

テンソルくりこみ群を用いた相関関数の評価

著者	中本 智洋
著者別表示	Nakamoto Norihiro
雑誌名	博士論文本文Full
学位授与番号	13301甲第4474号
学位名	博士（理学）
学位授与年月日	2016-09-26
URL	http://hdl.handle.net/2297/46573



博 士 論 文

テンソルくりこみ群を用いた相関関数の評価

金沢大学大学院自然科学研究科
数物科学専攻

学籍番号	1223102003
氏名	中本 智洋
主任指導教員名	末松 大二郎
提出年月	2016年7月1日

目次

第1章 導入	4
第2章 くりこみ群とスケーリング則	6
2.1 くりこみ群	6
2.2 スケーリング則	8
2.2.1 相関関数のスケーリング則	10
第3章 テンソルくりこみ群 (TRG)	12
3.1 テンソルネットワーク表示	12
3.1.1 ドメインウォールを用いたテンソルネットワーク表示	13
3.1.2 高温展開を用いたテンソルネットワーク表示	14
3.2 テンソルの分解	15
3.2.1 特異値分解	16
3.3 自由度の縮約	17
3.4 テンソルくりこみ群	17
3.5 分配関数の計算 (ブルートフォース)	18
第4章 テンソルくりこみ群を用いた相関関数の計算手法	19
4.1 不純物テンソル	19
4.2 一点関数を求めるためのテンソルネットワークのくりこみ手順	20
4.3 二点関数を求めるためのテンソルネットワークのくりこみ手順	21
4.4 一点または二点関数の計算	22
第5章 数値計算結果	25
5.1 相関関数から相関長 ξ と臨界指数 η , 自発磁化 m を取り出す方法	25
5.2 相関長 ξ から臨界温度 T_c と臨界指数 ν を取り出す方法	27
5.3 自発磁化 m から臨界温度 T_c と臨界指数 β を取り出す方法	27
5.4 相関長と自発磁化のスケーリング領域の議論	28
第6章 まとめと展望	33
付録A テンソルネットワーク表示の発展	38
A.1 外部磁場ありの2次元 Ising 模型のテンソルネットワーク表示	38
A.2 2次元 XY 模型のテンソルネットワーク表示	38

A.2.1	外部磁場なしの XY 模型のテンソルネットワーク表示	39
A.2.2	外部磁場ありの XY 模型のテンソルネットワーク表示	39
A.2.3	外部磁場ありの XY 模型の不純物テンソルを含むテンソルネットワーク表示 (エネルギー計算)	40
付録 B	テンソルネットワークくりこみ (TNR) 関連	43
B.1	テンソルネットワークくりこみ (TNR)	43
B.1.1	テンソルネットワークくりこみ (TNR)	43
B.1.2	テンソル B, C の生成	44
B.1.3	テンソル B, C の分解	44
B.1.4	自由度の縮約	44
B.1.5	テンソル B, C の分解と自由度の縮約の改良	45
B.2	TNR の最適化	45
B.3	軸対称なテンソルネットワーク (P 変換可能なテンソルネットワーク)	46
B.3.1	Ising 模型	47
B.3.2	XY 模型	47
付録 C	平均場理論による相関関数	50
C.1	Landau 理論	50
C.2	相関関数	52
付録 D	2次元 Ising 模型の厳密解について	56
D.1	クラマース=ワニア双対性	56
D.1.1	クラマース=ワニア双対性の導出	57
D.2	オンサーガー (Onsager) の解析	59
D.2.1	2次元 Ising 模型の厳密解の解法の説明と結果	59
D.2.2	1次元 Ising 模型の厳密解の解法	60
D.3	2点相関関数	61
付録 E	TRG と TNR の数値計算結果の比較	63
E.1	2次元 Ising 模型の数値結果	63
E.1.1	物理量の導出	63
E.1.2	条件	64
E.1.3	数値微分の誤差	64
E.1.4	TRG と TNR の計算結果	64
E.2	固定点テンソルの解析	71

第1章 導入

テンソルくりこみ群 (TRG) とは 2007 年に Levin 氏と Nave 氏 [1] が三角格子上の Ising 模型で提案した数値くりこみ群の手法である。その後、多くの研究者が 2 次元系の ϕ^4 理論 [2]、Schwinger 模型 [3, 4]、有限フェルミオン密度系 [5] などの数多くの模型に TRG を適用させてきた。また、解析分野では青木氏ら [6] が 2 次元正方格子上の Ising 模型で臨界温度と臨界指数 ν を高い精度で再現できる研究結果を報告した。しかし、この手法は 2 次元系に限定された解析手法であり、新たに開発された高次元系に適した粗視化方法 [7] を用いた TRG には適用できない。この新しい TRG の手法は高次特異値分解 (higher order singular value decomposition) を用いるため、高次テンソルくりこみ群 (HOTRG) と呼ばれる。この手法はすでに 3 次元 Ising 模型に適用され、臨界温度を高い精度で再現できる研究結果が報告されている [8]。さらに 2 次元系の XY 模型 [9] や O(3) 模型 [10] や CP(1) 模型 [11] にも適用されている。

TRG は粗視化の中で特異値分解 (SVD) を用い、特異値の自由度の切り捨てを制御する bond dimension (D_{cut}) を設定し、くりこみを実行する手法である。この TRG の長所はくりこみをくり返すごとに指数関数的に格子体積を増大させることができることである。実際に臨界点近傍外では TRG と HOTRG は非常に高い精度の結果を再現できることが知られている。しかし、臨界温度近傍は高い精度を維持するためにより大きな D_{cut} を要求され、計算コストや使用メモリーの増大が問題となる。この問題を解決するために Tensor network renormalization (TNR)[12] と Loop optimization for tensor network renormalization (Loop-TNR)[13] が最近開発された。これらの手法は entanglement を切るようにテンソルネットワークを再構築することで、TRG よりも情報の損失が小さいくりこみを実行することができる。それはくりこみを実行しても SVD の階層を維持することができ、同じ誤差のオーダーでくりこみを実行できるからである。また、その特性のために要求される D_{cut} を小さくすることができる。

次に、どのように正確に力学的な情報を得ることができるかという重要な問題がある。比熱や帯磁率から力学的な情報である臨界指数や臨界温度を抽出する従来の方法では、比熱や帯磁率を算出するためには分配関数を温度や外部磁場で二階数値微分が要求される。しかし、数値微分を実行するごとに有効桁を損失し、正確な比熱や帯磁率を得るためには大きい D_{cut} が要求される。また、帯磁率を得るためには外部磁場のような追加パラメータをハミルトニアンの中に導入する必要があり、解析を難しくする傾向がある。さらに、これらの従来の方法では D_{cut} に強く依存した臨界温度が得られるために正しい臨界温度を求めることができなかつた。一方、本論文で扱う数値微分や追加パラメータを必要としないで相関関数を得ることがで

きる TRG の手法は不純物テンソルというテンソルの取扱いを考慮することだけを要求し、通常の TRG の手法と同じオーダーのコストで計算できる。そのため、我々はより正確に力学的な情報を得るためには相関関数を計算する必要があると考えた。この方法は 2008 年に Gu 氏, Levin 氏, Wen 氏 [14] によって提案されたものだが、最も基礎的な 2 次元 Ising 模型でも実装されていなかった。そのため、今回の相関関数から臨界温度と臨界指数を抽出することは非自明な仕事である。従って、本研究では詳細にこの模型でのスピンの二点相関関数の計算を検証し、ベンチマークテストとして相関関数から臨界温度と臨界指数をどれぐらいの精度で再現できるかを調査する。すなわち、この手法が TRG の手法の有効性を高めることができるかを実証することがこの研究の目的である。

本論文の構成は次に示す。2 章ではくりこみ群とスケールリング則を説明する。3 章では Ising 模型のテンソルネットワーク表示の定式化を説明する。4 章では分配関数を求めるための基本的なテンソルくりこみ群の手順を説明する。5 章では相関関数を求めるための不純物テンソルを含むテンソルくりこみ群 (IMTRG) の手順を説明する。6 章では 5 章で説明した IMTRG による数値計算の結果を示す。7 章ではまとめを述べる。また、補足として、本研究をする糧となった外部磁場入りのテンソルネットワーク表示の定式化や XY 模型や TNR についてを説明する。

第2章 くりこみ群とスケーリング則

この章ではくりこみ群とスケーリング則を説明する [19]。くりこみ群とは系を粗視化し、粗視化しても失わない系の本質を取り出す手法のことである。実際には粗視化というくりこみ変換を実行し、系の長いスケールのスピン変数のゆらぎを取り入れて、臨界現象を定量的に解析する。このくりこみ変換と臨界指数の間にはスケーリング則という関係があり、くりこみ変換を実行した系の物理量から臨界指数を抽出できる。くりこみ群では臨界指数は系の構造に依らずに次元や対称性、相互作用などに依存している。そのため、臨界指数は系の特徴を示す指標となる。特に2次相転移の臨界点近傍では、物理量 P の振る舞いは臨界指数 μ を用いると次のように表されることが知られている。

$$P \propto t^\mu \quad (2.1)$$

ここでの $t = |T - T_c|/T_c$ である。

1節では、くりこみ群のくりこみ変換を実行することでくりこまれた系にどのような影響を与えるかを説明する。2節では、スケーリング則と呼ばれるくりこみ変換と臨界指数の関係を説明する。

