対して計算時間を調べた図であり, 計算時間が指数的に増大する SVD に対し, TCI の計算時間は線形程度と非常に高速である.

以上から, quantics 表現と TCI を組み合わせることで, 指数的に高い解像度を線形にスケールする計算時間で実現できることが示された. しかし, ここで明かされた有効性は少数変数 (2 次元波数) の系のみであり, 高次元の変数や複数種類の自由度を持つ系について同様の有効性が存在するかどうかは自明ではない. 今後調査されるべき課題である.

6.3 先行研究で残る課題

これまでの先行研究により, 多次元積分に対して TCI や quantics 表現が有効であることが示された. しかし, [1, 2] は単軌道の不純物問題で時間 (虚時間) の依存性のみ, [4] は 2 次元波数の依存性のみでの圧縮であり, より高次元や多くの自由度を持つモデルが同様の低ランク構造を有するかどうかは非自明である. 実際の物質は多くの自由度を持つ複雑な系であり, 現実物質の計算を目標とする上で, 多自由度系の低ランク構造を理解することは重要な課題である. さらに, [2] で指摘されたように, 探索空間が広がると TCI によるピボット探索が難しくなる問題もある. 次元や自由度の数が増えるにつれ探索空間は指数的に大きくなるため, TCI アルゴリズムの改良は急務である.

第 7 章

多軌道電子格子モデルの低ランク構造

本章は、埼玉大学の岡田夏希氏，星野晋太郎氏，指導教員の品岡寛氏と共に行った研究，およびそれをまとめた論文 [61] に基づく．

7.1 本研究のモチベーション

前章で紹介したとおり，不純物問題を解くための手法として QTT や TCI を利用する方法が提案されている．しかし，適用範囲は未だ単軌道不純物モデルなど低自由度のモデルに留まっている．さらに，高次元で TCI 重要なピボットを逃してしまう Ergodicity problem も指摘されている．このような状況を受け，本研究は多自由度の系において効率計算の前提となる低ランク構造を調べることを目的としている．Ergodicity problem を回避するための TCI アルゴリズムの改良も行う．

7.2 問題設定

本研究では，フラーレン分子固体の超伝導を記述する多軌道電子フォノンモデルを用いて，quantics TCI のベンチマークを行った．本節では，フラーレン化合物の超伝導について概要を述べた後，モデルの詳細を説明する．

7.2.1 フラーレン化合物の超伝導

アルカリ金属をドーピングしたフラーレン分子 A_3C_{60} ($A = K, Rb, Cs$) の固体は，分子性物質の中でも高い超伝導転移温度を示す物質群として知られている．1991 年に K_3C_{60}

が 18 K で超伝導転移することが発見されてから、複数のフラレン化合物の超伝導が発見された。転移温度が高いものでは、40 K 付近で超伝導転移する Cs_3C_{60} が知られている [62, 63].

7.2.2 Jahn-Teller-Hubbard モデル

ハミルトニアン

上記の電子格子相互作用を含むハミルトニアンは以下である。オンサイト Coulomb 相互作用は Slater-金森相互作用である。

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{ij} \sum_{\gamma\gamma'\sigma} \left(t_{ij}^{\gamma\gamma'} - \mu \delta_{ij} \delta_{\gamma\gamma'} \right) c_{i\gamma\sigma}^\dagger c_{j\gamma'\sigma} + \sum_{i\eta} \omega_\eta a_{i\eta}^\dagger a_{i\eta} \\ & + \sum_{i\eta} I_\eta : T_{i\eta} T_{i\eta} : + \sum_{i\eta} g_\eta \phi_{i\eta} T_{i\eta} + \alpha \mathcal{H}_{\text{ex}}. \end{aligned} \quad (7.2.1)$$

i, j はサイトのインデックス, $\gamma = x, y, z$ は電子の t_{1u} 軌道 (p 軌道的) を表す. $c_{i\gamma\sigma}^\dagger$ はサイト i の軌道 γ にスピン σ の電子を生成する演算子である. $t_{ij}^{\gamma\gamma'}$ はサイト i の軌道 γ からサイト j の軌道 γ' への飛び移り積分, μ は化学ポテンシャルである. $\dots$ は正規順序積である. $\eta = 0, 1, 3, 4, 6, 8$ はフォノンの振動モードを表し, ω_η はフォノンの振動数である. $a_{i\eta}^\dagger$ はサイト i の振動モードが η であるフォノンの生成演算子である. また, $T_{i\eta}$, $\phi_{i\eta}$, I_η は以下のように定義される.

$$\begin{aligned} T_{i\eta} &= \sum_{\gamma\gamma'\sigma} c_{i\gamma\sigma}^\dagger \lambda_{\gamma\gamma'}^\eta c_{i\gamma'\sigma}, \\ \phi_{i\eta} &= a_{i\eta} + a_{i\eta}^\dagger, \end{aligned} \quad (7.2.2)$$

$$I_\eta = \begin{cases} 3U/4 - J & (\eta = 0) \\ J/2 & (\text{other } \eta) \end{cases}. \quad (7.2.3)$$

ここで, λ^η は Gell-Mann 行列である:

$$\begin{aligned} \lambda^0 &= \sqrt{\frac{2}{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \lambda^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \lambda^4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^8 = \sqrt{\frac{1}{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7.2.4)$$

$\alpha \mathcal{H}_{\text{ex}}$ は系に印加された外場の項である. α は外場の大きさを表す. $\mathcal{H}_{\text{ex}}$ はここでは軌道磁場を考えている. $\mathcal{H}_{\text{ex}}$ の具体的な表式は以下の外場の印加を説明する欄で紹介する.

7.2.3 Green 関数

■南部表示の表記

超伝導を議論するために南部表示で計算を行う．チェック (˘) は南部空間で定義された行列を表す．軌道が 3 つ ($\gamma = x, y, z$), スピンが 2 つ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) で, さらに南部空間のため, 行列サイズは 12×12 である．

これ以降, サイズ 6×6 の行列 M に対して, それを南部空間へ拡張した行列 $\check{M}$ は次のように表すことにする:

$$\check{M} = \mathcal{N}(M) = \begin{pmatrix} M & 0 \\ 0 & -M^\top \end{pmatrix}. \quad (7.2.5)$$

南部空間での Gell-Mann 行列は

$$\check{\lambda}^\eta = \mathcal{N}(\lambda^\eta \otimes \mathbf{1}_{2 \times 2}) \quad (7.2.6)$$

である． $\mathbf{1}_{2 \times 2}$ はスピン空間での単位行列である．

■Green 関数

このモデルを DMFT の枠組みで解く．局所的な Green 関数は南部空間で次のように定義されている．

$$\begin{aligned} \check{G}_{\gamma\sigma, \gamma'\sigma'}(\tau) &= -\langle \mathcal{T} \Psi(\tau) \Psi^\dagger(0) \rangle = \begin{pmatrix} G_{\gamma\sigma, \gamma'\sigma'}(\tau) & F_{\gamma\sigma, \gamma'\sigma'}(\tau) \\ \bar{F}_{\gamma\sigma, \gamma'\sigma'}(\tau) & \bar{G}_{\gamma\sigma, \gamma'\sigma'}(\tau) \end{pmatrix}, \\ D_{\eta\eta'}(\tau) &= -\langle \mathcal{T} \phi_\eta(\tau) \phi_{\eta'}(0) \rangle. \end{aligned}$$

ここで,

$$\begin{aligned} \Psi(\tau) &= (c_{x\uparrow}(\tau), c_{x\downarrow}(\tau), \dots, c_{z\downarrow}(\tau), c_{x\uparrow}^\dagger(\tau), \dots, c_{z\downarrow}^\dagger(\tau))^\top \\ &\equiv (c_{\gamma\sigma}(\tau), c_{\gamma'\sigma'}^\dagger(\tau))^\top \end{aligned} \quad (7.2.7)$$

である．したがって, 行列 $\check{G}$ のサイズは 12×12 , 行列 G, F (チェックなし) のサイズは 6×6 である．フォノンは 6 種類のモードを考えているため D は 6×6 行列である．

■Fourier 変換

虚時間と松原周波数の間の Fourier 変換は以下である:

$$G_{\gamma\sigma\gamma'\sigma'}(\tau) = T \sum_n G_{\gamma\sigma\gamma'\sigma'}(i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau}, \quad (7.2.8)$$

$$G_{\gamma\sigma\gamma'\sigma'}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau G_{\gamma\sigma\gamma'\sigma'}(i\omega_n) e^{i\omega_n \tau}. \quad (7.2.9)$$

IR 基底 [64] を用いて行う．

■自己エネルギー

以下に, 自己エネルギーのスケルトンダイアグラム [65] の寄与を2次まで示す:

$$\check{\Sigma}_{\gamma\sigma\gamma'\sigma'}^{(1)}(\tau) = - \sum_{\eta_1\eta_2} g^2 D_{\eta_1\eta_2}(\tau) [\check{\lambda}^{\eta_1} \check{G}(\tau) \check{\lambda}^{\eta_2}]_{\gamma\sigma\gamma'\sigma'}, \quad (7.2.10)$$

$$\begin{aligned} \check{\Sigma}_{\gamma\sigma\gamma'\sigma'}^{(2)}(\tau) = & \int_{[0,\beta]^2} d\tau_2 d\tau_3 \sum_{\eta_1\eta_2\eta_3\eta_4} g^4 D_{\eta_1\eta_3}(-\tau_3) D_{\eta_2\eta_4}(\tau_2 - \tau) \\ & \times [\check{\lambda}^{\eta_4} \check{G}(\tau - \tau_3) \check{\lambda}^{\eta_3} \check{G}(\tau_3 - \tau_2) \check{\lambda}^{\eta_2} \check{G}(\tau_2) \check{\lambda}^{\eta_1}]_{\gamma\sigma\gamma'\sigma'}, \end{aligned} \quad (7.2.11)$$

$$\Pi_{\eta\eta'}^{(1)}(\tau) = \frac{1}{2} g_\eta g_{\eta'} \sum_{\gamma\sigma} \left[\check{G}(-\tau) \check{\lambda}^{\eta'} \check{G}(\tau) \check{\lambda}^\eta \right]_{\gamma\sigma\gamma\sigma}, \quad (7.2.12)$$

$$\begin{aligned} \Pi_{\eta\eta'}^{(2)}(\tau) = & -\frac{1}{2} \int_{[0,\beta]^2} d\tau_2 d\tau_4 \sum_{\eta_2\eta_4} g^4 D_{\eta_2\eta_4}(\tau_2 - \tau_4) \\ & \times \text{Tr} \left[\check{G}(-\tau_4) \check{\lambda}^{\eta_4} \check{G}(\tau_4 - \tau) \check{\lambda}^\eta \check{G}(\tau - \tau_2) \check{\lambda}^{\eta_2} \check{G}(\tau_2) \check{\lambda}^{\eta'} \right]. \end{aligned} \quad (7.2.13)$$

電子の自己エネルギー $\check{\Sigma}$ については次のように対角ブロックと非対角ブロックを定義する.

$$\check{\Sigma}(\tau) = \begin{pmatrix} \Sigma(\tau) & \Delta(\tau) \\ \bar{\Delta}(\tau) & \bar{\Sigma}(\tau) \end{pmatrix}, \quad \begin{cases} \bar{\Sigma}(\tau) = -\Sigma^\top(-\tau) \\ \bar{\Delta}(\tau) = \Delta^\dagger(\tau) \end{cases}. \quad (7.2.14)$$

超伝導の秩序変数は非対角ブロックを Fourier 変換したの $\Delta(i\omega_n)$ である.

■Dyson 方程式

上記の Green 関数と自己エネルギーは次の Dyson 方程式を満たす.

$$\check{G}(i\omega_n) = \int d\varepsilon \frac{\rho(\omega)}{i\omega_n \mathbf{1}_{12 \times 12} + (\mu - \varepsilon) \mathbf{1}_{6 \times 6} - \check{\Sigma}(i\omega_n)} \quad (7.2.15)$$

$$D(i\nu_m) = \frac{D^{(0)}(i\nu_m)}{\mathbf{1}_{6 \times 6} - D^{(0)}(i\nu_m) \Pi(i\nu_m)} \quad (7.2.16)$$

非相互作用の Green 関数に対応するスペクトル関数 $\rho(\omega)$ として半楕円状態密度を用いた:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{\pi D^2} \sqrt{D^2 - \varepsilon^2}, \quad (-D \leq \varepsilon \leq D). \quad (7.2.17)$$

■外場の印加

本研究では, 外場により軌道の対称性が低下した場合も考慮したいため, 限定的ではあるが, 次のような軌道磁場による外場 $\alpha \mathcal{H}_{\text{ex}}$ を印加した. α は外場の大きさを表し, $\mathcal{H}_{\text{ex}}$

は以下で与えられる:

$$\mathcal{H}_{\text{ex}} = \mathcal{N}(l_z \otimes \mathbf{1}_{2 \times 2}), \quad l_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.2.18)$$

7.2.4 2 次自己エネルギーの QTT 表現と内部自由度の和

自己エネルギーの TT 表現

2 次の自己エネルギーの被積分関数を QTT で表現することを考える．自己エネルギーは，離散自由度 (スピン・軌道，フォノン振動モード) と 3 つの連続的な虚時間依存性を持つ．離散自由度についてはそのままテンソルのインデックスとし，虚時間について quantics 表現で離散化する．quantics 表現された虚時間の自由度は，長さスケールごとにまとめて配置し，同じ長さスケールのインデックスは結合する．また，TT 全体のインデックスの配置は下図のように (スピン・軌道，フォノン振動モード，虚時間)[電子の場合]，(フォノン振動モード，虚時間)[フォノンの場合] とする．インデックスを配置する順序による QTT の効率後はで詳しく議論する (7.5 節)．

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad \Sigma_{\gamma\gamma'}^{(2)}(\tau) &= \sum_{\substack{\eta_1 \sim \eta_4 \\ \tau', \tau''}} \eta_1 \xrightarrow{\tau'} \eta_2 \xrightarrow{\tau''} \eta_3 \xrightarrow{\tau} \eta_4 = \sum_{\substack{\eta_1 \sim \eta_4 \\ \tau', \tau''}} \text{[Diagram: Two orange circles connected by a red bar, followed by blue bars]} \\ \text{(b)} \quad \Pi_{\eta\eta'}^{(2)}(\tau) &= \sum_{\substack{\eta_1, \eta_2 \\ \tau', \tau''}} \eta_1 \xrightarrow{\tau'} \eta_2 \xrightarrow{\tau''} \eta_1 = \sum_{\substack{\eta_1, \eta_2 \\ \tau', \tau''}} \text{[Diagram: A red bar, followed by blue bars]} \end{aligned}$$

図 7.1. (a) 電子自己エネルギーの Feynman ダイアグラムと TT 表現. (b) フォノン自己エネルギーの Feynman ダイアグラムと TT 表現.