2.1 くりこみ群

くりこみ群の例として、図 2.1 のように格子上にスピン s を配置し、最近接相互作用している系を考える。この系のハミルトニアン H と分配関数 Z を次のように定義する。

$$H = -\beta \sum_{\langle a,b \rangle} s_a s_b - h \sum_i s_i \quad (2.2)$$

$$Z(H) = \sum_{\{s\}} e^{-H} \quad (2.3)$$

ここでのスピン s の自由度は特に指定はしない。分配関数を計算するには、スピン和を取る必要がある。しかし、通常はすべてのスピン和を取ることは困難である。そのため、図 2.1 のように赤丸のスピン和だけを取ると白丸のスピンだけが残り、白丸のスピン同士だけが相互作用している系に変換されている。この変換を次のように表すことができる。

$$Z_N(H) = \sum_{\{s_1\}} \sum_{\{s_2\}} e^{-H} = \sum_{\{s_1\}} e^{-H'} = Z_{N'}(H') \quad (2.4)$$

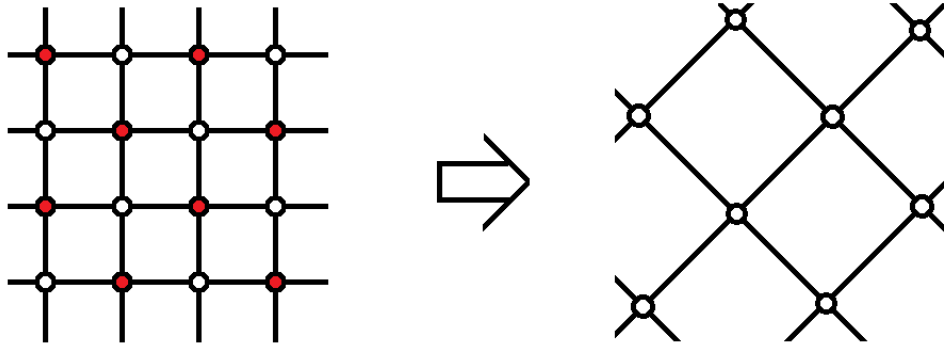


図 2.1: くりこみ群の例：赤丸のスピンの和を取ると白丸のスピンのみだけが残る系に変換される。

ここでの s_1, s_2 は白丸と赤丸のスピンを表し、 N は格子上に存在するスピンの数、 N', H' は変換後の格子上に存在するスピンの数とハミルトニアンを表している。外部磁場なしの Ising 模型の場合、変換後のハミルトニアン H' は次のように表される。

$$H' = g^{(2)} \sum_{\langle a,b \rangle} s_a s_b + g^{(3)} \sum_{K^{(2)}} s_i s_j + g^{(4)} \sum_{K^{(4)}} s_x s_y s_z s_w \quad (2.5)$$

ここでの $K^{(2)}$ は次近接のスピンの組、 $K^{(4)}$ は単位正方格子の 4 つのスピンの組み合わせを表す。

このハミルトニアンは次のように導出できる。まず、赤丸のスピンの s_a, s_b, s_c, s_d と白丸のスピンの s_x を用意し、赤丸のスピンの和を取る左式と $s_a^2 = 1$ の対称性から次の右式のように表せ、それぞれが等価であることがわかる。この連立方程式を解くと $J^{(2)}, J^{(4)}$ を次のように導くことができる。

$$\sum_{s_x = \pm 1} e^{\beta s_x (s_a + s_b + s_c + s_d)} = A e^{J^{(2)}(s_a s_b + s_b s_c + s_c s_d + s_d s_a + s_a s_c + s_b s_d) + J^{(4)} s_a s_b s_c s_d} \quad (2.6)$$

$$J^{(2)} = \frac{1}{8} \ln \cosh(4\beta) \quad (2.7)$$

$$J^{(4)} = \frac{1}{8} \ln \cosh(4\beta) - \frac{1}{2} \ln \cosh(2\beta) \quad (2.8)$$

$$A = 2 (\cosh(4\beta))^{1/8} (\cosh(2\beta))^{1/2} \quad (2.9)$$

これらを用いて、相互作用 $g^{(2)}, g^{(3)}, g^{(4)}$ は次のように表される。

$$g^{(2)} = 2\frac{1}{8} \ln \cosh(4\beta) \quad (2.10)$$

$$g^{(3)} = \frac{1}{8} \ln \cosh(4\beta) \quad (2.11)$$

$$g^{(4)} = \frac{1}{8} \ln \cosh(4\beta) - \frac{1}{2} \ln \cosh(2\beta) \quad (2.12)$$

変換後の格子間隔 $a^{(1)}$ は変換前 $a^{(0)} = 1$ から変換後 $a^{(1)} = \sqrt{2}$ に変化する。通常、規格化し、格子間隔 $a'^{(1)} = a^{(1)}/b = 1, b = \sqrt{2}$ と再定義する。 n 回くりこみを実行すると格子間隔は $a^{(n)} = b^n$ となり、短いスケールでのスピン変数のゆらぎを無視し、長いスケールでのスピン変数のゆらぎの効果を顕著になる。これにより、臨界現象でのゆらぎの役割を定量的に明らかにすることができる。なお、臨界点直上では、非常に長いスケールでのスピン変数のゆらぎの効果が大きいため、何度くりこみを実行しても系には影響を与えない。このくりこみを実行した末に行き着く点を固定点という。

2.2 スケーリング則

くりこみ変換と臨界指数の関係づけるスケーリング則についてを説明する。

まず、一回のくりこみ変換での各量のスケールの変化を考える。分配関数のくりこみ変換では次のように分配関数が表される。

$$Z_{N'}(H') = Z_N(H) \quad (2.13)$$

ハミルトニアンは複雑な非線形変換 R を用いて、次のように表す。

$$H' = R(H) \quad (2.14)$$

ここで固定点でのハミルトニアン H_f と臨界点でのハミルトニアン H_c について説明すると次のような関係が成り立っている。

$$H_f = R(H_f) \quad (2.15)$$

$$H_f = \lim_{n \rightarrow \infty} R^n(H_c) \quad (2.16)$$

次に、長さ r 、波長 q 、格子数 N の変換は次のように表される。

$$r' = b^{-1}r, \quad q' = bq, \quad N' = b^{-d}N \quad (2.17)$$

また、体積あたりの自由度は次のように表せる。

$$\ln(Z_{N'}(H')) = \ln(Z_N(H)) \quad (2.18)$$

$$f(H') = \ln(Z_{N'}(H'))/N' \quad (2.19)$$

$$f(H) = \ln(Z_N(H))/N \quad (2.20)$$

$$f(H') = b^d f(H) \quad (2.21)$$

なお、式 (2.21) の b の指数をスケーリング次元という。

ハミルトニアン H はくりこみを実行すると式 (2.5) の H' ように複数の相互作用が生じる。当然、この H' で再びくりこみを実行するとより複雑な相互作用項が発生する。そのため、次のような行列を用いて、くりこみ変換を考える。

$$H = u \cdot O, \quad H' = u' \cdot O' \quad (2.22)$$

ここでの u, u' は相互作用に相当する無次元のパラメーターの組を表し、 O, O' はスピン項 $s_a s_b \dots$ に相当するスピン変数の組を表している。スピン項に相当する O の変換則は明らかであるため、 u の変換則を整理していく。 u, u' の変換は次のように表される。

$$u' = R(u) \quad (2.23)$$

そして、臨界点近傍での変換を特に見るために、次のように固定点 u^* を用いて u, u' を表せる。

$$u = u^* + \delta u, \quad u' = u^* + \delta u', \quad u^* = R(u^*) \quad (2.24)$$

次に近似的に式 (2.23) を次のように書き換える。

$$u^* + \delta u' = R(u^*) + \delta u \quad (2.25)$$

$$= u^* + T(u^*)\delta u + O(\delta u^2) \quad (2.26)$$

$$\delta u' \simeq T(u^*)\delta u \quad (2.27)$$

ここでの T は線形変換を表している。この線形変換 T の固有値 λ と固有ベクトルが臨界現象の振る舞いを決定する重要なパラメーターであると考えて、 $\delta u, \delta u'$ は T の固有ベクトルの組 ϕ_i で展開すると次のように表せる。

$$u = u^* + \sum_i g_i \phi_i, \quad u' = u^* + \sum_i g'_i \phi_i \quad (2.28)$$

ここでの $g'_i = b^{y_i} g_i, \lambda_i = b^{y_i}$ の関係があり、 g_i はスケーリング場と呼ばれ、固定点付近のパラメーター空間 u の特徴を決定づける量である。このようにくりこみ群による変換を固定点まわりの線形変換 T の固有値の指数 y_i とスケーリング場 g_i で表すことができる。また、 $y_i < 0$ の場合ではくりこむごとに固有値がゼロに近づくため、その y_i に対応するスケーリング場 g_i は有意でない変数と呼び、その変数は系に対して何の影響を与えない。 $y_i > 0$ の場合では有意な変数と呼び、系に対して影響を与える変数である。同様に、 $y_i = 0$ の場合、中立変数と呼ぶ。

これらのパラメーターが臨界指数との関係を説明する。まず、式 (2.21) の自由エネルギーを次のように書き換える。

$$f(t, h) = b^{-d} f(b^{y_t} t, b^{y_h} h) \quad (2.29)$$

ここで、臨界点からのずれ t と外部磁場 h はスケーリング場 g_i に対応しており、 t, h 以外のスケーリング場は有意でない変数として無視している。この変換を n 回くりかえすと次のように表すことができる。

$$f(t, h) = b^{-nd} f(b^{ny_t} t, b^{ny_h} h) \quad (2.30)$$

ここで、 $b^{ny_t} t = 1$ になるような n を選ぶと次のように変換することができる。

$$f(t, h) = t^{d/y_t} f(1, ht^{-y_h/y_t}) = t^{d/y_t} B(ht^{-y_h/y_t}) \quad (2.31)$$

ここでの B は ht^{-y_h/y_t} に依存する関数である。この上式のような関係をスケーリング則という。

この自由エネルギーから比熱 C 、磁化 m 、帯磁率 χ を求めるとそれぞれの臨界指数と y_t, y_h の関係が見ることができる。まず、外部磁場なしの比熱 C は次のように計算され、臨界指数 $\alpha = d/y_t - 2$ が得られる。

$$C(t, 0) \propto \frac{\partial^2}{\partial t^2} f(t, 0) \propto t^{d/y_t - 2} = t^\alpha \quad (2.32)$$

次に、磁化 m は次のように計算され、臨界指数 $\beta = (d - y_h)/y_t$ が得られる。

$$m(t, 0) \propto \frac{\partial}{\partial h} f(t, h)|_{h=0} \propto t^{(d-y_h)/y_t} = t^\beta \quad (2.33)$$

さらに、帯磁率 χ は次のように計算され、臨界指数 $\gamma = (d - 2y_h)/y_t$ が得られる。

$$\chi(t, 0) \propto \frac{\partial^2}{\partial h^2} f(t, h)|_{h=0} \propto t^{(d-2y_h)/y_t} = t^\gamma \quad (2.34)$$

臨界点直上 $t = 0$ の臨界指数 δ を得るために、 $b^{ny_h} h = 1$ と置き、 $b^{ny_t} t = 1$ の時と同様に計算すると、臨界指数 $\delta = d/y_h - 1$ が得られる。

$$m(0, h) \propto \frac{\partial}{\partial h} f(0, h) = b^{-n(d-y_h)} B'(b^{ny_h} h) \propto h^{d/y_h - 1} = h^\delta \quad (2.35)$$

この4つの臨界指数は二つの変数より求めたため、次のような関係式にまとめることができる。この関係式をスケーリング関係式という。

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2, \quad \gamma = \beta(\delta - 1) \quad (2.36)$$

2.2.1 相関関数のスケーリング則

これまで自由エネルギーから臨界指数 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ を y_t, y_h で表した。今度は相関関数 G_s の臨界指数 ν, η を y_t, y_h で表す。

まず、スピン変数 s の変換則を1回のくりこみ変換を実行した式 (2.29) から次のように表せる。

$$m(b^{y_t} t) = b^{d-y_h} m(t) \quad (2.37)$$

磁化 $m = \langle s \rangle$ より、相関関数 $G_s(r) = \langle s_r s_0 \rangle - \langle s \rangle^2$ の変換則は次のように表せる。

$$G(b^{-1}r, b^{y_t}t) = b^{2(d-y_h)}G(r, t) \quad (2.38)$$

上式を用いて、くりこみ変換を n 回実行し、 $b^{ny_t} = 1$ とすると次のように表せる。

$$G(r, t) = t^{2(d-y_h)/y_t} B^{(2)}(rt^{1/y_t}) \quad , T \neq T_c \quad (2.39)$$

ここでの $B^{(2)}$ は rt^{1/y_t} に依存する関数である。 $r \gg t$ では、相関関数 $G_s(r)$ は $e^{-r/\xi}$ のように指数減衰することが知られている。また、相関長 $\xi = t^\nu$ であると考えるとき、式 (2.39) と比較すると $r/\xi = rt^\nu$ と rt^{1/y_t} はそれぞれ $t^\nu, t^{1/y_t}$ の定数倍であり、 $B^{(2)}(x)$ と $\exp(-x)$ が同じ関数形であるためには $\nu = 1/y_t$ である必要がある。

次に臨界点直上 $t = 0$ では、相関関数 $G_s(r)$ は $r^{-d+2-\eta}$ で減衰することが知られている。式 (2.38) を用いて、くりこみ変換を n 回実行し、 $b^{-nr} = 1$ とすると、次のように表せる。

$$G(r, 0) = b^{-2n(d-y_h)}G(b^{-nr}, 0) \quad (2.40)$$

$$G(r, 0) = r^{-2(d-y_h)}G(1, 0) \quad (2.41)$$

$$G(r, 0) \propto r^{-2(d-y_h)} \quad (2.42)$$

よって、 $\eta = d - 2y_h + 2$ となる。

以上の相関関数から得た臨界指数 ν, η より、次のような関係式が得られる。この関係式をハイパー・スケーリングという。

$$\alpha = 2 - d\nu \quad (2.43)$$

$$\beta = \nu(d - 2 + \eta)/2 \quad (2.44)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad (2.45)$$

$$\delta = \frac{d + 2 - \eta}{d - 2 + \eta} \quad (2.46)$$

この関係式を用いることで、複数の臨界指数を求めるだけで他の臨界指数を求めることができ、臨界点近傍の振る舞いを調べることができる。

第3章 テンソルくりこみ群 (TRG)

この章では、2次元 Ising 模型の基礎的な TRG の手法についてを説明する。TRG とは文字通り複数のテンソルをくりこみ、一つの新しいテンソルにする手法である。くりこみを開始する初期テンソルは分配関数に基づき書き換えられたテンソルであり、異なる模型ごとにテンソルのサイズや中身が異なる。このようにテンソルで分配関数を表現することをテンソルネットワーク表示という。このテンソルを基にテンソルの分解と自由度の縮約を行い、複数のテンソルを一つの新しいテンソルにまとめる。このテンソルの分解は特異値分解 (SVD) を用い、一つのテンソルを厳密にあるいは近似的に二つのテンソルに分解する。この時に生成される二つのテンソルが持つ新しい自由度を粗視化された新しいテンソルの自由度とみなし、すべての古い自由度を縮約すると粗視化された新しいテンソルを作り出される。このようにテンソルの分解と自由度の縮約を行う一連の手順をテンソルくりこみという。そして、テンソルネットワーク表示に基づきテンソルの自由度の足しあげを行うことで分配関数を求めることができる。さらによりくりこみの回数を増やすことによって、大きな体積の分配関数を求めることができる。

1 節では、2次元 Ising 模型のテンソルネットワーク表示の導出を紹介する。2 節では、特異値分解 (SVD) に用いたテンソルの分解を説明する。3 節では、テンソルの自由度の縮約を説明する。そして、4 節では、テンソルの分解と自由度の縮約を用いて、テンソルくりこみ群の一連の手順を説明する。最後に、5 節では、テンソルの自由度を足しあげを行い、分配関数を求める方法を説明する。

3.1 テンソルネットワーク表示

2次元 Ising model の分配関数 Z とハミルトニアン H を次のように定義する。

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-\beta H} \quad (3.1)$$

$$H = - \sum_{\langle a,b \rangle} s_a s_b \quad (3.2)$$

ここで、 β は温度の逆数、 $s_a \in \{-1, +1\}$ は座標 a のスピン変数、最近接格子の組み合わせ (a, b) をすべて取っている。このスピン自由度で書かれた分配関数を二つの方法でテンソルネットワーク表示に書き換えることを考える。

3.1.1 ドメインウォールを用いたテンソルネットワーク表示

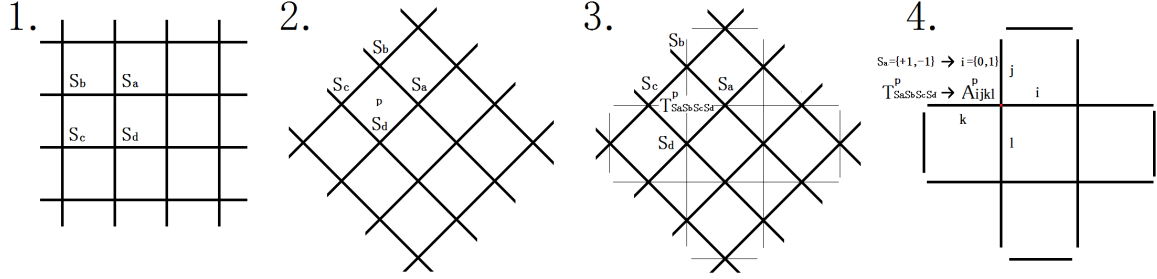


図 3.1: スピン自由度を持つ分配関数からテンソルネットワーク表示の分配関数への過程: 図 3.1-1 はスピン変数を持つ格子を表している。図 3.1-2 では Spin 自由度を持つ全格子を 45° 回転させている。図 3.1-3 はスピン変数 s_a, s_b, s_c, s_d とテンソル $T_{s_a s_b s_c s_d}^p$ の関係を表している。図 3.1-4 は格子点 1 点にオリジナルテンソル A_{ijkl}^p が 1 つだけ持っている格子を表している。

このテンソルネットワーク表示は図 3.1 のように格子を 45° 回転させ、サークル上の並んでいる 4 点のスピン自由度をまとめて 1 つのテンソルとして再定義したテンソルネットワーク表示 [15] である。 p は座標点であるが $a - b - c - d$ のサークル上に並んでいる 4 点を 1 点にまとめ、それぞれが bond を共有しないようにしている座標点である。

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{\sum_{\langle a,b \rangle} \beta s_a s_b} \quad (3.3)$$

$$= \sum_{\{s\}} \prod_{\langle a,b \rangle} e^{\beta s_a s_b} \quad (3.4)$$

$$= \sum_{\{s\}} \prod_{p(a,b,c,d)} e^{\beta(s_a s_b + s_b s_c + s_c s_d + s_d s_a)} \quad (3.5)$$

$$= \sum_{\{s\}} \prod_{p(i,j,k,l)} T_{s_a s_b s_c s_d}^p \quad (3.6)$$

$$T_{s_a s_b s_c s_d}^p = e^{\beta(s_a s_b + s_b s_c + s_c s_d + s_d s_a)} \quad (3.7)$$