TT 形式での内部自由度の和

内部自由度の和をとるためには，3.3.3 節で説明したとおり，TT の各インデックスとベクトルと縮約をとればよい．フォノン振動数を表すインデックス η には 6 成分のベクトルをかける．虚時間は，3 つあるうち 2 つについて和 (積分) をとる．3 つのインデックスを結合されているため，一度この結合を解除し，和をとるインデックスには 2 成分のベクトルをかける．

7.2.5 自己無撞着計算

■自己無撞着計算

以上を用いて，自己無撞着的に Green 関数と自己エネルギーを計算する．以下で自己無撞着計算の流れを説明する．

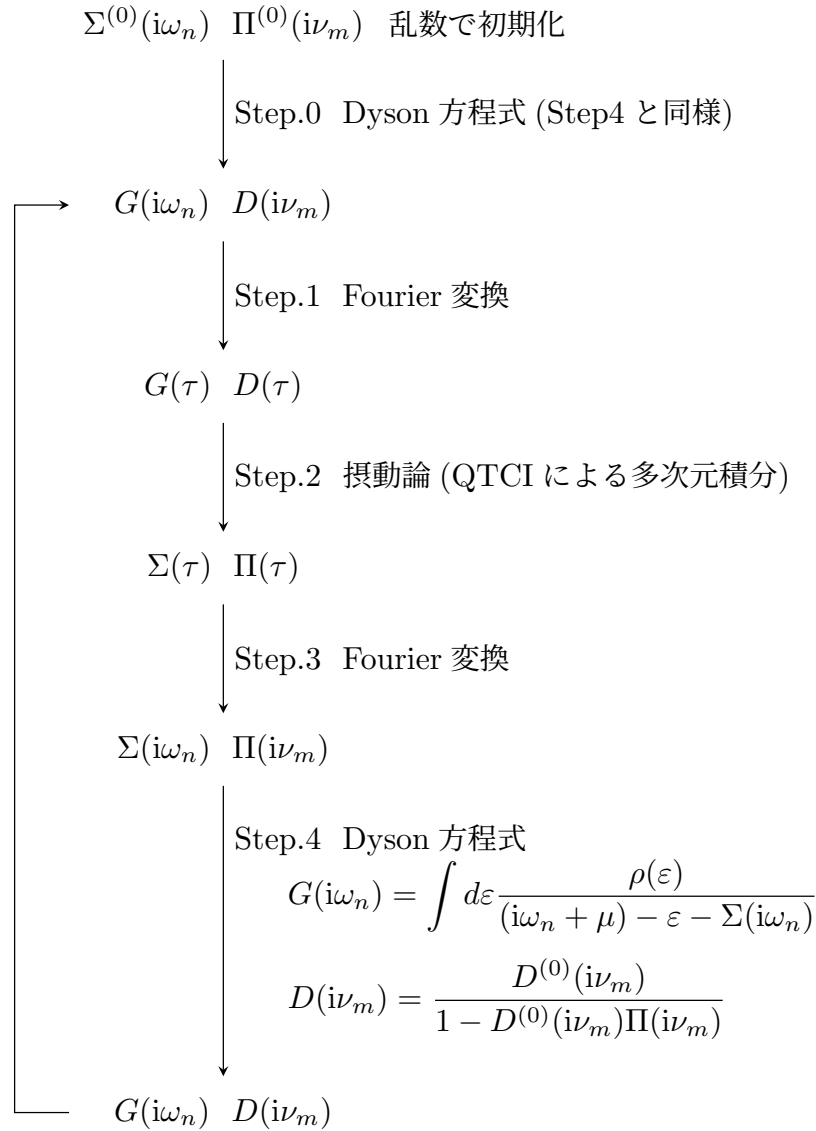


図 7.2. 自己無撞着計算の流れ

Step.0 自己エネルギーの初期値を乱数により生成する．完全な乱数を振ってもよいが，ここでは自己エネルギーの対称性を仮定したうえで，対称性を満たすように乱数を生成している．初期値自己エネルギーをもとに松原周波数の Green 関数を計算する．

Step.1 松原形式の Green 関数から虚時間の Green 関数へ Fourier 変換する．

- Step.2 (7.2.10~7.2.13) を用いて虚時間の Green 関数から虚時間の自己エネルギーを計算する．2 次以上の自己エネルギーは多次元積分を含み, 数値計算上のボトルネックとなる．この部分を QTCI を用いて計算する．
- Step.3 得られた虚時間の自己エネルギーを松原周波数の自己エネルギーへ Fourier 変換する．
- Step.4 Step.0 と同様に Green 関数を計算し, 以下このループを自己エネルギーが収束するまで繰り返す．

7.3 安定的な TCI アルゴリズム

先行研究 [1, 2] では, 指摘されていた高次元積分の不安定性が指摘された．この問題を取り除くために, 大域的にピボットを探索するアルゴリズムを利用し, 安定性を向上させた．ここでは改良されたアルゴリズムの詳細を説明する．改良アルゴリズムでは, 図 7.3 のように局所探索と大域探索を交互に行う．本研究のモデルにおいて改良アルゴリズムが必要になる根拠は, 7.6 節で示す．

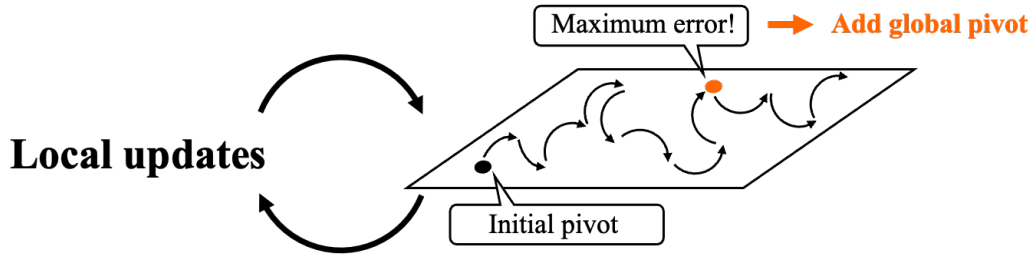


図 7.3. 局所探索 + 大域探索 TCI アルゴリズム

以下では $\mathcal{L}$ 階テンソル (または関数) $f(\sigma)$, $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_{\mathcal{L}})$, $\sigma_\ell = 1, \dots, d_\ell$ として, $\text{TT}\tilde{F}_\sigma$ の推定を行うものとする．

7.3.1 大域ピボット探索

$\text{TT}\tilde{F}_\sigma$ が与えられたとする．ただし, $\tilde{F}_\sigma$ が $f(\sigma)$ を正しく推定できているとは限らず, 重要な寄与を与えるピボットを見逃している可能性があるとする．探索空間の中からランダムに 1 点 $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_{\mathcal{L}})$ を決め, 初期グローバルピボットとする．この点における誤差の最大値ノルムは $\varepsilon_{\text{init}} = \|\tilde{F}_{\mathbf{p}} - f(\mathbf{p})\|_\infty$ である． ℓ 番目のインデックス p_ℓ に着目し, p_ℓ 以外のインデックスを固定する． p_ℓ のを 1 から d_ℓ まで動かし, 各値ごとの誤差を

調べる:

$$\begin{cases} \varepsilon_1 &= \left\| \tilde{F}_{p_1 \cdots p_{\ell-1} 1 p_{\ell+1} \cdots p_{\mathcal{L}}} - f(p_1, \cdots, p_{\ell-1}, 1, p_{\ell+1}, \cdots, p_{\mathcal{L}}) \right\|_{\infty} \\ \varepsilon_2 &= \left\| \tilde{F}_{p_1 \cdots p_{\ell-1} 2 p_{\ell+1} \cdots p_{\mathcal{L}}} - f(p_1, \cdots, p_{\ell-1}, 2, p_{\ell+1}, \cdots, p_{\mathcal{L}}) \right\|_{\infty} \\ &\vdots \\ \varepsilon_{d_{\ell}} &= \left\| \tilde{F}_{p_1 \cdots p_{\ell-1} d_{\ell} p_{\ell+1} \cdots p_{\mathcal{L}}} - f(p_1, \cdots, p_{\ell-1}, d_{\ell}, p_{\ell+1}, \cdots, p_{\mathcal{L}}) \right\|_{\infty}. \end{cases}$$

$\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_{\mathcal{L}}$ の中で最も大きな誤差を与える p_{ℓ} の値を $\bar{p}_{\ell}$ として、グローバルピボット $\mathbf{p}$ の ℓ 番目の値として採用する. このような置き換えを $\ell = 1$ から $\ell = \mathcal{L}$ まで行う. この操作で得られるグローバルピボットは $\bar{\mathbf{p}} = (\bar{p}_1, \dots, \bar{p}_{\mathcal{L}})$ である. $\ell = 1$ から $\ell = \mathcal{L}$ までの置き換えを1回の操作として、誤差の最大値が更新されなくなるまで上記操作を繰り返す. この方法は貪欲法であり、可能なグローバルピボットを全探索しているわけではない. そのため $\bar{\mathbf{p}}$ が誤差最大の点である保証はない. しかし、探索範囲の中でも誤差が大きな点であると期待される. 以上を擬似コードで表したものが Algorithm 1 である.

また、Algorithm 2 は、複数の初期グローバルピボットからグローバルピボットを探し、あらかじめ決めておいた許容誤差を超えるグローバルピボットが見つかった場合、 $\tilde{F}_{\sigma}$ のピボットリストに追加する流れを表した擬似コードである.

Algorithm 1: 大域ピボット探索アルゴリズム

ランダムに選んだピボットから始め、すべてのローカルインデックスに対してスイープを行い、貪欲法を用いて与えられた TT に対する誤差が大きなグローバルピボットを探索する.

Input: TT $\tilde{F}_\sigma$, 関数 (またはテンソル) $f(\sigma)$, 最大反復数 N_{iter} , 許容誤差 ϵ .

Output: グローバルピボット p , 誤差 e .

```

1 初期グローバルピボット  $p = (p_1, p_2, \dots, p_{\mathcal{L}})$  をランダムに生成 .
2 初期グローバルピボットでの誤差は  $e \leftarrow |f(p) - \tilde{F}_p|$  .
3 for  $i$  from 1 to  $N_{\text{iter}}$  do
4    $e' \leftarrow e$ 
5   for  $j$  from 1 to  $\mathcal{L}$  do
6      $\bar{p}_j = \operatorname{argmax}_{p_j} |f(p) - \tilde{F}_p|$ 
7      $p \leftarrow (p_1, \dots, p_{j-1}, \bar{p}_j, p_{j+1}, \dots, p_{\mathcal{L}})$ 
8      $e = |f(p) - \tilde{F}_p|$ 
9   end
10  if  $e = e'$  then
11    break
12  end
13 end
14 return  $p, e$ 

```

Algorithm 2: 複数のグローバルピボットの挿入

Input: ピボット探索回数 N_{search} , 挿入ピボット数 N_{pivot} , 許容誤差 ϵ

Output: グローバルピボットのリスト P

```

1 空のグローバルピボットリスト  $P$  を作る .
2 for  $i$  from 1 to  $N_{\text{search}}$  do
3   Algorithm 1 を用いて, 誤差  $e$  のグローバルピボット  $p$  を探索する.
4   if  $e > \epsilon$  then
5      $P \leftarrow P \cup \{p\}$ 
6   end
7 end
8 return  $P$ 

```

7.3.2 局所探索 + 大域探索

局所探索に加え，大域探索で見つけたグローバルピボットを追加することで，より安定した TCI の推定が可能である．はじめに通常通り局所探索を行い，暫定の TT $\tilde{F}$ とピボットリストを得る．その $\tilde{F}$ に対して大域探索を行い，あらかじめ定めた許容誤差を超えるグローバルピボットを探す．見つかった場合はピボットリストに追加する．以降，許容誤差を超えるグローバルピボットがなく，TT の最大値ノルムも許容誤差を満たすまで局所探索とグローバルピボットの追加を繰り返す．

Algorithm 3: TCI algorithm with 2-site updates + global updates

The algorithm iterates over the 2-site local and global updates until the estimated TT's error meets the specified tolerance ϵ .