テンソル $T_{s_a s_b s_c s_d}^p$ の添字である s_a を新しい自由度を持つ添字 i と再定義し、新しいテンソル A_{ijkl}^p を再定義する。なお、 $T_{s_a s_b s_c s_d}^p$ の a, b, c, d は座標点であるが、 A_{ijkl}^p の i, j, k, l は座標点ではなく、値 0, 1 を持つ新しい自由度である。

$$S_n = \{+1, -1\} \rightarrow n = \{0, 1\}, \quad T_{s_i s_j s_k s_l}^p \equiv A_{ijkl}^p \quad (3.8)$$

$$Z = \sum_{\{s\}} \prod_{p(a,b,c,d)} T_{s_a s_b s_c s_d}^p \equiv \sum_{\{i,j,k,l\}} \prod_p A_{ijkl}^p \quad (3.9)$$

テンソル A の成分は次のように表すことができる。

$$A = \begin{pmatrix} A_{0000} & A_{0010} & A_{0100} & A_{0110} \\ A_{0001} & A_{0101} & A_{0011} & A_{0111} \\ A_{1000} & A_{1100} & A_{1010} & A_{1110} \\ A_{1001} & A_{1011} & A_{1101} & A_{1111} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{4\beta} & 1 & 1 & 1 \\ 1 & e^{-4\beta} & 1 & 1 \\ 1 & 1 & e^{-4\beta} & 1 \\ 1 & 1 & 1 & e^{4\beta} \end{pmatrix}$$

3.1.2 高温展開を用いたテンソルネットワーク表示

このテンソルネットワーク表示 [16] は高温展開を用い、スピンの自由度とは別の新しい自由度を生成し、その代わりにすべてのスピンの自由度を総和し、新しい自由度だけを残すことによって得られる。具体的には次のように導出される。

$$Z = \sum_{\{s\}} \prod_{\langle a,b \rangle} e^{\beta s_a s_b} \quad (3.10)$$

$$= \sum_{\{s\}} \prod_{\langle a,b \rangle} (\cosh(\beta) + \sinh(\beta) s_a s_b) \quad (3.11)$$

上式において、高温展開を用いて、スピン変数 s_a を \exp の肩から取り出している。次にスピン和を実行することができて、テンソルネットワーク表示が得られる。

$$Z = \sum_{\{s\}} \prod_{\langle a,b \rangle} e^{\beta s_a s_b} \quad (3.12)$$

$$= \sum_{\{s\}} \prod_{\langle a,b \rangle} \cosh(\beta) (1 + \tanh(\beta) s_a s_b) \quad (3.13)$$

$$= \sum_{\{s\}} \prod_{\langle a,b \rangle} \cosh(\beta) \sum_{n_{ab}=0,1} (\tanh(\beta) s_a s_b)^{n_{ab}} \quad (3.14)$$

$$= \cosh(\beta)^{2V} \sum_{\{s\}} \prod_{\langle a,b \rangle} \sum_{n_{ab}=0,1} (\tanh(\beta) s_a s_b)^{n_{ab}} \quad (3.15)$$

$$= \cosh(\beta)^{2V} \sum_{\{s\}} \times \left(\sum_{n_{pi}=0,1} (\tanh(\beta) s_p s_i)^{n_{pi}} \right) \left(\sum_{n_{pj}=0,1} (\tanh(\beta) s_p s_j)^{n_{pj}} \right) \times \left(\sum_{n_{pk}=0,1} (\tanh(\beta) s_p s_k)^{n_{pk}} \right) \left(\sum_{n_{pl}=0,1} (\tanh(\beta) s_p s_l)^{n_{pl}} \right) \cdots \quad (3.16)$$

ある点 p のスピン変数 S_p を中心にその最近接格子の4つのスピン変数 S_a, S_b, S_c, S_d が作用している項をあらわに書き出した。

$$Z = \cosh(\beta)^{2V} \sum_{\{s\}} \sum_{\{n\}} \prod_p \tanh(\beta)^{\frac{1}{2}(n_{pi}+n_{pj}+n_{pk}+n_{pl})} S_p^{n_{pi}+n_{pj}+n_{pk}+n_{pl}} \quad (3.17)$$

$$= \cosh(\beta)^{2V} \sum_{\{n\}} \prod_p \sum_{s_p=\pm 1} \tanh(\beta)^{\frac{1}{2}(n_{pi}+n_{pj}+n_{pk}+n_{pl})} S_p^{n_{pi}+n_{pj}+n_{pk}+n_{pl}} \quad (3.18)$$

$$= \cosh(\beta)^{2V} \sum_{\{n\}} \prod_p \tanh(\beta)^{\frac{1}{2}(n_{pi}+n_{pj}+n_{pk}+n_{pl})} (1 + (-1)^{n_{pi}+n_{pj}+n_{pk}+n_{pl}}) \quad (3.19)$$

$$= 2^V \cosh(\beta)^{2V} \sum_{\{n\}} \prod_p \tanh(\beta)^{\frac{1}{2}(n_{pi}+n_{pj}+n_{pk}+n_{pl})} \delta_{\text{mod}(n_{pi}+n_{pj}+n_{pk}+n_{pl}, 2), 0} \quad (3.20)$$

$$= 2^V \cosh(\beta)^{2V} \sum_{\{n\}} \prod_p A_{n_{pi}n_{pj}n_{pk}n_{pl}}^p \quad (3.20)$$

$$A_{ijkl}^p = \tanh(\beta)^{\frac{1}{2}(i+j+k+l)} \delta_{\text{mod}(i+j+k+l, 2), 0} \quad (3.21)$$

テンソル A の成分は次のように表すことができる。

$$A = \begin{pmatrix} A_{0000} & A_{0010} & A_{0100} & A_{0110} \\ A_{0001} & A_{0101} & A_{0011} & A_{0111} \\ A_{1000} & A_{1100} & A_{1010} & A_{1110} \\ A_{1001} & A_{1011} & A_{1101} & A_{1111} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \tanh(\beta) \\ 0 & \tanh(\beta) & \tanh(\beta) & 0 \\ 0 & \tanh(\beta) & \tanh(\beta) & 0 \\ \tanh(\beta) & 0 & 0 & \tanh^2(\beta) \end{pmatrix}$$

3.2 テンソルの分解

図 (3.2)-a と図 (3.3)-1to2 で図示されている分解は後述する特異値分解とよばれる行列分解を行っている。下記の式はテンソル A_{ijkl} を添字の組み合わせが異なる2種類の特異値分解している式になる。まず、テンソル A_{ijkl} の添字を2つにまとめた行列 M_{ab} である。そして、その行列 M_{ab} を特異値分解を実行すると次のようになる。

$$M_{ab} = U_{ac} \Sigma_c V_{cb}^\dagger \quad (3.22)$$

ただし、 U, V はユニタリ行列であり、 Σ は対角成分以外は0を持つ行列である。そのために対角成分 Σ_c だけを用いている。最後に図 (3.2)-a のように表せるテンソル S を用いて、整理する。

$$A_{ijkl} = M_{(i \otimes j)(k \otimes l)} = U_{(i \otimes j)n} \Sigma_n V_{n(k \otimes l)}^\dagger = S_{ijn}^1 S_{kln}^3 \quad (3.23)$$

$$S_{ijn}^1 = U_{(i \otimes j)n} \sqrt{\Sigma_n}, \quad S_{kln}^3 = \sqrt{\Sigma_n} V_{n(k \otimes l)}^\dagger \quad (3.24)$$

$$A_{ijkl} = \tilde{M}_{(j \otimes k)(l \otimes i)} = \tilde{U}_{(j \otimes k)n} \Sigma_n \tilde{V}_{n(l \otimes i)}^\dagger = S_{jkn}^2 S_{lin}^4 \quad (3.25)$$

$$S_{jkn}^3 = \tilde{U}_{(j \otimes k)n} \sqrt{\Sigma_n}, \quad S_{lin}^4 = \sqrt{\Sigma_n} \tilde{V}_{n(l \otimes i)}^\dagger \quad (3.26)$$

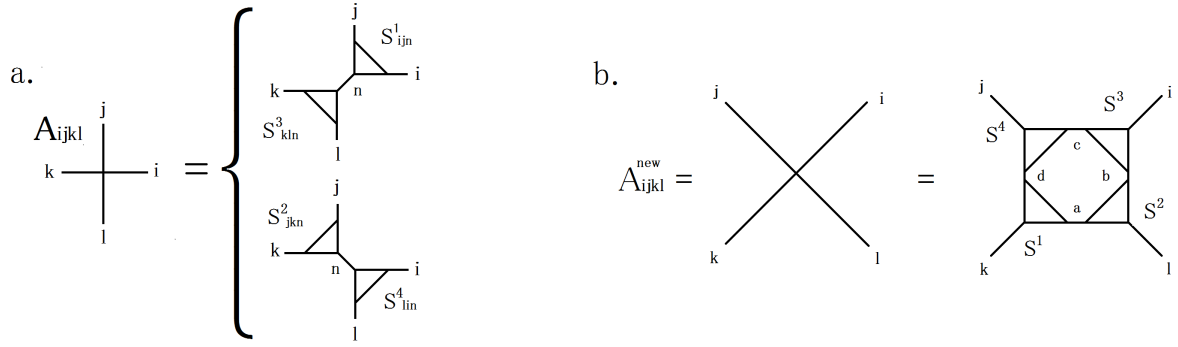


図 3.2: TRG の分解と縮約

3.2.1 特異値分解

ある行列 M を特異値分解と呼ばれる行列変換を行い、左特異値ベクトルと右特異値ベクトルを導出する。

まず、行列 M を特異値分解すると次のように表される。

$$M_{mn} = U_{mk} \Sigma_k V_{kn}^\dagger \quad (3.27)$$

$$V_{kn}^\dagger V_{np} = V_{kn} V_{np}^\dagger = \delta_{kp} \quad (3.28)$$

$$U_{kn}^\dagger U_{np} = U_{kn} U_{np}^\dagger = \delta_{kp} \quad (3.29)$$

ここでの U, V はユニタリー行列であり、行列 Σ は対角成分以外はゼロであり、対角成分は左上から右下に進むほど値が小さくなる行列である。そして、次の条件を満たす場合に行列 Σ は行列 M の特異値であり、その時のベクトル U_{mk_1}, V_{mk_2} はそれぞれ特異値 Σ の左特異ベクトル、右特異ベクトルと言われる。

$$M_{mn} V_{np} = \Sigma_p U_{mp} \quad (3.30)$$

$$M_{mn}^\dagger U_{np} = \Sigma_p V_{mp} \quad (3.31)$$

上式の一つを満たすことを次のように証明することができる。

$$M_{mn} = U_{mk} \Sigma_k V_{kn}^\dagger \quad (3.32)$$

$$M_{mn} V_{np} = U_{mk} \Sigma_k V_{kn}^\dagger V_{np} \quad (3.33)$$

$$M_{mn} V_{np} = U_{mk} \Sigma_k \delta_{kp} \quad (3.34)$$

$$M_{mn} V_{np} = \Sigma_p U_{mp} \quad (3.35)$$

同様に二つ目を次のように証明することができる。

$$M_{mn} = U_{mk} \Sigma_k V_{kn}^\dagger \quad (3.36)$$

$$U_{pm}^\dagger M_{mn} = U_{pm}^\dagger U_{mk} \Sigma_k V_{kn}^\dagger \quad (3.37)$$

$$U_{pm}^\dagger M_{mn} = \delta_{pk} \Sigma_k V_{kn}^\dagger \quad (3.38)$$

$$U_{pm}^\dagger M_{mn} = \Sigma_p V_{pn}^\dagger \quad (3.39)$$

$$M_{nm}^T U_{mp}^* = \Sigma_p V_{np}^* \quad (3.40)$$

$$M_{mn}^\dagger U_{np} = \Sigma_p V_{mp} \quad (3.41)$$

Σ の左、右特異ベクトルは次のように表される。

$$U_{m1}, U_{m2}, U_{m3}, \dots \quad (3.42)$$

$$V_{m1}, V_{m2}, V_{m3}, \dots \quad (3.43)$$

3.3 自由度の縮約

図 (3.2)-b、図 (3.3)-4to5 で図示されている総和は 4 つのテンソル S を 1 つのテンソル A にまとめている。下記の式は図 (3.2)-b で表しているように 4 つのテンソル S が持つ古い bond を表している添字 a, b, c, d をすべて総和し、残りの新しい bond を表している添字 i, j, k, l で表されるテンソル A_{ijkl}^{new} が生成されている式になる。そして、この手順を自由度の縮約という。

$$A_{ijkl}^{new} = \sum_{a,b,c,d} S_{adk}^1 S_{bal}^2 S_{cbi}^3 S_{dcl}^4 \quad (3.44)$$

3.4 テンソルくりこみ群

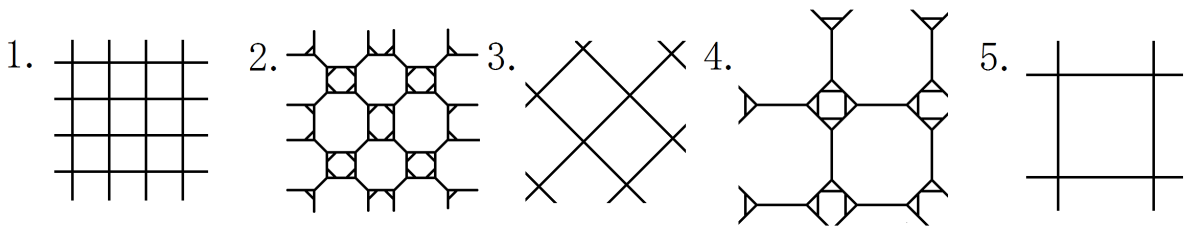


図 3.3: TRG のくりこみ過程

図 3.3-1 は各格子点にテンソル A を持つ格子を表している。図 3.3-2 は全格子点でテンソルの分解 (図 3.2-a を参照) を行い、自由度の次元を下げる新しい bond を生成し、格子点の数を 2 倍にしている。図 3.3-3 は自由度の縮約を行い、古い bond を

すべて総和し、4点を1点としている(図3.2-bを参照)。ここで1回のTRGのくりこみを実行した時の結果になるが、このままでは境界条件が元の格子点と異なるため、もう一度TRGのくりこみを行う。図3.3-4は図3.3-2と同様に全格子点でテンソルの分解を行い、新しいbondを生成している。図3.3-5は図2-3と同様に自由度の縮約を行い、古いbondをすべて総和し、4点を1点にくりこみ、新しいテンソル A^{new} を生成している。この2回のTRGのくりこみにより、格子点の境界条件はくりこみ前のテンソルを持つ格子点と同じになる。そして、この新しいテンソル A^{new} を基に再びくりこみを行うことでさらに大きな体積の系を計算することができる。

3.5 分配関数の計算(ブルートフォース)

テンソル A から分配関数を求める。本論文は1点、または4点のテンソル A を用いる場合の説明をする。1点のテンソルを次のように用いて、分配関数を計算している式になる。

$$Z^{one} = \sum_{i,j} A_{ijij}, \quad (3.45)$$

4点のテンソルを次のように用いて、分配関数を計算している式になる。

$$Z^{four} = \sum_{i,j,k,l,o,p,q,r} A_{ijkl} A_{kopi} A_{qkjr} A_{rpoq} \quad (3.46)$$

1点のテンソルからの分配関数 Z^{one} と4点のテンソルからの分配関数 Z^{four} の違いは計算量と計算精度である。 Z^{one} では計算量は Z^{four} に比べると小さいが、計算精度は悪くなる。反対に Z^{four} では計算量は大きいですが、計算精度は高くなる。このような特徴があり、本論文の計算結果は4点のテンソルを用いている。なお、添字の自由度を D_{cut} とすると、具体的な計算量は Z^{one} の場合には $O(D_{cut}^2)$ 、 Z^{four} の場合には $O(D_{cut}^6)$ となる。

第4章 テンソルくりこみ群を用いた相関関数の計算手法

この章では、TRG の手法を用い、2次元 Ising 模型の相関関数を求める手法についてを説明する。まず、相関関数を求めるためにテンソルネットワークの中に一つだけ異なるテンソルを組み込む。このテンソルのことを不純物テンソルという。また、本論文では分配関数から求めたテンソルのことを純粋テンソルと呼ぶことにする。そして、不純物テンソルを含むテンソルネットワークを TRG の手法でくりこみを実行することで一点関数を求めるために必要なテンソルネットワークが得られる。さらに、一点関数を求めるためにくりこみを何度も行われたテンソルネットワークを用いて、二点関数を求めるために必要なテンソルネットワークを得ることができる。最終的に、これらのテンソルネットワークを足しあげることによって一点関数と二点関数を求めることができる。くりこみの回数により、大きな体積でのそれぞれの関数を求められることができ、二点関数の引数である二点の距離を決めることができる。

1 節では、2次元 Ising 模型の不純物を含むテンソルネットワーク表示の導出を紹介し、2 節で一点関数を求めるに必要なくりこみの手順とくりこみを何度もくり返しても不純物テンソルの影響が4点以上に広がらないことを説明する。そして、3 節で二点関数を求めるに必要なくりこみの手順と一点関数と同様に不純物テンソルの影響が6点以上に広がらないことを説明する。最後の4 節で求めたテンソルネットワークを足しあげて、一点関数と二点関数を期待値として求める方法を説明する。

4.1 不純物テンソル

2章で説明した Ising 模型のテンソルネットワーク表示の分配関数を導いたように、今度は分配関数の代わりに格子点上の x 点だけにスピン s_x を置いた次のように定義した Z_1 をテンソルネットワーク表示に書き換える。 Z_1 は実は一点関数の期待値 $\langle s_x \rangle = \frac{Z_1}{Z}$ の分子であり、テンソルネットワーク表示にすると簡単に次のように表せる。

$$\langle s_x \rangle = \frac{\sum_{\{s\}} s_x e^{\beta \sum_{\langle a,b \rangle} s_a s_b}}{Z} \quad (4.1)$$

$$Z_1 \equiv \sum_{\{s\}} s_x e^{\beta \sum_{\langle a,b \rangle} s_a s_b} \rightarrow \sum_{\{n\}} \check{A}_{ijkl}^x \prod_{p \neq x} A_{ijkl}^p \quad (4.2)$$

この Z_1 の中にある A は 2 章で説明した Ising 模型のテンソルネットワーク表示のテンソル A と同じである。しかし、テンソル \check{A} はテンソル A とは異なり、この \check{A} を不純物テンソルと呼ぶ。