Input: Function $F(\sigma)$, initial pivots $\{\mathcal{I}_\ell\}$ and $\{\mathcal{J}_\ell\}$, the number of maximum iteration $N_{\max}$, tolerance ϵ

Output: Tensor train $\tilde{F}$, pivots $\{\mathcal{I}_\ell\}$ and $\{\mathcal{J}_\ell\}$

```

1 for i from 1 to  $N_{\max}$  do
2   perform a sweep with 2-site updates
3   compute tensor train  $\tilde{F}$  from  $\{\mathcal{I}_\ell\}$  and  $\{\mathcal{J}_\ell\}$ 
4   search global pivots  $\mathbf{P}$  by Algorithm 2.
5   insert the global pivots to the pivot lists  $\{\mathcal{I}_\ell\}$  and  $\{\mathcal{J}_\ell\}$ 
6   if  $|\mathbf{P}| = 0 \wedge \|F - \tilde{F}\|_{\max} / \|F\|_{\max} < \epsilon$  then
7     break
8   end
9 end
10 return  $\tilde{F}$ ,  $\{\mathcal{I}_\ell\}$ ,  $\{\mathcal{J}_\ell\}$ 

```

7.4 計算結果：1 次自己無撞着計算

まずは 1 次の範囲で自己無撞着計算を行う．Dyson 方程式 (7.2.15), (7.2.16) において，自己エネルギーは (7.2.10), (7.2.12) のみを考慮する．1 次の範囲では積分の必要がないため，計算は容易である．ここでは結果のみを示す．また以下では，電子電子相互作用を無視する．つまり， $I_\eta = 0$ (for all η) とする．反復計算の初期値設定や，安定した計算を行う工夫は付録 D にまとめた．

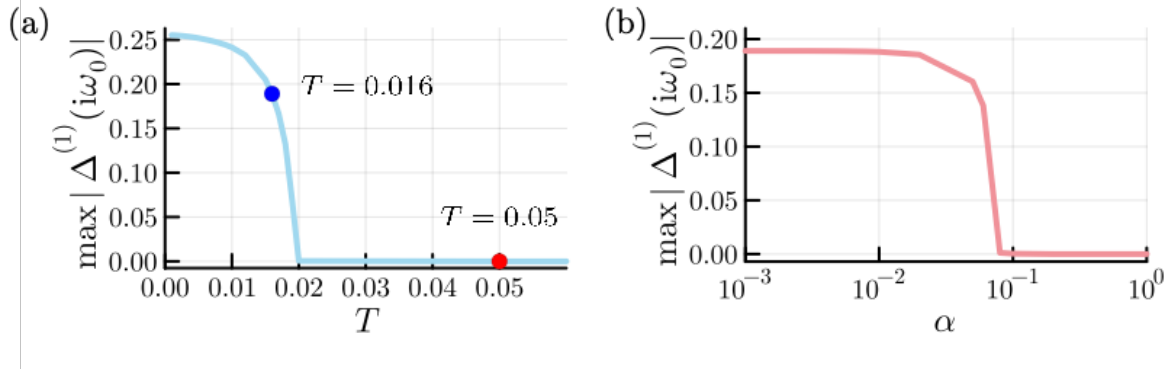


図 7.4. 1 次の範囲での自己無撞着計算の収束解. (a) 秩序変数 Δ の温度依存性. (b) 秩序変数 Δ の外場依存性.

図 7.4(a) は秩序変数 Δ の正の最低松原振動数の温度依存性をプロットした図である. 低温領域では秩序変数が非ゼロであり, 超伝導状態であることがわかる. 温度を上げると, $T_c \simeq 0.02$ で秩序変数が消失し, 常伝導状態に転移することがわかる. 図 7.4(b) は $T = 0.016$ における秩序変数 Δ の外場の大きさ α 依存性をプロットした図である. 外場がない状態では秩序変数が非ゼロであり, 超伝導状態であることがわかる. 外場を大きくしていくと, $\alpha_c = 0.08$ で秩序変数が消失し, 常伝導状態に転移することがわかる.

以上をまとめると, 以下のような $T - \alpha$ 相図が得られる. 本研究では相図上の 4 点について解析を行った.

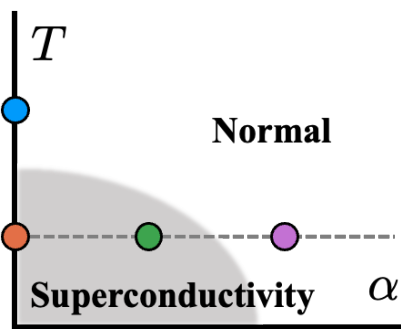


図 7.5. 1 次の結果から描いた概念的な $T - \alpha$ 相図

7.5 計算結果：2 次自己エネルギー

1 次自己無撞着計算の収束解を初期値として, 2 次の自己エネルギーを計算する. 2 次の自己エネルギーの被積分関数は 3 つの連続変数 (虚時間) といくつかの離散変数 (軌道・フォノン) を持つ多変数関数である. そのうち 2 つの連続変数とフォノン振動モードを表

す離散変数について和をとる。

7.5.1 Cross section

はじめに quantics TCI で推定した自己エネルギーの被積分関数を確認する．TCI の許容誤差は $\varepsilon_{\text{TCI}} = 10^{-8}$ とした．図 7.6(a, b, c) は被積分関数の τ', τ'' 依存性をプロットした図である．電子，フォノンともに複数の不連続面を持つことがわかる．図 7.6(d, e, f) は quantics TCI で推定した結果との誤差を示している．

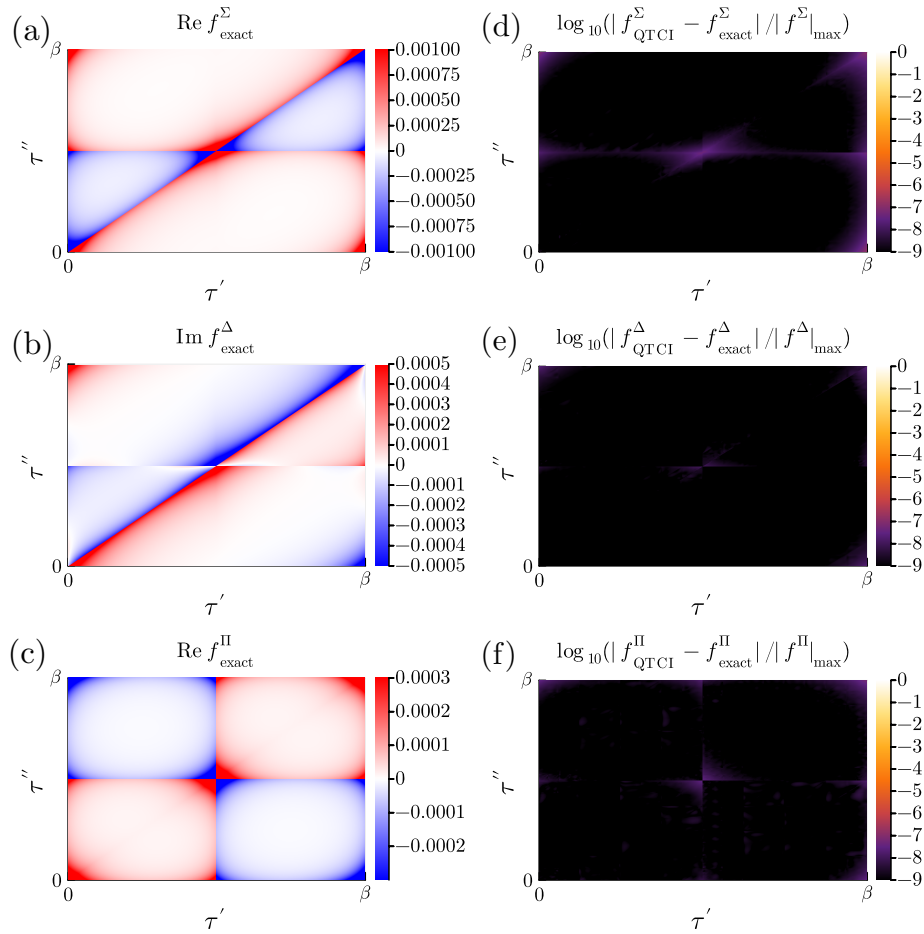


図 7.6. 己エネルギーの被積分関数の断面．(a) 電子の対角部 $(\gamma, \gamma', \eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4) = (1, 1, 1, 1, 1, 1)$, $\tau = \beta/2$. (b) 電子の非対角部 $(\gamma, \gamma', \eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4) = (1, 8, 1, 1, 1, 1)$, $\tau = \beta/2$. (c) フォノン $(\eta, \eta', \eta_1, \eta_2) = (1, 1, 1, 1)$, $\tau = \beta/2$. (d) $\varepsilon_{\text{TCI}} = 10^{-8}$ のときの quantics TCI による電子の対角部の誤差. (e) $\varepsilon_{\text{TCI}} = 10^{-8}$ のときの quantics TCI による電子の非対角部の誤差. (f) $\varepsilon_{\text{TCI}} = 10^{-8}$ のときの quantics TCI によるフォノンの誤差.

7.5.2 TCI の収束性

図 7.7 はボンド次元に対する TCI 推定の収束の様子をプロットしたものである．電子・フォノン両者とも，相図上の 4 点全てにおいて指数的な収束が確認できた．電子の内挿エラーの振る舞いについて， $T = 0.016, \alpha = 0.00$, $T = 0.016, \alpha = 0.05$ はどちらも超伝導状態のパラメータである．この 2 つは， $\chi \simeq 50$ でプラトーの振る舞いが見られる．

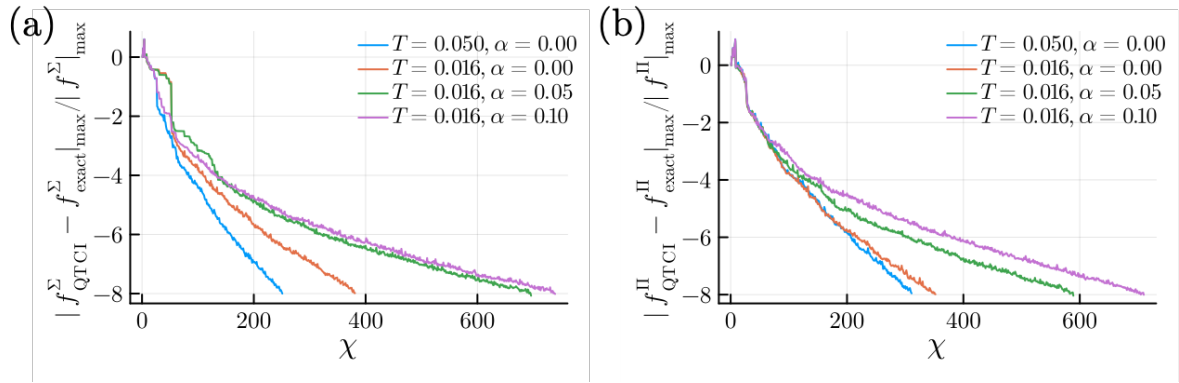


図 7.7. (a) 電子自己エネルギーの TCI 内挿エラーの振る舞い．(b) フォノン自己エネルギーの TCI 内挿エラーの振る舞い

7.5.3 ボンド次元

図 7.8 は電子自己エネルギーとフォノン自己エネルギーのボンド次元のプロットである．どちらの場合も，相図上の 4 点について高い圧縮性があり，自己エネルギーが低ランク構造を持つことを示唆している．

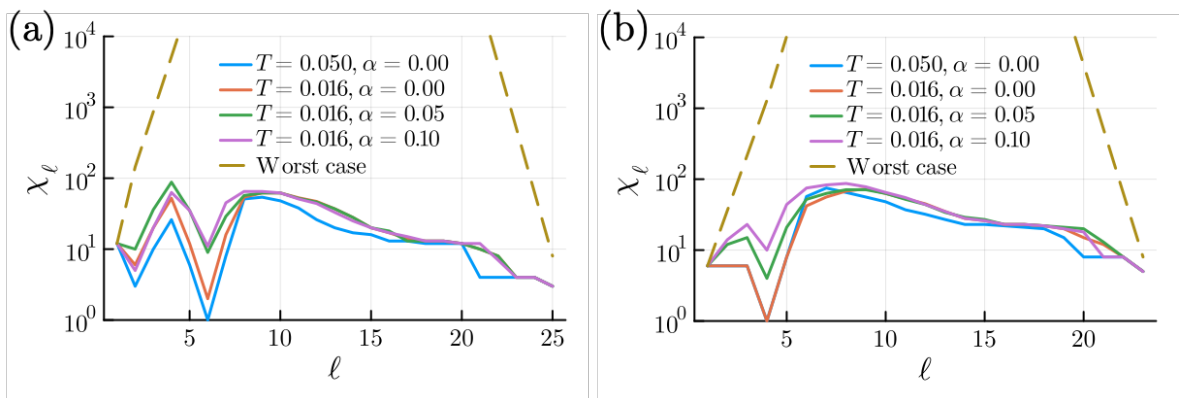


図 7.8. Enter Caption

7.5.4 インデックスの順序による影響

一般に TN の低ランク性は TN の構造やインデックスの配置に依存する．今回，TN の構造は 1 次元的な TT に固定しているため，インデックスの順序による影響を調べる．前提として，関係の強いインデックス同士は近くに配置することで長距離のエンタングルを抑制し，ボンド次元を下げられるということが知られている．そこで，今回の問題ではスピンと軌道のインデックス，フォノン振動モードのインデックス，3つの虚時間はそれぞれまとめて配置することにした．さらに，多次元の quantics 表現については同じスケールのインデックスは隣に並べることで圧縮性を上げることができるため [3]， $\tau_\ell, \tau'_\ell, \tau''_\ell$ はまとめて配置した．

図 7.9 では， $(\gamma, \gamma'), (\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4), (\tau, \tau', \tau'')$ の 3 種類のインデックスについて $3! = 6$ 通りのインデックス配置を比較している．全てのパターンでボンド次元の大きな変化はなく，TCI の収束も指数的な振る舞いが確認できる．しかし，離散変数が虚時間を跨ぐ配置である $(\gamma, \tau, \eta), (\eta, \tau, \gamma)$ のみ他の 4 パターンよりボンド次元が大きいことも見て取れる．ここから，種類が異なるインデックス同士でも，連続的なインデックスと離散的なインデックスはまとめて配置した方がボンド次元的に有利になることがわかった．

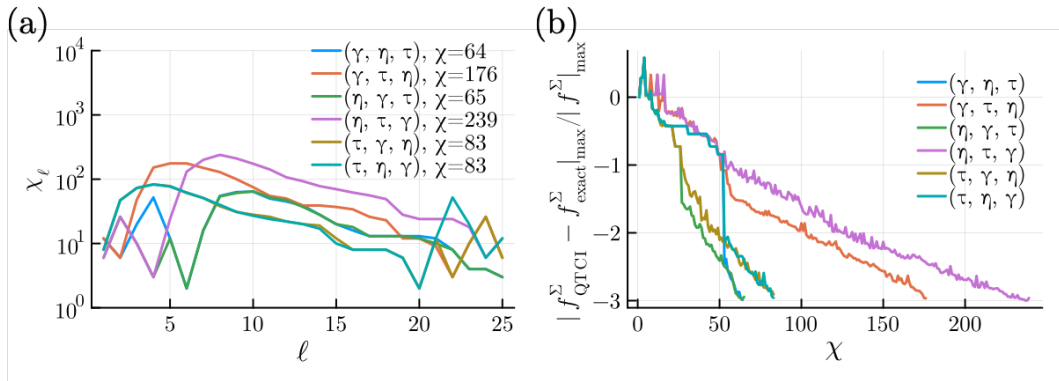


図 7.9. インデックスの並び順による圧縮性への影響

7.6 計算結果：Ergodicity problem

5.4.2 で言及したとおり，TCI による推定は時おり重要なピボットを見逃すことによって誤った解に収束してしまうことがある．特に，異なる種類の離散変数や連続変数が入り乱れるような関数の場合で顕著になる．実際今回扱った多軌道電子格子モデルも，軌道・フォノンモード・虚時間と 3 種類の異なる変数を持ち，Ergodicity problem が発生する．

図 7.10 (blue line) は局所探索のみで TT を構成した際の，電子自己エネルギーのボン

ド次元の振る舞いを示している．一見すると $\ell = 2 \sim 5$ のボンド次元が小さいため，圧縮率が良いことが一見示唆される．

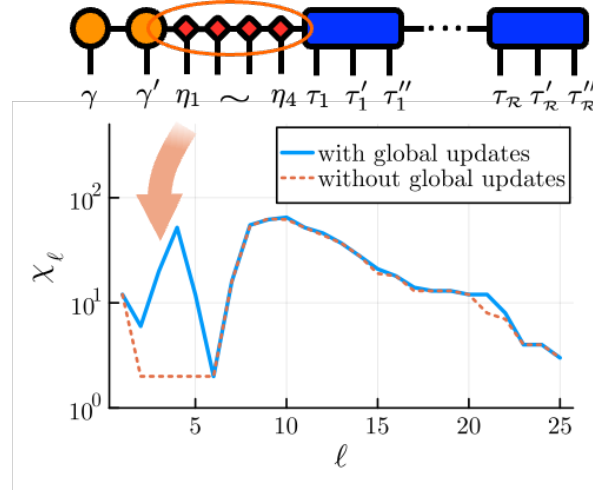


図 7.10. Enter Caption

しかし， $(\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4)$ のいくつかのスライスを見ると，元の関数を全く推定できていないことがわかる．図 7.11 は $(\gamma, \gamma', \eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4, \tau, \tau', \tau'') = (1, 1, 2, 2, 2, 2, \beta/2, \tau', \tau'')$ でのスライスの結果と推定元の関数との誤差をプロットしたものである．右側のプロットはグローバル探索を行わない場合であり，参照データとの誤差が非常に大きいことがわかる．一方，グローバル探索を行った左図では誤差が小さく，グローバル探索により ergodicity problem が解消されることがわかった．

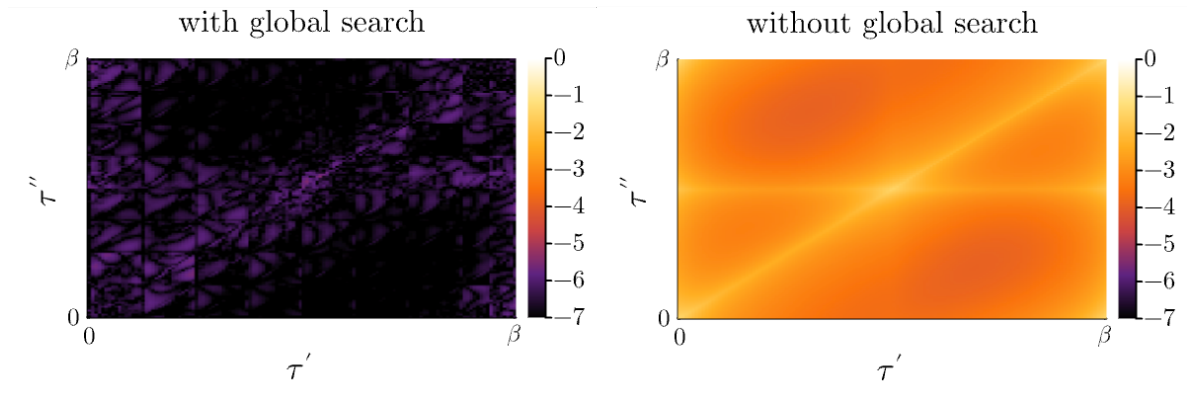


図 7.11. 2 次の電子自己エネルギーについて，グローバル探索を行う場合と行わない場合の結果比較． $(\gamma, \gamma', \eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4, \tau) = (1, 1, 2, 2, 2, 2, \beta/2)$ での推定誤差のプロット．

第 8 章

結論

本研究では、先行研究で十分に解明されていなかった多自由度系における自己エネルギーの低ランク構造の調査と、既存の TCI アルゴリズムの改良に取り組んだ。

まず、多自由度系の自己エネルギーの低ランク構造を明らかにするため、多軌道電子フォノンモデルを解析対象とした。自己エネルギーはスピン・軌道、フォノン振動モード、虚時間といった複数の依存性を持つ高次元関数の積分であり、被積分関数はフェルミオンの交換関係に起因する不連続性を含むため、数値的に扱うことが難しい。この高次元関数に対して TCI を用いて QTT 近似を行い、電子およびフォノンの自己エネルギーが低ランク構造を有することを確認した。さらに、外場によって系の対称性を変化させても、この低ランク構造は保持されることが明らかとなった。低ランク構造に関連して、自己エネルギーの被積分関数における TCI の内挿による誤差がピボット数に対して指数的に減衰することを確認し、低コストかつ高精度な数値積分が可能であることを示した。

一方で、既存の TCI アルゴリズムの改良にも取り組んだ。従来の TCI は、指数的に巨大な探索空間を制限することで、局所的なテンソルコアの最適化をしていたが、これにより誤った局所解に収束する ergodicity problem が発生していた。特に、今回のような離散自由度を含む関数では行列の疎性の影響でこの問題が顕著であった。これに対して、指数的に巨大な探索空間全体を貪欲方により探索する大域探索アルゴリズムを開発し、局所探索と組み合わせることで、局所探索のみでは見逃していたピボットを正しく取得できるようになり、安定した収束解を得ることが可能となった。

本研究は、多自由度モデルの解析における QTT+TCI の実用的応用に向けた基礎的な知見を提供するものである。低ランク構造の存在と誤差の指数減衰は今後の応用のために有望な結果であるが、さらに高い展開次数については今後の詳細な調査が必要である。また、本研究で提案した手法により、従来の量子モンテカルロ法に基づくサンプリング法を代替することも、今後の課題として残されている。

付録 A

線形代数の補足

A.1 半正定値エルミート行列

行列 M は m 次エルミート行列とする．このとき，任意のゼロでないベクトル $\boldsymbol{x}$ に対して以下を満たすならば， M は半正定値エルミート行列であるという．

$$\langle M\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle \geq 0 \quad (\text{A.1})$$

ここで， $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle$ はベクトル $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ の内積を表す．半正定値エルミート行列の固有値が非負実数になることを証明する．半正定値エルミート行列 M の固有値を λ ，規格化された固有ベクトルを $\boldsymbol{v}$ とする．また，エルミート行列の固有値が実数であることは既知とする．

$$\langle M\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v} \rangle = \langle \lambda\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v} \rangle = \lambda\|\boldsymbol{v}\|^2 = \lambda \geq 0. \quad (\text{A.2})$$

最後の不等式で半正定値エルミート行列の定義を使った．以上より，半正定値エルミート行列の固有値は非負実数である．

行列 A を， $m \times n$ の複素行列とする． $A^\dagger A$ または $AA^\dagger$ は必ずエルミート行列である．以下では $A^\dagger A$ が半正定値エルミート行列であり，全ての固有値が非負実数であることを証明する． $\boldsymbol{x}$ をゼロでない任意のベクトルとして，

$$\langle A^\dagger A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle = \langle A\boldsymbol{x}, A\boldsymbol{x} \rangle = \|A\boldsymbol{x}\|^2 \geq 0. \quad (\text{A.3})$$

$AA^\dagger$ も同様にして半正定値エルミート行列である．したがって固有値は非負実数であり，必ず平方根 (特異値) が定義できる．

A.2 特異値分解

特異値分解は，スペクトル分解の考え方を一般の複素行列に拡張したものである．

特異値と特異ベクトル

一般の複素行列 A に対して,

$$\begin{cases} Av &= \sigma u \\ A^\dagger u &= \sigma v \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

を満たす σ を特異値, u, v をそれぞれ左特異ベクトル, 右特異ベクトルという. ただし, 特異ベクトルの大きさは 1 ($|u| = |v| = 1$), 特異値は正 ($\sigma > 0$) とする.

計算するためには次のようにするとよい. $Av = \sigma u$ の両辺に左から $A^\dagger$ をかけると,

$$A^\dagger Av = \sigma A^\dagger u = \sigma^2 v. \quad (\text{A.5})$$

つまり, $A^\dagger A$ の固有値が σ^2 , 固有ベクトルが v であることを表している. ゼロベクトル以外の固有ベクトルを持つために,

$$|A^\dagger A - \sigma^2 E| = 0 \quad (\text{A.6})$$

となる必要がある. この方程式を解いて特異値 (固有値の平方根) を得る. ここで, $A^\dagger A$ は半正定値エルミート行列と呼ばれる特殊な行列であり, 全ての固有値が非負実数であることが知られている (付録 A.1). そのため, 特異値は固有値の平方根として必ず存在する. また, 固有値 σ^2 が求められれば固有ベクトルも簡単に求めることができ,

$$u = \frac{1}{\sigma} A^\dagger v \quad (\text{A.7})$$

より, もう片方の特異ベクトルも計算できる.

はじめに使う式を $A^\dagger u = \sigma v$ として, この両辺に左から A をかけることで

$$AA^\dagger u = \sigma^2 u \quad (\text{A.8})$$

とできるため, 同様の流れで特異値 σ , 特異ベクトル u および v を求めることができる.

どちらの方法でも同様に特異値および特異ベクトルを計算することは可能だが, 一般に A は正方行列ではないため, $A^\dagger A$ と $AA^\dagger$ はサイズの異なる正方行列である. したがって固有値方程式を簡単に解くためにはより小さいサイズになる方を選べばよい.

特異ベクトルによる展開

A のサイズを $n \times m$ とすると, 特異値の数は $r = \min(n, m)$ 個である. これは行列 A のランクに等しい. r 個の特異値には大きい順に通し番号をつけておく:

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \sigma_r \geq 0. \quad (\text{A.9})$$

定義より、特異値 σ_i に対応する特異ベクトル $\mathbf{u}_i, \mathbf{v}_i$ に対して次が成り立つ:

$$A\mathbf{v}_i = \sigma_i\mathbf{u}_i. \quad (\text{A.10})$$

特異ベクトルの集合 $\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_r\}, \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_r\}$ はそれぞれ正規直交基底であるとし、特異ベクトルを並べた行列を U, V とする:

$$U = (\mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2 \ \dots \ \mathbf{u}_r), \quad (\text{A.11})$$

$$V = (\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 \ \dots \ \mathbf{v}_r). \quad (\text{A.12})$$

ここで、 $\mathbf{u}_i^\dagger \mathbf{u}_j = \delta_{ij}$, $\mathbf{v}_i^\dagger \mathbf{v}_j = \delta_{ij}$ のため U, V はユニタリ行列である.

$$\begin{aligned} AV &= (A\mathbf{v}_1, A\mathbf{v}_2, \dots, A\mathbf{v}_r) \\ &= (\sigma_1\mathbf{u}_1, \sigma_2\mathbf{u}_2, \dots, \sigma_r\mathbf{u}_r) \\ &= (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_r) \underbrace{\begin{pmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \sigma_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sigma_r \end{pmatrix}}_{\equiv \Sigma} \\ &= U\Sigma. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

$V^\dagger$ を両辺に右からかけて、

$$A = U\Sigma V^\dagger. \quad (\text{A.14})$$

U, V の列ベクトルを用いると、以下のように表せる.

$$\begin{aligned} A &= \sigma_1\mathbf{u}_1\mathbf{v}_1^\dagger + \sigma_2\mathbf{u}_2\mathbf{v}_2^\dagger + \dots + \sigma_r\mathbf{u}_r\mathbf{v}_r^\dagger, \\ &= \sum_{i=1}^r \sigma_i\mathbf{u}_i\mathbf{v}_i^\dagger. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

行列 A を、特異値 σ_i とそれに対応した特異ベクトルの積 $\mathbf{u}_i\mathbf{v}_i^\dagger$ の和に分解することができた. (A.14) や (A.15) の分解を特異値分解 (Singular Value Decomposition: SVD) という.