では、詳細に Z_1 をテンソルネットワーク表示に書き換えると次のように導くことができる。[14]

$$Z_1 = \sum_{\{s\}} s_x \prod_{\langle a,b \rangle} e^{\beta s_a s_b} \quad (4.3)$$

$$= \sum_{\{s\}} s_x \prod_{\langle a,b \rangle} \cosh(\beta) (1 + \tanh(\beta) s_a s_b) \quad (4.4)$$

$$= \sum_{\{s\}} s_x \prod_{\langle a,b \rangle} \cosh(\beta) \sum_{n_{ab}=0,1} (\tanh(\beta) s_a s_b)^{n_{ab}} \quad (4.5)$$

$$= \cosh(\beta)^{2V} \sum_{\{n\}} \sum_{s_x=\pm 1} \tanh(\beta)^{\frac{1}{2}(n_{xi}+n_{xj}+n_{xk}+n_{xl})} s_x s_x^{n_{xi}+n_{xj}+n_{xk}+n_{xl}} \prod_{p \neq x} \sum_{s_p=\pm 1} \tanh(\beta)^{\frac{1}{2}(n_{pi}+n_{pj}+n_{pk}+n_{pl})} s_p^{n_{pi}+n_{pj}+n_{pk}+n_{pl}} \quad (4.6)$$

$$= \cosh(\beta)^{2V} \sum_{\{n\}} \tanh(\beta)^{\frac{1}{2}(n_{xi}+n_{xj}+n_{xk}+n_{xl})} (1 + (-1)^{n_{xi}+n_{xj}+n_{xk}+n_{xl}+1})$$

$$\prod_{p \neq x} \tanh(\beta)^{\frac{1}{2}(n_{pi}+n_{pj}+n_{pk}+n_{pl})} (1 + (-1)^{n_{pi}+n_{pj}+n_{pk}+n_{pl}}) \quad (4.7)$$

$$= 2^V \cosh(\beta)^{2V} \sum_{\{n\}} \tanh(\beta)^{\frac{1}{2}(n_{xi}+n_{xj}+n_{xk}+n_{xl})} \delta_{\text{mod}(n_{xi}+n_{xj}+n_{xk}+n_{xl}+1,2),0}$$

$$\prod_{p \neq x} \tanh(\beta)^{\frac{1}{2}(n_{pi}+n_{pj}+n_{pk}+n_{pl})} \delta_{\text{mod}(n_{pi}+n_{pj}+n_{pk}+n_{pl},2),0} \quad (4.8)$$

$$= 2^V \cosh(\beta)^{2V} \sum_{\{n\}} \check{A}_{n_{xi}n_{xj}n_{xk}n_{xl}}^x \prod_{p \neq x} A_{n_{pi}n_{pj}n_{pk}n_{pl}}^p \quad (4.9)$$

$$A_{ijkl}^p = \tanh(\beta)^{\frac{1}{2}(i+j+k+l)} \delta_{\text{mod}(i+j+k+l,2),0} \quad (4.10)$$

$$\check{A}_{ijkl}^p = \tanh(\beta)^{\frac{1}{2}(i+j+k+l)} \delta_{\text{mod}(i+j+k+l+1,2),0} \quad (4.11)$$

4.2 一点関数を求めるためのテンソルネットワークのくりこみ手順

不純物テンソルを含むテンソルネットワーク表示を用いて、一点関数を求める。[14]

図 (4.1) は一点関数を求める場合のくりこみの過程を表している。まず、図 (4.1)-1-1 のように不純物テンソル \check{A} が 1 点だけ存在するテンソルネットワークを考える。(その他のテンソルはすべてテンソル A である。) 次に図 (4.1)-1-1to3 のようにテンソルの分解と縮約を行い、図 (4.1)-1-3 のように不純物テンソル \check{A} の影響を受けた 2 点の不純物テンソルが存在する新しいテンソルネットワークが生成される。そして、

図 (4.1)-1-1to3 と同様に図 (4.1)-1-4to5 のようにテンソルの分解と縮約を行い、元の境界条件を満たすテンソルネットワークを生成する。この図 (4.1)-1-1to5 のくりこみを1回のくりこみとする。図 (4.1)-1-5 では不純物テンソル \check{A} の影響を受けた3点の不純物テンソル $\check{A}_1^1, \check{A}_2^1, \check{A}_3^1$ が存在する新しいテンソルネットワークが生成されている。最終的に、この手順を再び行くと図 (4.1)-3-1 になり、不純物テンソル \check{A} の影響を受けた4点の不純物テンソル $\check{A}_1^2, \check{A}_2^2, \check{A}_3^2, \check{A}_4^2$ が存在する新しいテンソルネットワークが生成されている。あとは図 (4.1)-3-1to5 をくり返すことで十分な大きな体積での一点関数を求めることができる。なお、図 (4.1) を見ると、このくりこみをくり返しても不純物テンソル \check{A} の影響を受けた不純物テンソルは必ず4点に収束されることがわかる。

4.3 二点関数を求めるためのテンソルネットワークのくりこみ手順

一点関数を求める際に生成されるテンソルネットワークを用いて、二点関数を求める。[14]

図 (4.2)-1 は二点関数を求める場合の一回目のくりこみの過程を表している。まず、図 (4.2)-1-1 のように一点関数を求めるために得た4点の不純物テンソル $\check{A}_1^N, \check{A}_2^N, \check{A}_3^N, \check{A}_4^N$ が2セット存在するネットワークを組み合わせたテンソルネットワークを考える。次に図 (4.2)-1-1to3 のようにテンソルの分解と縮約を行うと、図 (4.2)-1-3 のように不純物テンソル \check{A} の影響を受けた7点の不純物テンソルが存在する新しいテンソルネットワークを生成される。そして、図 (4.2)-1-1to3 と同様に図 (4.2)-1-3to5 のようにテンソルの分解と縮約を行い、元の境界条件を満たすテンソルネットワークを生成する。図 (4.2)-1-5 では不純物テンソル \check{A} の影響を受けた6点の不純物テンソル $A_1^1, A_2^1, A_3^1, A_4^1, A_5^1, A_6^1$ が存在する新しいテンソルネットワークが生成されている。

図 (4.2)-2-1 は二点関数を求める場合の二回目のくりこみの過程を表している。まず、図 (4.2)-2-2 で求めた二点関数を求めるために得たテンソル $A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, A_6$ が存在するネットワークを組み合わせたテンソルネットワークを考える。次に図 (4.2)-2-1to3 のようにテンソルの分解と縮約を行うと、図 (4.2)-2-3 のように6点の不純物テンソルの影響を受けた6点の不純物テンソルが存在する新しいテンソルネットワークを生成される。そして、図 (4.2)-2-1to3 と同様に図 (4.2)-2-3to5 のようにテンソルの分解と縮約を行い、元の境界条件を満たすテンソルネットワークを生成する。図 (4.2)-2-5 では不純物テンソル \check{A} の影響を受けた6点の不純物テンソル $A_1'', A_2'', A_3'', A_4'', A_5'', A_6''$ が存在する新しいテンソルネットワークが生成されている。最後に、図 (4.2)-2-1 に戻り、くりこみをくり返すことで十分な大きな体積での二点関数を求めることができ、図 (4.2) のようにくりこみを行うごとに不純物テンソルは8点から7点へ、7点から6点へと収束していき、最終的に何度くり返しても6点のテンソルに収束する。

4.4 一点または二点関数の計算

前章の4節で説明した分配関数を求める手法と同様に不純物テンソルを含むテンソルネットワークを足しあげることによって一点または二点関数を求めることができる。

まず、テンソルネットワークを考えると前節で説明した通り不純物テンソルの影響を受けるテンソルは4つまたは6つに収束する。そのため、不純物テンソルの影響を受けたテンソルの4つまたは6つを含む16点のテンソルネットワークを考える。一点関数の場合、図4.1-3-1のようなテンソルネットワークを考える。次に、その16点をTRGの手法でくりこみを実行する。この時、境界条件がある場合は考慮する必要がある。本論文では周期境界条件を用いて、計算を行っているため、周期境界条件に則り、くりこみを実行する。くりこみ後、4点までくりこまれたテンソルネットワークを用いて、一点関数の期待値(4.1)の分子である Z_1 を求め、同様に二点関数の期待値の分子である $Z_2 \equiv \sum_{\{s\}} s_a s_b e^{\beta \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j}$ を求め、それぞれを分配関数 Z で除法することで一点関数と二点関数を得られる。そして、それらの関数を用い、二点相関関数 G_s の期待値を得ることができる。

$$Z_1, Z_2 = \sum_{i,j,k,l,o,p,q,r} B_{ijkl} C_{kopi} D_{qkjr} E_{rpoq} \quad (4.12)$$

$$\langle s_a \rangle, \langle s_a s_b \rangle = \frac{Z_1, Z_2}{Z} \quad (4.13)$$

$$G_s(|a-b|) = \langle s_a s_b \rangle - \langle s_a \rangle^2 \quad (4.14)$$

ここでのテンソル B, C, D, E は不純物テンソルの影響を受けたいくつかのテンソルを含む16点のテンソルネットワークでTRGを実行した時にできる4つのテンソルである。