A.3 Eckart-Young-Mirsky の定理

特異値分解による低ランク近似は、フロベニウスノルムの意味で最良近似である (Eckart-Young-Mirsky の定理). これを証明する.

$m \times n$ 行列 A に対してフロベニウスノルムは

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_i^n \sum_j^m |A_{ij}|^2} \quad (\text{A.16})$$

と定義されている。 $|\dots|$ は複素数の意味のノルムである。 $\|A - B\|_F$ を、 A と B の「距離」と呼ぶ場合がある。 ある行列 A に対して、

$$\|A - \tilde{A}\|_F \quad (\text{A.17})$$

が最小になるような $\tilde{A}$ を探す問題になる。

行列近似の最適化問題

$m \times n$ 行列 A を近似した行列を $\tilde{A}$ とする。 A のランクは $r = \min(n, m)$ である。このとき、フロベニウスノルム $\|A - \tilde{A}\|_F$ が最小となるような、ランク k 以下の行列 $\tilde{A}$ はなにか。

$$\operatorname{argmin}_{\operatorname{rank}(\tilde{A}) \leq k} \|A - \tilde{A}\|_F \quad (\text{A.18})$$

この問題を解くために、特異値分解に関連した定理を 2 つ紹介する。

定理-1. $\|A\|_F^2 = \operatorname{tr}(AA^\dagger) = \operatorname{tr}(A^\dagger A)$.

(証明) 1 つ目の等号を示す。

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}(AA^\dagger) &= \sum_{\ell} (AA^\dagger)_{\ell\ell} = \sum_{\ell k} A_{\ell k} (A^\dagger)_{k\ell} \\ &= \sum_{\ell k} A_{\ell k} A_{\ell k}^* = \|A\|_F^2 \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

2 つ目の等号はトレースの巡回性を利用すればよい。

定理-2. 任意のユニタリ行列 U, V に対して $\|UAV\|_F = \|A\|_F$.

(証明)

$$\begin{aligned} \|UAV\|_F^2 &= \operatorname{tr}(UAV(UAV)^\dagger) \quad \because \text{定理 1 より} \\ &= \operatorname{tr}(UAVV^\dagger A^\dagger U^\dagger) = \operatorname{tr}(UAA^\dagger U^\dagger) \quad \because V \text{ はユニタリ} \\ &= \operatorname{tr}(U^\dagger UAA^\dagger) \quad \because \text{トレースの巡回性} \\ &= \operatorname{tr}(AA^\dagger) \quad \because U \text{ はユニタリ} \\ &= \|A\|_F^2 \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

したがって $\|UAV\|_F = \|A\|_F$.

定理 1, 2 を使い最適化問題を考える。行列 X はランク k 以下の行列であるとする。 A

と X の距離は

$$\begin{aligned}
\|A - X\|_F^2 &= \text{tr}[(A - X)(A - X)^\dagger] \\
&= \text{tr}[UU^\dagger(A - X)VV^\dagger(A - X)^\dagger] \quad \because U, V \text{ はユニタリ} \\
&= \text{tr}[U^\dagger(A - X)VV^\dagger(A - X)^\dagger U] \quad \because \text{トレースの巡回性} \\
&= \text{tr}[(U^\dagger(A - X)V)(U^\dagger(A - X)V)^\dagger] \\
&= \text{tr}[(\Sigma - U^\dagger X V)(\Sigma - U^\dagger X V)^\dagger] \quad \because U A V^\dagger = \Sigma \\
&= \text{tr}[(\Sigma - G)(\Sigma - G)^\dagger]
\end{aligned} \tag{A.21}$$

$U^\dagger A V \equiv G$ とおいた.

$$(\Sigma - U^\dagger A V)_{ij} = (\Sigma - G)_{ij} = \sigma_i \delta_{ij} - g_{ij} \tag{A.22}$$

$$([\Sigma - U^\dagger A V]^\dagger)_{ij} = ([\Sigma - G]^\dagger)_{ij} = \sigma_i \delta_{ij} - g_{ji}^* \tag{A.23}$$

のため,

$$\begin{aligned}
\text{tr}[(\Sigma - G)(\Sigma - G)^\dagger] &= \sum_\ell \sum_k (\Sigma - G)_{\ell k} ([\Sigma - G]^\dagger)_{k\ell} \\
&= \sum_{\ell k} (\sigma_\ell \delta_{\ell k} - g_{\ell k})(\sigma_k \delta_{k\ell} - g_{\ell k}^*) \\
&= \sum_{\ell k} [\sigma_\ell \sigma_k \delta_{\ell k} - g_{\ell k} \sigma_k \delta_{\ell k} - g_{\ell k}^* \sigma_\ell \delta_{\ell k} + g_{\ell k} g_{\ell k}^*] \\
&= \sum_\ell [\sigma_\ell^2 - g_{\ell\ell} \sigma_\ell - g_{\ell\ell}^* \sigma_\ell] + \sum_{\ell k} |g_{\ell k}|^2 \\
&= \sum_\ell [\sigma_\ell^2 - \sigma_\ell g_{\ell\ell} - \sigma_\ell g_{\ell\ell}^* + |g_{\ell\ell}|^2] + \sum_{\ell k} |g_{\ell k}|^2 \\
&= \sum_\ell |\sigma_\ell - g_{\ell\ell}|^2 + \sum_{\ell \neq k} |g_{\ell k}|^2
\end{aligned} \tag{A.24}$$

ここで, σ_i は $i = k$ までは 0 でない値を持つが, $i > k$ では全て 0 である. これを反映して第 1 項目の和を 2 つに分ける. $r = \min(m, n)$, $R = \max(m, n)$ として,

$$\|A - X\|_F^2 = \sum_{\ell=1}^r |\sigma_\ell - g_{\ell\ell}|^2 + \sum_{\ell=r+1}^R |g_{\ell\ell}|^2 + \sum_{\ell \neq k} |g_{\ell k}|^2 \tag{A.25}$$

これを最小化するように行列要素 $g_{\ell k}$ を決める. ここで, 1 項目の $g_{\ell\ell}$ と 2 項目の $g_{\ell\ell}$ は異なることに注意する (和の範囲が違うため). それぞれの項が 0 になるように $g_{\ell k}$ を取ることができ,

$$g_{\ell k} = \begin{cases} \sigma_\ell & (\ell = k \wedge \ell \leq r) \\ 0 & (\ell = k \wedge \ell > r) \\ 0 & (\ell \neq k) \end{cases} \tag{A.26}$$

これはまさに特異値分解により低ランク近似したものに一致する.

A.4 Schur 補行列

行列 A を 4 ブロックに分割する.

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.27})$$

分割は A_{11} が正則行列となるよう行うとする. ここで, A_{11} についての Schur 補行列 $[A/A_{11}]$ は以下で定義される.

$$[A/A_{11}] \equiv A_{22} - A_{21}(A_{11})^{-1}A_{12} \quad (\text{A.28})$$

Schur 補行列を用いて, 行列 A は次のように分解することができる. 等式が成り立つことは, 右辺の行列の積を実際に計算すれば確認できる.

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{11} & 0 \\ A_{21}(A_{11})^{-1} & \mathbb{1}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & [A/A_{11}] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{11} & (A_{11})^{-1}A_{12} \\ 0 & \mathbb{1}_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.29})$$

$\mathbb{1}_{ii}$ は A_{ii} と同じサイズの単位行列である. 正則行列 M_1, M_2 に対して成り立つ行列式の性質 $\det\{M_1 M_2\} = \det\{M_1\} \det\{M_2\}$ より,

$$\det\{A\} = \det A_{11} \det[A/A_{11}] \quad (\text{A.30})$$

が成り立つ.

A.5 Partial rank-revealing LU 分解

prrLU 分解は Schur 補行列の次の性質に基づいている.

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{11} & 0 \\ A_{21}(A_{11})^{-1} & \mathbb{1}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & [A/A_{11}] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{11} & (A_{11})^{-1}A_{12} \\ 0 & \mathbb{1}_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.31})$$

ここで, $[A/A_{11}]$ は A の 11 ブロックに対する Schur 補行列である. この恒等式を繰り返し利用することで prrLU 分解が可能である.

まず, A の行と列を入れ替えることで, A の最大成分を 11 成分の位置に移動し, $\bar{a}_{11}^{(1)}$ とする. $\bar{a}_{11}^{(1)}$ をサイズ 1×1 の 11-ブロックとして (A.31) を適用する. 以下で, P, Q は行と列の入れ替えを表す正則行列である. A の行と列の入れ替えを行った行列を $P_1 A Q_1 \equiv \bar{A}^{(1)}$ と表す.

$$\bar{A}^{(1)} = P_1 A Q_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ L_{21}^{(1)} & \mathbb{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{a}_{11}^{(1)} & 0 \\ 0 & [\bar{A}^{(1)}/1] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & U_{12}^{(1)} \\ 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix} \equiv L_1 D_1 U_1 \quad (\text{A.32})$$

中央行列の 22-ブロックは $[A/\bar{a}_{11}^{(1)}]$ ($= [A/1]$) である. 次に $[A/1]$ の最大要素を $[A/1]$ の 11 成分の位置に移動するために, D_1 に行と列の入れ替え行列 $P^{(2)}, Q^{(2)}$ を作用させる. 移動後の $[A/1]$ の 11 成分を $\bar{a}_{11}^{(2)}$ とする. また, D_1 に $P^{(2)}, Q^{(2)}$ を作用させた行列を $\bar{A}^{(2)}$ とする.

$$\bar{A}^{(2)} = P_2 D_1 Q_1 = P_2 \begin{pmatrix} \bar{a}_{11}^{(1)} & 0 \\ 0 & [\bar{A}^{(1)}/1] \end{pmatrix} Q_2 \quad (\text{A.33})$$

$\bar{A}^{(2)}$ に対して再度恒等式 (A.31) を適用する.

$$\bar{A}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & 0 \\ & L_{21}^{(2)} & \mathbb{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{a}_{11}^{(1)} & & \\ & \bar{a}_{11}^{(2)} & \\ & & [\bar{A}^{(2)}/1] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & U_{12}^{(2)} \\ & 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix} \equiv L_2 D_2 U_2 \quad (\text{A.34})$$

以上の操作を $\tilde{\chi}$ ステップ繰り返すと, 次のように $\bar{A}^{(1)}, \bar{A}^{(2)}, \dots, \bar{A}^{(\tilde{\chi})}$ が得られる.

$$\bar{A}^{(1)} = P_1 A Q_1 = L_1 D_1 U_1 \quad (\text{A.35})$$

$$\bar{A}^{(2)} = P_2 D_1 Q_2 = L_2 D_2 U_2 \quad (\text{A.36})$$

$\vdots$

$$\bar{A}^{(\tilde{\chi})} = P_{\tilde{\chi}} D_{\tilde{\chi}-1} Q_{\tilde{\chi}} = L_{\tilde{\chi}} D_{\tilde{\chi}} U_{\tilde{\chi}} \quad (\text{A.37})$$

(A.37) から順次 D_{i-1} を解き, $D_{i-1} = P_i^{-1} L_i D_i U_i Q_i^{-1}$ として 1 つ前のステップの式に代入すると, 最終的に次が得られる.

$$A = P_1 L_1 P_2 L_2 \cdots P_{\tilde{\chi}} L_{\tilde{\chi}} D_{\tilde{\chi}} U_{\tilde{\chi}} Q_{\tilde{\chi}} \cdots U_2 Q_2 U_1 Q_1 \quad (\text{A.38})$$

ここで, $P_i^{-1} = P_i$, $Q_i^{-1} = Q_i$ を用いた. さらに単位行列 $I = P_i P_i = Q_j Q_j$ を適宜挿入することで, 以下のように変形する.

$$A = (P_1 P_2 \cdots P_{\tilde{\chi}}) (P_{\tilde{\chi}} P_{\tilde{\chi}-1} \cdots P_2 L_1 P_2 \cdots P_{\tilde{\chi}-1} P_{\tilde{\chi}}) \cdots (P_{\tilde{\chi}} L_{\tilde{\chi}-1} P_{\tilde{\chi}}) L_{\tilde{\chi}} D_{\tilde{\chi}} U_{\tilde{\chi}} (Q_{\tilde{\chi}} U_{\tilde{\chi}-1} Q_{\tilde{\chi}}) \cdots (Q_{\tilde{\chi}} Q_{\tilde{\chi}-1} \cdots Q_2 U_1 Q_2 \cdots Q_{\tilde{\chi}-1} Q_{\tilde{\chi}}) (Q_{\tilde{\chi}} Q_{\tilde{\chi}-1} \cdots Q_1) \quad (\text{A.39})$$

式を整理するために次で定義される行列 $\tilde{L}_k, \tilde{U}_k$ を導入する.

$$\begin{cases} \tilde{L}_k &= P_{\tilde{\chi}} P_{\tilde{\chi}-1} \cdots P_{k+1} L_k P_{k+1} \cdots P_{\tilde{\chi}-1} P_{\tilde{\chi}} \\ \tilde{U}_k &= Q_{\tilde{\chi}} Q_{\tilde{\chi}-1} \cdots Q_{k+1} U_k Q_{k+1} \cdots Q_{\tilde{\chi}-1} Q_{\tilde{\chi}} \end{cases} \quad (\text{A.40})$$

$\tilde{L}_{\tilde{\chi}} = L_{\tilde{\chi}}$, $\tilde{U}_{\tilde{\chi}} = U_{\tilde{\chi}}$ とする. $\tilde{L}_k, \tilde{U}_k$ を用いることで, (A.39) は

$$A = (P_1 P_2 \cdots P_{\tilde{\chi}}) (\tilde{L}_1 \tilde{L}_2 \cdots \tilde{L}_{\tilde{\chi}}) D_{\tilde{\chi}} (U_{\tilde{\chi}} \cdots \tilde{U}_2 \tilde{U}_1) (Q_{\tilde{\chi}} \cdots Q_2 Q_1) \quad (\text{A.41})$$

となる.

基本行列の積はこれまでの行や列の入れ替えの履歴を表す．これらをまとめて $P_{\tilde{\chi}} \cdots P_2 P_1 = P$, $Q_1 Q_2 \cdots Q_{\tilde{\chi}} = Q$ とおく．

L_k は次で定義されるフロベニウス行列^{*1}である． L_k がフロベニウス行列のため， $\tilde{L}_k$ もフロベニウス行列であり，下三角行列である． $U_k, \tilde{U}_k$ はフロベニウス行列の転置であり，上三角行列である．したがって $\tilde{L}$ や $\tilde{U}$ の積も下 (上) 三角行列となる．さらに， $\tilde{L}_i$ は i 列の $(i, i+1)$ 成分以下にのみ 0, 1 以外の成分が並ぶため， $\tilde{L}_1 \tilde{L}_2 \cdots \tilde{L}_{\tilde{\chi}}$ の $(\tilde{\chi}+1, \tilde{\chi}+1)$ 成分以下の部分行列は単位行列となる． $\tilde{U}_1 \tilde{U}_2 \cdots \tilde{U}_{\tilde{\chi}}$ も同様に $(\tilde{\chi}+1, \tilde{\chi}+1)$ 以下の部分行列は単位行列である．したがって，以下のように成分を置くことが可能である．

$$\tilde{L}_1 \tilde{L}_2 \cdots \tilde{L}_{\tilde{\chi}} \equiv L = \begin{pmatrix} L_{11} & 0 \\ L_{21} & \mathbb{1}_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.42})$$

$$\tilde{U}_{\tilde{\chi}} \cdots \tilde{U}_2 \tilde{U}_1 \equiv U = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ 0 & \mathbb{1}_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.43})$$

L_{11} は対角要素を 1 とする $\tilde{\chi} \times \tilde{\chi}$ の下三角行列， U_{11} は対角要素を 1 とする $\tilde{\chi} \times \tilde{\chi}$ の上三角行列である．

$D_{\tilde{\chi}}$ は以下のようなブロック対角行列である． $D = \text{diag} \left(\bar{a}_{11}^{(1)}, \bar{a}_{11}^{(2)}, \dots, \bar{a}_{11}^{(\tilde{\chi})} \right)$ は $\tilde{\chi} \times \tilde{\chi}$ の対角行列である．

$$D_{\tilde{\chi}} = \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & [A/(1, \dots, \tilde{\chi})] \end{pmatrix} \quad (\text{A.44})$$

以上をまとめると，行列 A は行と列の入れ替えを含めて次のように分解することができる．

$$PAQ = LD_{\tilde{\chi}}U \quad (\text{A.45})$$

また， A のランクが χ の場合は χ ステップ後に Schur 補行列 $[A/(1, \dots, \chi)]$ が零行列になる．以下では $\tilde{\chi} < \chi$ とする．上の分解は Schur 補行列を分離して次のように書くこともできる．

$$PAQ = \tilde{L} D \tilde{U} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & [A/(1, \dots, \tilde{\chi})] \end{pmatrix}, \quad (\text{A.46})$$

$$\tilde{L} = \begin{pmatrix} L_{11} \\ L_{21} \end{pmatrix}, \quad \tilde{U} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \end{pmatrix} \quad (\text{A.47})$$

^{*1} n 次元ベクトル $\mathbf{f}_k = (\underbrace{0, 0, \dots, 0}_{k \text{ 個}}, f_{k+1,k}, \dots, f_{n,k})^\top$ に対して $F_k = I - \mathbf{f}_k \mathbf{e}_k^\top$ をフロベニウス行列という．ここで k は 1 以上 n 以下の整数であり， $\mathbf{e}_k$ は k 番目の成分が 1, それ以外が 0 であるような n 次元ベクトルである．

付録 B

Green 関数法

本節では，DMFT 計算をする上で必要になる Green 関数について，簡潔に基本事項をまとめる．

温度グリーン関数の定義

生成/消滅演算子 $c_\alpha^\dagger, c_\alpha$ ，ハミルトニアン $\mathcal{H}$ に対して，温度 Green 関数を以下で定義する：

$$G_\alpha(\tau) = -\langle T_\tau c_\alpha(\tau) c_\alpha^\dagger(0) \rangle = -\frac{\text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}} T_\tau c_\alpha(\tau) c_\alpha^\dagger(0)]}{\text{Tr} \{e^{-\beta\mathcal{H}}\}}. \quad (\text{B.1})$$

ここで， τ は虚時間であり，ある演算子 A の虚時間依存性 $A(\tau)$ は以下の Heisenberg 表示で与えられる：

$$A(\tau) = e^{\tau\mathcal{H}} A e^{-\tau\mathcal{H}}. \quad (\text{B.2})$$

T_τ は (虚) 時間順序積と呼ばれ，虚時間依存する演算子 $A(\tau)B(\tau')$ の積に対して以下のよう作用する：

$$\begin{aligned} T_\tau A(\tau)B(\tau') &= \begin{cases} A(\tau)B(\tau') & (\tau > \tau') \\ \pm B(\tau')A(\tau) & (\tau < \tau') \end{cases}, \\ &= \theta(\tau - \tau')A(\tau)B(\tau') \pm \theta(\tau' - \tau)B(\tau')A(\tau). \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

$+$ はボソン $-$ はフェルミオンに対応する． $\theta(\tau)$ は Heaviside の階段関数である． $c_\alpha^\dagger, c_\alpha$ の具体的な虚時間依存性を調べため，自由フェルミオン系 ($\mathcal{H}_0 = \sum_\alpha \xi_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha$) を考える． ξ_α は化学ポテンシャルから測ったエネルギー $\xi_\alpha = \varepsilon_\alpha - \mu$ とする．Heisenberg の運動方程式より

$$\frac{\partial c_\alpha(\tau)}{\partial \tau} = [\mathcal{H}_0, c_\alpha(\tau)] = e^{\tau\mathcal{H}_0} [\mathcal{H}_0, c_\alpha] e^{-\tau\mathcal{H}_0} = -\xi_\alpha c_\alpha(\tau) \quad (\text{B.4})$$

である。ここで、フェルミオンの反交換関係より $[\mathcal{H}_0, c_\alpha] = -\xi_\alpha c_\alpha$ を使った。初期条件を $c_\alpha(0) = c_\alpha$ とすると、

$$c_\alpha(\tau) = e^{-\xi_\alpha \tau} c_\alpha \quad (\text{B.5})$$

である。同様に、

$$c_\alpha^\dagger(\tau) = e^{\xi_\alpha \tau} c_\alpha^\dagger \quad (\text{B.6})$$

である。したがって、Green 関数は

$$G_\alpha(\tau) = \begin{cases} -f(-\xi_\alpha) e^{-\tau \xi_\alpha} & (\tau > 0) \\ f(\xi_\alpha) e^{-\tau \xi_\alpha} & (\tau < 0) \end{cases} \quad (\text{B.7})$$

となる。ここで、フェルミ分布関数 $\langle c_\alpha^\dagger c_\alpha \rangle = f(\xi_\alpha) = 1/(1 + e^{\beta \xi_\alpha})$ を用いた。

周期性と Fourier 変換

フェルミオン Green 関数は半周期性を持つ。この事実は Green 関数の定義 (B.1) 式に恒等演算子を挿入し、トレースの巡回性を用いて示すことができる。 $\tau > 0$ として

$$\begin{aligned} G_\alpha(\tau) &= -\frac{\text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}} e^{\tau \mathcal{H}} c_\alpha e^{-\tau \mathcal{H}} c_\alpha^\dagger]}{Z} \\ &= -\frac{\text{Tr} [e^{(\tau-\beta) \mathcal{H}} c_\alpha e^{-(\tau-\beta) \mathcal{H}} e^{-\beta \mathcal{H}} c_\alpha^\dagger]}{Z} \\ &= -\frac{\text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}} c_\alpha^\dagger e^{(\tau-\beta) \mathcal{H}} c_\alpha e^{-(\tau-\beta) \mathcal{H}}]}{Z} \\ &= -G_\alpha(\tau - \beta) \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

である。 Z は分配関数 $Z = \text{Tr} [e^{-\beta \mathcal{H}}]$ である。以上より、Green 関数は β について半周期性をもつ。そのため 2β の周期関数である。 $\tau < 0$ も同様に示すことができる。Green 関数は周期性を持つため、Fourier 変換が可能である。 $-\beta \leq \tau \leq \beta$ を周期として、以下のような Fourier 級数展開を考える：

$$G_\alpha(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\ell} G_\alpha(i\omega_\ell) e^{-i\omega_\ell \tau}. \quad (\text{B.9})$$

展開係数を $G_\alpha(i\omega_\ell)$ と置いたが、 $G_\alpha(\tau)$ とは異なる関数形である。しかし、実用上混同する可能性は低いため、両者の違いは引数で区別することにする。 $\omega_\ell = \frac{2\pi\ell}{2\beta}$ であり、 $\ell \in \mathbb{Z}$ である。

逆変換により展開係数を求める:

$$\begin{aligned}
G_\alpha(i\omega_\ell) &= \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau G_\alpha(\tau) e^{i\omega_\ell \tau} \\
&= \frac{1}{2} \left[\int_0^{\beta} d\tau G_\alpha(\tau) e^{i\omega_\ell \tau} + \int_{-\beta}^0 d\tau G_\alpha(\tau) e^{i\omega_\ell \tau} \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[\int_0^{\beta} d\tau G_\alpha(\tau) e^{i\omega_\ell \tau} + \int_0^{\beta} d\tau G_\alpha(\tau + \beta) e^{i\omega_\ell(\tau + \beta)} \right] \\
&= \frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\tau [G_\alpha(\tau) e^{i\omega_\ell \tau} - G_\alpha(\tau) e^{i\omega_\ell \tau} e^{i\omega_\ell \beta}] \\
&= \frac{1 - e^{i\omega_\ell \beta}}{2} \int_0^{\beta} d\tau G_\alpha(\tau) e^{i\omega_\ell \tau}.
\end{aligned} \tag{B.10}$$

係数に着目する. $\omega_n = \pi\ell/\beta$ を代入すると, 係数は ℓ が奇数の場合は 1, 偶数の場合は 0 となる. そこで, $\ell = 2n + 1$ となる $n \in \mathbb{Z}$ を導入し,

$$\omega_n = \frac{(2n + 1)\pi}{\beta} \tag{B.11}$$

と再定義する. ω_n は松原振動数と呼ばれる. 松原振動数を用いて展開係数は以下のように書ける:

$$G_\alpha(i\omega_n) = \int_0^{\beta} G_\alpha(\tau) e^{i\omega_n \tau}. \tag{B.12}$$

Lehemann 表示

ハミルトニアン $\mathcal{H}$ に対して, 固有値と固有状態をそれぞれ E_m , $|m\rangle$ とする:

$$\mathcal{H} |m\rangle = E_m |m\rangle. \tag{B.13}$$

$0 \leq \tau \leq \beta$ として, Green 関数の定義 (B.1) 式より,

$$\begin{aligned}
G_\alpha(\tau) &= -\frac{1}{Z} \text{Tr} [e^{-\beta\mathcal{H}} c_\alpha(\tau) c_\alpha^\dagger(0)] \\
&= -e^{\beta\Omega} \sum_m \langle m | e^{-\beta\mathcal{H}} c_\alpha(\tau) c_\alpha^\dagger(0) | m \rangle \\
&= -e^{\beta\Omega} \sum_{m\ell} e^{-\beta E_m} |m\rangle c_\alpha(\tau) |\ell\rangle \langle \ell | c_\alpha^\dagger(0) | \ell \rangle \\
&= -\sum_{m\ell} e^{\beta(\Omega - E_m)} e^{(E_m - E_\ell)\tau} |\langle m | c_\alpha | \ell \rangle|^2.
\end{aligned} \tag{B.14}$$

ここで, $Z = e^{-\beta\Omega}$ とおき, $c_\alpha(0) = c_\alpha$ とした. 関数 $A_\alpha(E)$ を次で定義する:

$$A_\alpha(E) = \sum_{m\ell} e^{\beta(\Omega - E_\ell)} |\langle m | c_\alpha | \ell \rangle|^2 (e^{\beta E} + 1) \delta(E - E_\ell + E_m). \quad (\text{B.15})$$

$A_\alpha(E)$ はスペクトル関数と呼ばれる. スペクトル関数を用いて Green 関数は以下のように表せる:

$$G_\alpha(\tau) = - \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{A_\alpha(E)}{e^{\beta E} + 1} e^{-E\tau} e^{\beta E} \quad (\text{B.16})$$

松原周波数へ Fourier 変換すると,

$$G_\alpha(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A_\alpha(E)}{i\omega_n - E} \quad (\text{B.17})$$

である. この表示は Lehmann 表示 (スペクトル表示) と呼ばれる. スペクトル関数は任意の E に対して非負であり, かつ総和則 $\int_{-\infty}^{\infty} dE A_\alpha(E) = 1$ が成り立つ.