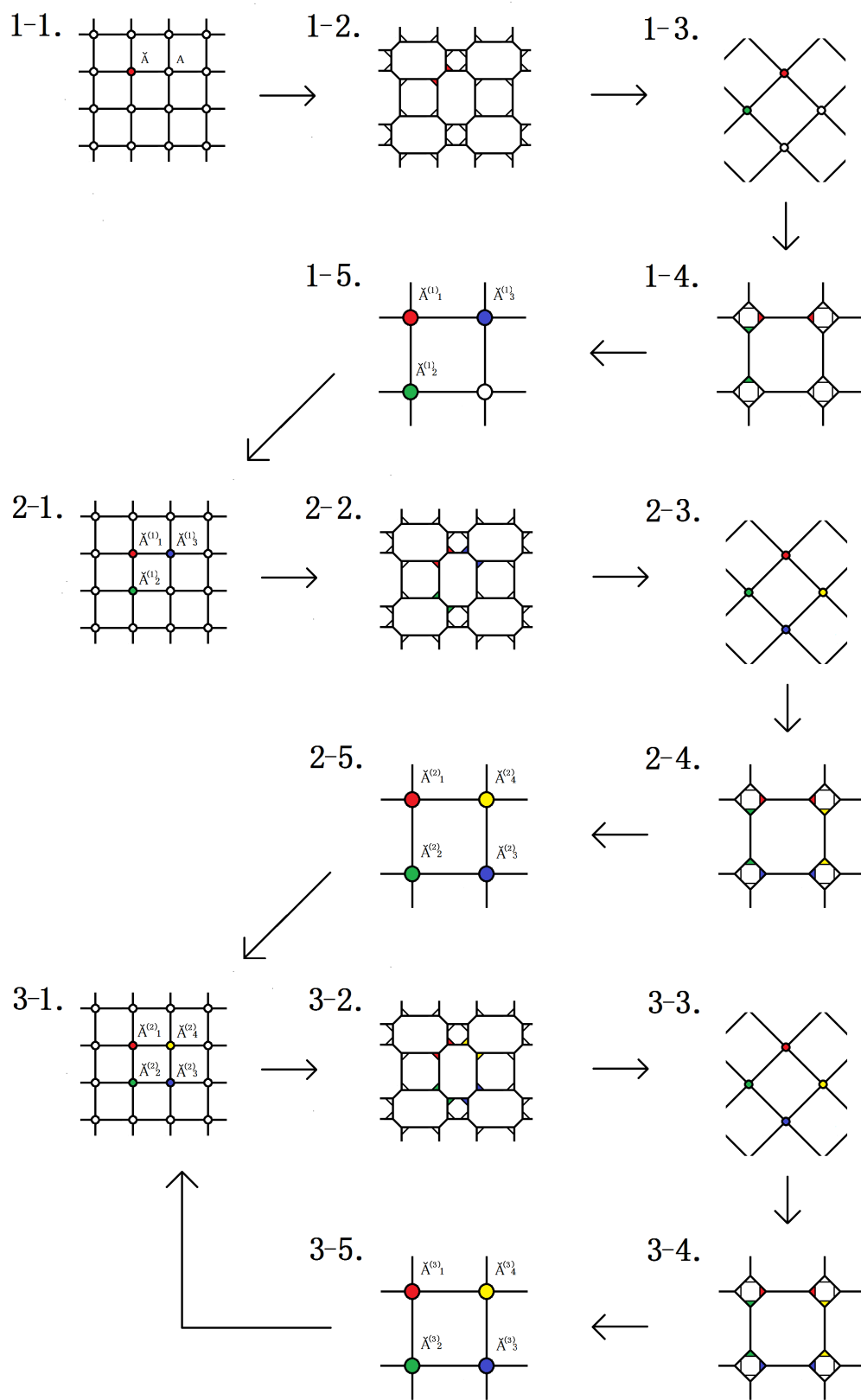


図 4.1: 一点関数を求めるテンソルくりこみ過程

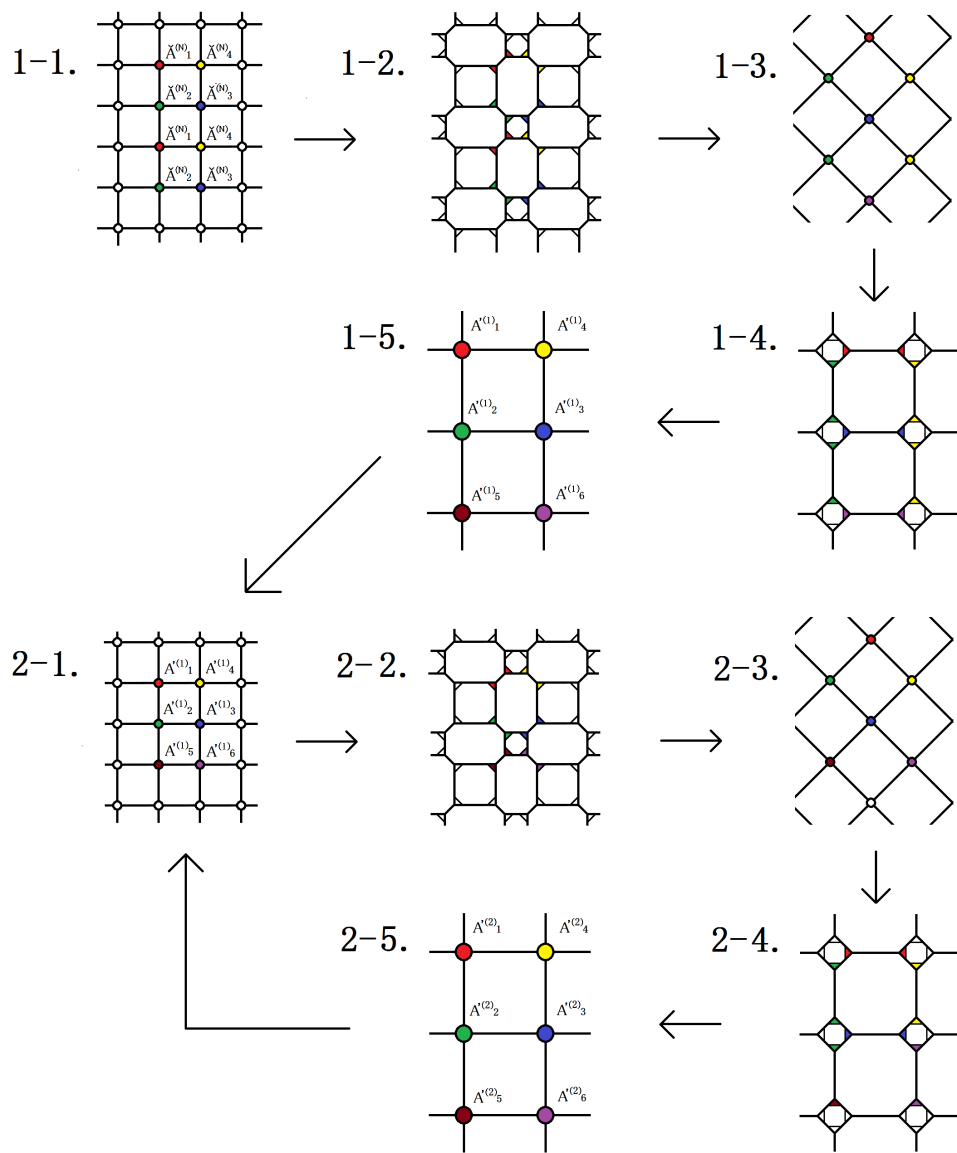


図 4.2: 二点関数を求めるテンソルくりこみ過程

第5章 数値計算結果

この章では、3章で説明した2次元 Ising 模型の相関関数を求めるくりこみの手法を用い、 $D_{\text{cut}} = \{24, 32\}$ で数値計算した結果を示し、考察する。まず、フィット関数を用い、相関関数から相関長と臨界指数 η 、自発磁化を取り出す。この時、 $D_{\text{cut}} = \{24, 32\}$ から得た相関関数の差を誤差として、フィットの信頼性を高めるためとフィット領域の決定のために導入した。つぎに取り出した相関長と自発磁化から臨界温度と臨界指数 ν, β をフィット関数を用いることで取り出した。この時、フィット領域を $D_{\text{cut}} = \{24, 32\}$ から定義した誤差を用い、決定した。

1節では、TRGの手法から得た相関関数の振る舞いを示し、相関長と臨界指数 η 、自発磁化を取り出すフィット関数の説明をする。2節では、相関関数から得た相関長を用い、適切なフィット領域を見極め、臨界温度と臨界指数 ν を求め、相関長から臨界温度と臨界指数 ν を取り出すフィット関数の説明をする。3節では、2節同様に相関関数から得た自発磁化を用いて、 $D_{\text{cut}} = \{24, 32\}$ からの自発磁化の差を比較して、フィット領域を決め、臨界温度と臨界指数 β を求め、必要なフィット関数の説明をする。最後の4節で相関長と自発磁化のスケーリング領域についてを議論する。

5.1 相関関数から相関長 ξ と臨界指数 η 、自発磁化 m を取り出す方法

今回は外部磁場 h を $h = 0$ とし、体積 $V = 2^{21} \times 2^{21}$ の2次元 Ising 模型の数値計算を行う。まず、臨界温度付近のスピン変数の相関関数 $G_s(r)$ を次のように表すことができる。

$$G_s(r) \equiv \langle s(r)s(0) \rangle_{\text{connected}} \quad (5.1)$$

$$= \langle s(r)s(0) \rangle - \langle s(r) \rangle \langle s(0) \rangle \quad (5.2)$$

$$= \frac{A}{r^E} e^{-r/\xi}, \quad r \rightarrow \infty \quad (5.3)$$

ここで、 A, E はフィットパラメーターである。一方、本論文では次の二点関数を用いて、解析を行う。

$$G(r) = \langle s(r)s(0) \rangle = G_s(r) + \langle s(r) \rangle \langle s(0) \rangle \quad (5.4)$$

$$= C^2 + \frac{A}{r^E} e^{-r/\xi}, \quad r \rightarrow \infty \quad (5.5)$$

各温度でフィットを行い、 C, E, A, ξ の値を決定することができる。臨界温度直上では臨界指数 η になる。なお、臨界指数 η は 2 次元 Ising 模型では $\eta = 0.25$ であり、図 (5.4) を見ると臨界温度直上では E は 0.25 に近づいていることが確認できる。このフィットで得た相関長 ξ とフィットパラメーター E の結果を図 (5.4) に示す。