自由粒子の Green 関数

Green 関数の例として, 相互作用がない自由電子系について具体的な表式を求める. ハミルトニアンは $\mathcal{H}_0$ で与えられる.

$$\begin{aligned} G(i\omega_n) &= \int_0^\beta d\tau G(\tau) e^{i\omega_n \tau} \\ &= \int_0^\beta d\tau (1 - f(\xi_\alpha)) e^{i\omega_n \tau} \\ &= - \int_0^\beta d\tau \frac{e^{-\xi_\alpha \tau}}{1 + e^{-\beta \xi_\alpha}} e^{i\omega_n \tau} \\ &= \frac{1}{i\omega_n - \xi_\alpha} \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

となる. 最後の式変形では, ω_n がフェルミオンの松原振動数であるため $e^{i\omega_n \beta} = -1$ を用いた.

相互作用がある場合

相互作用を含むハミルトニアンを考える:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}}. \quad (\text{B.19})$$

自由粒子のハミルトニアン $\mathcal{H}_0$ に対して、相互作用として $\mathcal{H}_{\text{int}}$ が加えられている。 $\mathcal{H}_{\text{int}}$ としては 2 体相互作用 $\mathcal{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} c_{\delta}$ を考える。 Heisenberg の運動方程式から、

$$\frac{\partial}{\partial \tau} c_{\alpha}(\tau) = [\mathcal{H}, c_{\alpha}(\tau)] = -\xi_{\alpha} c_{\alpha}(\tau) + [\mathcal{H}_{\text{int}}, c_{\alpha}(\tau)]. \quad (\text{B.20})$$

Green 関数の運動方程式を求める。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} G_{\alpha}(\tau) &= -\frac{\partial}{\partial \tau} \langle \theta(\tau) c_{\alpha}(\tau) c_{\alpha}^{\dagger} - \theta(-\tau) c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha}(\tau) \rangle \\ &= -\left\langle \delta(\tau) c_{\alpha}(\tau) c_{\alpha}^{\dagger} + \theta(\tau) \frac{\partial c_{\alpha}(\tau)}{\partial \tau} c_{\alpha}^{\dagger} - \left[-\delta(-\tau) c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha}(\tau) + \theta(-\tau) c_{\alpha}^{\dagger} \frac{\partial c_{\alpha}(\tau)}{\partial \tau} \right] \right\rangle \\ &= -\delta(\tau) (\langle c_{\alpha}(\tau) c_{\alpha}^{\dagger} \rangle + \langle c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha}(\tau) \rangle) + \left\langle T_{\tau} \frac{\partial c_{\alpha}(\tau)}{\partial \tau} c_{\alpha}^{\dagger} \right\rangle \\ &= -\delta(\tau) + \langle T_{\tau} (-\xi_{\alpha} c_{\alpha}(\tau) + [\mathcal{H}_{\text{int}}, c_{\alpha}(\tau)]) c_{\alpha}^{\dagger} \rangle \\ &= -\delta(\tau) - \xi_{\alpha} G_{\alpha}(\tau) + \langle T_{\tau} [\mathcal{H}_{\text{int}}, c_{\alpha}(\tau)] c_{\alpha}^{\dagger} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Green 関数は 2 つの演算子で定義された関数であったが、その微分にはさらに多くの演算子で定義された Green 関数 (多粒子 Green 関数) が現れる。 Green 関数を求めるためにはより高次の Green 関数が必要な構造である。 一般の多粒子 Green 関数を求めるのは困難であるため、次を満たす自己エネルギーと呼ばれる新たな関数 $\Sigma_{\alpha}(\tau)$ を導入し、運動方程式を形式的に解く：

$$\langle T_{\tau} [\mathcal{H}_{\text{int}}, c_{\alpha}(\tau)] c_{\alpha}^{\dagger} \rangle = -\int_0^{\beta} d\tau' \Sigma_{\alpha}(\tau - \tau') G_{\alpha}(\tau'). \quad (\text{B.22})$$

これを運動方程式に代入し、松原周波数へ Fourier 変換する：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} G_{\alpha}(\tau) + \xi_{\alpha} G_{\alpha}(\tau) + \int_0^{\beta} d\tau' \Sigma_{\alpha}(\tau - \tau') G_{\alpha}(\tau') &= -\delta(\tau), \\ \implies [i\omega_n - \xi_{\alpha} - \Sigma_{\alpha}(i\omega_n)] G_{\alpha}(i\omega_n) &= 1. \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

したがって、

$$G_{\alpha}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\alpha} - \Sigma_{\alpha}(i\omega_n)}. \quad (\text{B.24})$$

自由粒子の場合と見比べると、分母の $\Sigma_{\alpha}(i\omega_n)$ が異なる。 したがって、自己エネルギー $\Sigma_{\alpha}(i\omega_n)$ が相互作用による自由粒子からの補正を表すことがわかる。 自由粒子の Green

関数を $G_\alpha^0(i\omega_n)$ として代入すると,

$$G_\alpha(i\omega_n) = \frac{1}{\frac{1}{G_\alpha^0(i\omega_n)} - \Sigma_\alpha(i\omega_n)},$$

$$\Longleftrightarrow \Sigma_\alpha(i\omega_n) = \frac{1}{G_\alpha^0(i\omega_n)} - \frac{1}{G_\alpha(i\omega_n)}, \quad (\text{B.25})$$

$$\Longleftrightarrow G = G^0 + G^0 \Sigma G. \quad (\text{B.26})$$

と変形できる. (B.25), (B.26) は Dyson 方程式と呼ばれる. Σ を求めるためには G が必要で, G を求めるためには Σ が必要な構造の方程式であり, 自己無撞着に解を決める必要がある.

付録 C

中間基底とスパースサンプリング

温度 Green 関数を扱う際，以下の松原周波数から虚時間への Fourier 変換は数値的ボトルネックである：

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n G(i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau}. \quad (\text{C.1})$$

厳密には無限個の松原周波数について和を取る必要があるが，数値計算の都合上，有限の個数で打ち切る必要がある．松原 Green 関数は大きな松原周波数の領域でおよそ $1/i\omega_n$ の振る舞いをしており，収束性が悪い．そのため和を収束させるためには多くの松原周波数での値を足し上げる必要がある．これがボトルネックの原因である．

IR 基底およびスパースサンプリング法は Green 関数を評価する松原点を適応的に選ぶことで，従来の方法よりも少ない松原点数で精度の良い結果を得ることができる．以下では IR 基底の構成方法と評価点の選択方法について説明する．

B.1 IR 基底

Green 関数の Rehemann 表示

松原 Green 関数 $G(i\nu)$ はスペクトル関数 $A(\omega)$ を用いて次のように表示することができる (Rehemann 表示)．

$$\begin{aligned} G(i\nu) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{i\nu - \omega} A(\omega) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega K(i\omega_n, \omega) A(\omega) \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

ここで，カーネル $K(i\nu, \omega) \equiv \frac{1}{i\nu - \omega}$ を定義した．カーネルはモデルや系のパラメータに依存しない普遍的な関数である．Green 関数の松原周波数について Fourier 変換す

ると,

$$\begin{aligned}
 G(\tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_{i\nu} e^{-i\nu\tau} G(i\nu) \\
 &= \frac{1}{\beta} \sum_{i\nu} e^{-i\nu\tau} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega K(i\nu, \omega) A(\omega) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \underbrace{\frac{1}{\beta} \sum_{i\nu} e^{-i\nu\tau} K(i\nu, \omega)}_{\text{~~~~~}} A(\omega)
 \end{aligned} \tag{C.3}$$

β は逆温度である．式中の波線部分はカーネルの Fourier 変換になっていて，この部分を $-K(\tau, \omega)$ とおく．

$$G(\tau) = - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega K(\tau, \omega) A(\omega) \quad (0 < \tau < \beta) \tag{C.4}$$

和 $\sum_{i\nu}$ をとる松原点は，フェルミオンとボソンとで異なり，それぞれ

$$K(\tau, \omega) = \begin{cases} \frac{e^{-\tau\omega}}{1 + e^{-\beta\omega}} & (\text{フェルミオン}) \\ \frac{e^{-\tau\omega}}{1 - e^{-\beta\omega}} & (\text{ボソン}) \end{cases} \tag{C.5}$$

となる．ボソンの場合は $\omega = 0$ で発散してしまうため，これを避けるためにカーネルを改めて次のように定義しなおす．

$$\begin{aligned}
 G(\tau) &= - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-\tau\omega}}{1 + e^{-\beta\omega}} \rho(\omega) \\
 &\equiv - \int_{-\infty}^{\infty} d\omega K^L(\tau, \omega) \rho(\omega)
 \end{aligned} \tag{C.6}$$

$K^L(\tau, \omega)$ はロジスティックカーネルと呼ばれている．これ以降，カーネルといった場合，ロジスティックカーネルを指しているものとする．ここで，スペクトル関数 $\rho(\omega)$ は次のように再定義される：

$$\rho(\omega) = \begin{cases} A(\omega) & (\text{フェルミオン}) \\ \frac{A(\omega)}{\tanh(\beta\omega/2)} = \frac{1 + e^{-\beta\omega}}{1 - e^{-\beta\omega}} A(\omega) & (\text{ボソン}) \end{cases} \tag{C.7}$$

定義の通り，フェルミオンの場合 $A(\omega)$ はスペクトル関数であり，ボソンの場合は発散を避けるための係数が付く．スペクトル関数は $[-\omega_{\max}, \omega_{\max}]$ で有限の値を持つとして，Green 関数のスペクトル表示は

$$G(\tau) = - \int_{-\omega_{\max}}^{\omega_{\max}} d\omega K^L(\tau, \omega) \rho(\omega) \tag{C.8}$$

となる．

特異値分解と IR 基底

τ, ω は連続変数であるが、数値計算のために離散化される。つまり、カーネル $K^L(\tau, \omega)$ は τ, ω それぞれを行、列とする行列として表現される。そのため、通常の行列同様に特異値分解が可能である。カーネルを特異値分解すると、

$$K^L(\tau, \omega) = \sum_{l=0}^{\infty} U_l(\tau) S_l V_l(\omega) \quad (\text{C.9})$$

となる。 S_l は特異値であり、添字 l に対して、 $S_1 > S_2 > \dots$ のように大きな順に並んでいる。 $U_l(\tau), V_l(\omega)$ は特異ベクトルである。もともと $K(\tau, \omega)$ は τ, ω を変数とした関数だったため、 $U_l(\tau), V_l(\omega)$ を特異関数と呼ぶ場合もある。以下で見るように、Green 関数は特異関数を規定として展開できる。このとき、特異関数は IR 基底と呼ばれる。IR 基底は以下の性質を持つ。

1. 特異値 S_ℓ は l に対して、指数以上の速度で狭義単調減少する。
2. 必要な特異値の個数は逆温度 β と積分のカットオフ $\omega_{\max}$ によって決まる無次元量 $\Lambda = \beta \omega_{\max}$ のみに依存する。さらに、 Λ に対して高々対数程度で増加する。
3. 特異関数は正規直交基底をなす。
4. 特異関数は実にとることができ、関数の偶奇は ℓ の偶奇と対応する。
5. 特異関数は ℓ 個の根を持ち、 $\Lambda \rightarrow \infty$ でルジャンドル多項式と定数倍を除き一致する。

Green 関数 $G(\tau)$ は IR 基底を用いて以下のように展開される：

$$G(\tau) \simeq \sum_{\ell=0}^{L-1} G_\ell U_\ell(\tau). \quad (\text{C.10})$$

基底を有限個で打ち切ることによって誤差が生じるため、上記式は近似式である。展開係数は以下である：

$$G_\ell = S_\ell \underbrace{\int_{-\omega_{\max}}^{\omega_{\max}} d\omega \rho(\omega) V_\ell(\omega)}_{\equiv \rho_\ell} \equiv S_\ell \rho_\ell. \quad (\text{C.11})$$

特異値 S_ℓ が指数関数よりも早く減衰することから、展開係数 G_ℓ も同等の速度で減衰する。松原周波数での表示は、

$$G(i\omega_n) = \sum_l G_\ell U_\ell(i\omega_n) \quad (\text{C.12})$$

である．ここで，特異関数の松原周波数依存性は以下である：

$$U_\ell(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau \, e^{i\omega_n \tau} U_\ell(\tau). \quad (\text{C.13})$$

付録 D

多軌道電子格子モデルの計算条件

D.1 自己エネルギーの初期値の設定

自己エネルギーはゲルマン行列を使って初期化する． $\Delta_{\eta\mu}$ は $|\Delta_{\eta\mu}| \leq 1$ を満たす実数の一様乱数であり， η, μ ごとに生成する． σ^μ はパウリ行列である ($\mu = 0, 1, 2, 3$).

- ・ 対角成分 (6×6)

$$\Sigma_{\text{diag}}^{(0)} = \sum_{\eta=013468} \sum_{\mu=0} \Delta_{\eta\mu} (\lambda^\eta \otimes \sigma^\mu) \quad (\text{D.1})$$

- ・ 非対角成分 (6×6)

$$\begin{aligned} \Sigma_{\text{nondiag}}^{(0)} = & \sum_{\eta=013468} \sum_{\mu=0} \Delta_{\eta\mu} (\lambda^\eta \otimes (\sigma^\mu \mathbf{i} \sigma^y)) \\ & + \sum_{\eta=257} \sum_{\mu=123} \Delta_{\eta\mu} (\lambda^\eta \otimes (\sigma^\mu \mathbf{i} \sigma^y)) \\ & + \sum_{\eta=013468} \sum_{\mu=123} \Delta_{\eta\mu} (\lambda^\eta \otimes (\sigma^\mu \mathbf{i} \sigma^y)) \\ & + \sum_{\eta=257} \sum_{\mu=0} \Delta_{\eta\mu} (\lambda^\eta \otimes (\sigma^\mu \mathbf{i} \sigma^y)) \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

電子の自己エネルギーの初期値は

$$\check{\Sigma}^{(0)} = \begin{pmatrix} \Sigma_{\text{diag}}^{(0)} & \Sigma_{\text{nondiag}}^{(0)} \\ \Sigma_{\text{nondiag}}^{(0)} & \Sigma_{\text{diag}}^{(0)} \end{pmatrix} \times r \quad (\text{D.3})$$

フォノン自己エネルギーは全て 0 に初期化している．

D.2 アニールンク

温度 T で自己無撞着計算をする際、それより少し高い温度 $T_{\text{pre}}(> T)$ での結果 Σ_{pre} を初期値に反映させる。混合は線形ミキシングを用いた。

$$\check{\Sigma}^{(0)}(i\omega_n) = \check{\Sigma}_{\text{pre}}(i\omega_n) + \check{\Sigma}^{(0)} \times r \quad (\text{D.4})$$

D.3 位相の固定

電子の自己エネルギーの異常部は位相の自由度を持つが、虚部が 0 になるように位相を固定している。

異常部の各成分に対して次の変換を行なっている。

$$z = |z|e^{i\theta} \xrightarrow{\times e^{-i\theta}} |z| \quad (\text{D.5})$$

電子の自己エネルギーの位相を固定するに伴い、電子グリーン関数の位相も同様に固定する。

$$G(i\omega) \rightarrow (G \text{ の位相固定}) \rightarrow G(\tau) \rightarrow \Sigma(\tau) \rightarrow \Sigma(i\omega) \rightarrow (\Sigma \text{ の位相固定}) \rightarrow G(i\omega)$$

D.4 ギャップ関数の多項式補間

ギャップ関数の値を得ることができるのはフェルミオンの松原点のみである。原点での値を得るために二次関数で補間している。

正の松原点を小さいものから 2 点とり、 ω_1, ω_2 とする。それぞれの点でのギャップ関数の値を Δ_1, Δ_2 とすると、原点でのギャップ関数の値は二次関数の補間によって次のように計算できる (ギャップ関数が松原周波数に対して原点対象であることを仮定し、 $\Delta = A\omega^2 + B$ として A, B を定める。)。

$$\Delta(0) = \frac{\omega_1^2 \Delta_2 - \omega_2^2 \Delta_1}{\omega_1^2 - \omega_2^2} \quad (\text{D.6})$$

研究業績

学術論文

1. **Hirone Ishida**, Natsuki Okada, Shintaro Hoshino, Hiroshi Shinaoka,
”Low-rank quantics tensor train representations for Feynman diagram of multi-orbital electron-phonon models”
arXiv: 2405.06440 (2024). (本稿は PRL に投稿済みで, 現在査読中.)

研究発表

国際会議

1. **Hirone Ishida**, Natsuki Okada, Shintaro Hoshino, Hiroshi Shinaoka,
”Low-rank quantics tensor train representations for Feynman diagram of multi-orbital electron-phonon models”
Trends in the Theory of Quantum Materials
(2024 年 6 月, 英語, ポスター発表)
2. **Hirone Ishida**, Natsuki Okada, Shintaro Hoshino, Hiroshi Shinaoka,
”Low-rank quantics tensor train representations for Feynman diagram of multi-orbital electron-phonon models”
Tensor4all
(2024 年 7 月, 英語, 口頭発表)
3. **Hirone Ishida**, Natsuki Okada, Shintaro Hoshino, Hiroshi Shinaoka,
”Low-rank quantics tensor train representations for Feynman diagram of multi-orbital electron-phonon models”
Current and Future Computational Approaches to Quantum Many-Body Systems 2024
(2024 年 9 月, 英語, ポスター発表)

国内学会

1. 石田洋音, 岡田夏希, 星野晋太郎, 品岡寛,
”Quantics Tensor Cross Interpolation を用いた量子不純物問題の数値摂動計算”
日本物理学会 2024 年春季大会
(2024 年 3 月, 日本語, 口頭発表).
2. 石田洋音, 岡田夏希, 星野晋太郎, 品岡寛,
”Low-rank quantics tensor train representations of Feynman diagrams of multi-orbital electron-phonon models”
日本物理学会第 79 回年次大会
(2024 年 9 月, 日本語, 口頭発表).

その他研究会・セミナー・学校

1. 石田洋音, 岡田夏希, 星野晋太郎, 品岡寛
”Quantics Tensor Cross Interpolation を用いた量子不純物問題の数値摂動計算”
第 68 回物性若手夏の学校
(2023 年 8 月, 日本語, ポスター発表).
2. 石田洋音, 岡田夏希, 星野晋太郎, 品岡寛
”Quantics Tensor Cross Interpolation を用いた量子不純物問題の数値摂動計算”
計算物理春の学校 2024
(2024 年 3 月, 日本語, ポスター発表).
3. 石田洋音, 岡田夏希, 星野晋太郎, 品岡寛
”Low-rank quantics tensor train representations of Feynman diagrams of multi-orbital electron-phonon models”
テンソルネットワーク 2024
(2024 年 11 月, 日本語, 口頭発表).

参考文献

- [1] Y. N. Fernández, M. Jeannin, P. T. Dumitrescu, T. Kloss, J. Kaye, O. Parcollet, and X. Waintal, [Physical Review X **12**, 041018 \(2022\)](#).
- [2] A. Erpenbeck, W.-T. Lin, T. Blommel, L. Zhang, S. Iskakov, L. Bernheimer, Y. Núñez-Fernández, G. Cohen, O. Parcollet, X. Waintal, and E. Gull, [Physical Review B **107**, 245135 \(2023\)](#).
- [3] H. Shinaoka, M. Wallerberger, Y. Murakami, K. Nogaki, R. Sakurai, P. Werner, and A. Kauch, [Physical Review X **13**, 021015 \(2023\)](#).
- [4] M. K. Ritter, Y. Núñez Fernández, M. Wallerberger, J. von Delft, H. Shinaoka, and X. Waintal, [Physical Review Letters **132**, 056501 \(2024\)](#).
- [5] P. Hohenberg and W. Kohn, [Physical review **136**, B864 \(1964\)](#).
- [6] W. Kohn and L. J. Sham, [Physical review **140**, A1133 \(1965\)](#).
- [7] V. L. Moruzzi, J. F. Janak, and A. R. Williams, [Calculated electronic properties of metals](#) (Elsevier, 2013).
- [8] M. Yin and M. L. Cohen, [Physical Review B **26**, 3259 \(1982\)](#).
- [9] L. J. Sham and M. Schlüter, [Physical review letters **51**, 1888 \(1983\)](#).
- [10] F. Aryasetiawan and O. Gunnarsson, [Reports on progress in Physics **61**, 237 \(1998\)](#).
- [11] N. F. Mott, [Proceedings of the Physical Society. Section A **62**, 416 \(1949\)](#).
- [12] N. F. Mott, [Reviews of Modern Physics **40**, 677 \(1968\)](#).
- [13] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, [Reviews of modern physics **70**, 1039 \(1998\)](#).
- [14] S. G. Stewart, [Reviews of Modern Physics **56**, 755 \(1984\)](#).
- [15] X. Long, S. Zhang, F. Wang, and Z. Liu, [npj Quantum Materials **5**, 50 \(2020\)](#).
- [16] J. Hubbard, [Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences **276**, 238 \(1963\)](#).
- [17] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, [Reviews of Modern](#)

- Physics **68**, 13 (1996).
- [18] A. Georges and G. Kotliar, [Physical Review B](#) **45**, 6479 (1992).
 - [19] O. Sakai and Y. Kuramoto, [Solid state communications](#) **89**, 307 (1994).
 - [20] M. Caffarel and W. Krauth, [Physical review letters](#) **72**, 1545 (1994).
 - [21] D. J. García, K. Hallberg, and M. J. Rozenberg, [Physical review letters](#) **93**, 246403 (2004).
 - [22] D. Bauernfeind, M. Zingl, R. Triebl, M. Aichhorn, and H. G. Evertz, [Physical Review X](#) **7**, 031013 (2017).
 - [23] X. Cao, Y. Lu, P. Hansmann, and M. Haverkort, [Physical Review B](#) **104**, 115119 (2021).
 - [24] A. N. Rubtsov, V. V. Savkin, and A. I. Lichtenstein, [Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics](#) **72**, 035122 (2005).
 - [25] P. Werner, A. Comanac, L. De’ Medici, M. Troyer, and A. J. Millis, [Physical Review Letters](#) **97**, 076405 (2006).
 - [26] E. Gull, A. J. Millis, A. I. Lichtenstein, A. N. Rubtsov, M. Troyer, and P. Werner, [Reviews of Modern Physics](#) **83**, 349 (2011).
 - [27] H. Shinaoka, Y. Nomura, S. Biermann, M. Troyer, and P. Werner, [Physical Review B](#) **92**.
 - [28] G. Pan and Z. Y. Meng, The sign problem in quantum monte carlo simulations, in [Encyclopedia of Condensed Matter Physics](#) (Elsevier, 2024) p. 879 – 893.
 - [29] C. T. Hann, E. Huffman, and S. Chandrasekharan, [Annals of Physics](#) **376**, 63 (2017).
 - [30] X. Zhang, G. Pan, X. Y. Xu, and Z. Y. Meng, [Physical Review B](#) **106**, 035121 (2022).
 - [31] R. Mondaini, S. Tarat, and R. T. Scalettar, [Science](#) **375**, 418 (2022).
 - [32] 横田達也, [テンソルデータ解析の基礎と応用](#) (コロナ社, 東京, 2024).
 - [33] E. Stoudenmire and D. J. Schwab, [Advances in neural information processing systems](#) **29** (2016).
 - [34] S. R. White, [Physical review letters](#) **69**, 2863 (1992).
 - [35] S. R. White, [Physical review B](#) **48**, 10345 (1993).
 - [36] S. Östlund and S. Rommer, [Physical review letters](#) **75**, 3537 (1995).
 - [37] S. Rommer and S. Östlund, [Physical review b](#) **55**, 2164 (1997).
 - [38] M. Levin and C. P. Nave, [Physical review letters](#) **99**, 120601 (2007).
 - [39] I. Oseledets, in [Doklady Mathematics](#), Vol. 80 (Springer, 2009) pp. 653–654.
 - [40] N. Gourianov, M. Lubasch, S. Dolgov, Q. Y. van den Berg, H. Babae, P. Givi,

- M. Kiffner, and D. Jaksch, [Nature Computational Science](#) **2**, 30 (2022).
- [41] I. V. Oseledets, [SIAM Journal on Scientific Computing](#) **33**, 2295 (2011).
- [42] H. Takahashi, R. Sakurai, and H. Shinaoka, [SciPost Physics](#) **18**, 007 (2025).
- [43] S. Rohshap, M. K. Ritter, H. Shinaoka, J. von Delft, M. Wallerberger, and A. Kauch, [arXiv preprint arXiv:2410.22975](#) (2024).
- [44] D. R. Hartree, in [Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society](#), Vol. 24 (Cambridge university press, 1928) pp. 89–110.
- [45] V. Fock, [Zeitschrift für Physik](#) **61**, 126 (1930).
- [46] J. C. Slater, [Physical Review](#) **35**, 210 (1930).
- [47] A. D. Becke, [Physical review A](#) **38**, 3098 (1988).
- [48] J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh, and C. Fiolhais, [Physical review B](#) **46**, 6671 (1992).
- [49] J. P. Perdew, J. Chevary, S. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. Singh, and C. Fiolhais, [Physical Review B](#) **48**, 4978 (1993).
- [50] P. W. Anderson, in [Journal of Physics: Conference Series](#), Vol. 449 (IOP Publishing, 2013) p. 012001.
- [51] P. Coleman, [arXiv preprint cond-mat/0612006](#) (2006).
- [52] X. Zhang, M. J. Rozenberg, and G. Kotliar, [Physical review letters](#) **70**, 1666 (1993).
- [53] E. R. Gagliano, E. Dagotto, A. Moreo, and F. C. Alcaraz, [Physical Review B](#) **34**, 1677 (1986).
- [54] H. Lin, J. Gubernatis, H. Gould, and J. Tobochnik, [Computers in Physics](#) **7**, 400 (1993).
- [55] A. Rubtsov and A. Lichtenstein, [Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters](#) **80**, 61 (2004).
- [56] P. Werner and A. J. Millis, [Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics](#) **74**, 155107 (2006).
- [57] S. Dolgov and R. Scheichl, [SIAM/ASA Journal on Uncertainty Quantification](#) **7**, 260 (2019).
- [58] B. N. Khoromskij, [Constructive Approximation](#) **34**, 257 (2011).
- [59] S. Dolgov and D. Savostyanov, [Computer Physics Communications](#) **246**, 106869 (2020).
- [60] Y. N. Fernández, M. K. Ritter, M. Jeannin, J.-W. Li, T. Kloss, T. Louvet, S. Terasaki, O. Parcollet, J. von Delft, H. Shinaoka, and W. Xavier, [arXiv preprint arXiv:2407.02454](#) (2024).

- [61] H. Ishida, N. Okada, S. Hoshino, and H. Shinaoka, [arXiv preprint arXiv:2405.06440](#) (2024).
- [62] A. Hebard, M. Rosseinsky, R. Haddon, D. Murphy, S. H. Glarum, T. Palstra, A. Ramirez, and A. Kortan, *Nature* **350**, [10.1038/350600a0](#) (1991).
- [63] T. Palstra, O. Zhou, Y. Iwasa, P. Sulewski, R. Fleming, and B. Zegarski, *Solid state communications* **93**, 327 (1995).
- [64] H. Shinaoka, J. Otsuki, M. Ohzeki, and K. Yoshimi, *Physical Review B* **96**, [035147](#) (2017).
- [65] M. Potthoff, [arXiv preprint cond-mat/0406671](#) (2004).