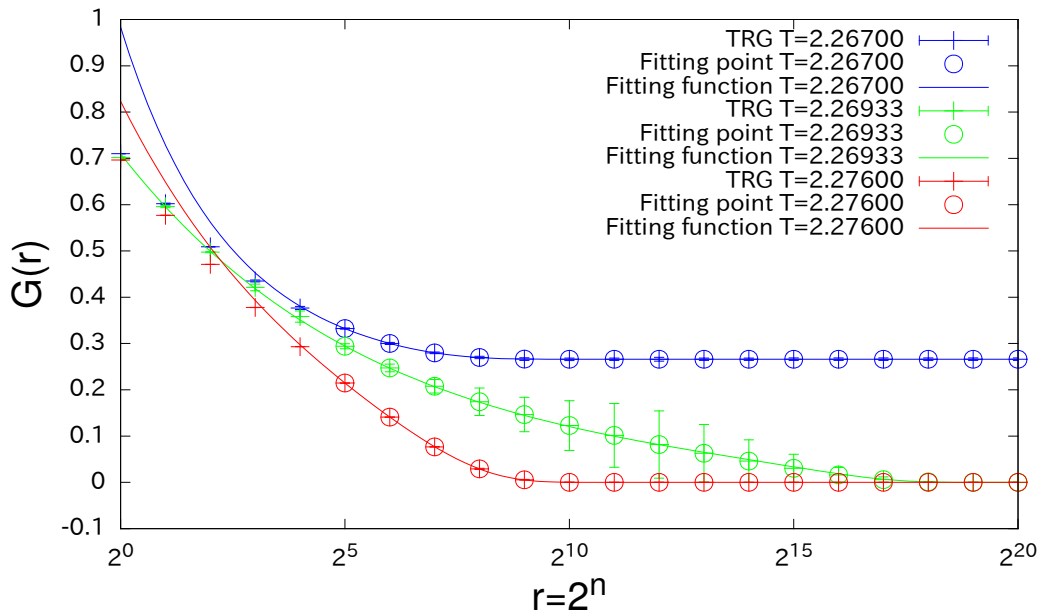


図 5.1: 相関関数とフィット関数の結果:青線は低温相 ($T < T_c$) の 2 点関数であり、常に自発磁化の 2 乗に相当する切片が存在する。緑線は臨界点近傍 $T \simeq T_c$ の相関関数であり、他の低温相や高温相の 2 点関数に比べると相関が距離 r に対して、減少の速度が遅くなっている。これは離れたスピン同士が相関しているということであり、臨界点直上 ($T = T_c$) で相関長が発散するという物理に矛盾していない。赤線は高温相 ($T > T_c$) の 2 点関数であり、なめらかに相関が減少している。

フィットした結果を図 (5.1) に示す。図 (5.1) を見ると、低温相 ($T = 2.26700$) では 2 点関数は明らかに切片を持っている。そのため、高温相に比べて、変化が小さく、温度が小さければ小さいほど、フィット点をより距離 r が小さい点から取る必要がある。しかし、フィット関数は距離 r が十分に大きいところで成り立つ関数のため、あまりにも温度が小さい場合は正しい相関長を得ることができないと考える。今回は距離 2^5 以上の点をフィット点として、フィットを実行した。また、後述するが、切片が自発磁化 m の 2 乗を意味している。次に、臨界点近傍 ($T = 2.26933$) では切片がゼロに近づき、大きい距離 r でも小さい有限の値を取る。これは臨界点直上での相関長が発散することにより、どれほど大きい距離 r でも相関はゼロにならず、常に小さい有限の値を取りつづけるという従来の研究結果と矛盾しない。今回は低温相と同様に距離 2^5 以上の点をフィット点として、フィットを実行した。最後に高温相 ($T = 2.27600$) では自発磁化に相当する切片が完全にゼロになり、2 点関数と相関関数 $G_s(r)$ が完全に一致する。低温相に比べ、変化が大きく、十分に大きい

距離 r でもフィット点として選ぶことができる。今回は他の相と同様に距離 2^5 以上の点をフィット点として、フィットを実行した。なお、図 (5.1) にプロットされているフィット関数の誤差は $D_{\text{cut}} = \{24, 32\}$ からそれぞれ得た相関関数の値の差を誤差として、次のように定義した。

$$\delta G(r) = G(r)_{D_{\text{cut}}=32} - G(r)_{D_{\text{cut}}=24} \quad (5.6)$$

5.2 相関長 ξ から臨界温度 T_c と臨界指数 ν を取り出す方法

臨界温度 T_c 付近での相関長 ξ のフィット関数を次のように表すことができる。

$$\xi(T) \equiv B|T - T_c|^{-\nu} \quad (5.7)$$

前節で求めた相関長からこのフィット関数で臨界指数 ν と臨界温度 T_c を求める。¹ そのフィットで得た臨界温度 T_c と臨界指数 ν を表 (5.1) に示す。その時、用いたフィット領域を 4 節で説明する。

5.3 自発磁化 m から臨界温度 T_c と臨界指数 β を取り出す方法

TRG を用いた一点関数から自発磁化を求めることができるが、十分大きな体積を要求するために今回は一点関数を用いず、相関関数のフィットから得た自発磁化を用いる。

まず、二点関数を用いたフィット関数から得たフィットパラメーター C を自発磁化に相当することを説明する。通常、有限の小さな体積の 2 次元 Ising 模型では外部磁場 h がゼロの場合、自発磁化 m は常にゼロである。

$$\langle s(r) \rangle = 0 \quad (h = 0, V < \infty) \quad (5.9)$$

従って、式 (5.5) では不安定な真空の寄与を考慮しなくてもいい。しかし、十分に体積が大きく、低温相である場合、相関関数 $\langle s(r)s(0) \rangle$ には真空の寄与が存在する。そのため、二点関数を用いたフィット関数のフィットパラメーター C は次のように自

¹実際のフィッティングでは、次のような相関長 ξ の逆数を用いてフィッティングすることが不安定性を避けることができる良い方法である。

$$\xi^{-1} = B'|T - T_c|^\nu \quad (5.8)$$

発磁化 m の関係性がわかる。

$$G_s(r) = \langle s(r)s(0) \rangle - \langle s(r) \rangle \langle s(0) \rangle = \frac{A}{r^{D-2+\eta}} e^{-r/\xi} \quad (5.10)$$

$$G(r) = \langle s(r)s(0) \rangle \quad (5.11)$$

$$= G_s(r) + \langle s(r) \rangle \langle s(0) \rangle \quad (5.12)$$

$$= \langle s(r) \rangle \langle s(0) \rangle + \frac{A}{r^{D-2+\eta}} e^{-r/\xi} \quad (5.13)$$

$$= m^2 + \frac{A}{r^{D-2+\eta}} e^{-r/\xi} \quad (5.14)$$

ここでの m は自発磁化であり、 $m = \langle s(0) \rangle = \langle s(r) \rangle$ である。式 (5.5) と式 (5.14) を比べると明らかにフィットパラメーター C が自発磁化 m と一致する。

このフィットパラメーター C を自発磁化 m とみなし、臨界温度 T_c と臨界指数 β を以下を求める。

臨界温度 T_c 付近での自発磁化 m のフィット関数を次のように表すことができる。

$$C = m(T) = D|T - T_c|^\beta \quad (T < T_c) \quad (5.15)$$

臨界指数 β は 2 次元 Ising 模型では $\beta = 0.25$ である。1 節で求めたフィットパラメーター C からフィット関数で臨界温度 T_c と臨界指数 β を求める。² そのフィットで得た臨界温度 T_c と臨界指数 β を表 (5.1) に示す。その時、用いたフィット領域を相関長同様に 4 節で説明する。

高温相 ($T > T_c$) における相関長と低温相 ($T < T_c$) における自発磁化をそれぞれ関数形を用いて、フィットで臨界温度 T_c と臨界指数 ν, β を求め、表 (5.1) で示した。その結果、高温相における相関長と低温相における自発磁化から得た臨界温度 T_c と臨界指数 ν, β は厳密値に誤差の範囲内で一致し、信頼の高い値をそれぞれ得たと考えている。また、低温相 ($T < T_c$) における相関長から得た臨界温度 T_c は高温相の相関長と自発磁化からの結果に比べると厳密値からのズレが大きかった。その原因だと考えられる一つにフィット関数が低温相では適したフィット関数ではなく、正しい臨界温度と臨界指数を取り出すことができなかったという可能性がある。二つめに適したフィット領域を採用していない可能性がある。三つめに図 (5.4) の臨界指数 η の振る舞いが明らかに不安定な振る舞いをしていることから低温相が高温相に比べて、スケーリングの破れが強い可能性がある。

5.4 相関長と自発磁化のスケーリング領域の議論

相関関数と同様にフィットを行う際にフィット関数から正しく力学的な情報を取得するために最適なフィット領域を設定する必要がある。

²特に $m^{\beta_{\text{exp}}}$ に変形し、次のような $m^{1/\beta_{\text{exp}}}$ を用いてフィッティングすることが良い方法である。 β_{exp} は β の期待値である。

$$m^{1/\beta_{\text{exp}}} = A'|T - T_c|^e \quad (5.16)$$

	T_c	β	ν
厳密値	2.269185...	0.125	1
$\xi(T > T_c)$	2.26918(10)	–	0.983(30)
$m(T < T_c)$	2.26914(19)	0.1191(63)	–

表 5.1: 2次元 Ising 模型の厳密値、TRG の相関関数からの臨界指数

今回、相関長 ξ の適したフィット領域を決定するために $D_{\text{cut}} = \{24, 32\}$ から得たそれぞれの相関関数の差を指標として考え、適した領域を推測した。具体的には先に説明した誤差を $D_{\text{cut}} = 32$ の相関関数 $G(r)$ で除した相対誤差 $\delta g(r) = \delta G(r)/G(r)_{D_{\text{cut}}=32}$ が $\delta g < 0.15$ であり、距離 $r = 2^n$ が $n < 10$ を満たす領域をフィット領域と決めた。その結果、フィット領域は $[2.2701 : 2.7800]$ が妥当であると判断した。さらに図 (5.2) のようにフィット領域の範囲を変化させて、臨界温度 T_c と臨界指数 ν を確認したところ、臨界温度 T_c が最小値を取る場合、フィット領域を採用した。領域 $[2.2714 : 2.27800]$ 以降から形を大きく崩れているのは実際のスケーリング領域から外れたことを意味していると考えたため、この領域は適切なフィット領域ではないとみなした。

また、自発磁化 m についても同様の考えでフィット領域を推測した。自発磁化 m の場合に誤差 δM を $\delta M = m_{D_{\text{cut}}=32} - m_{D_{\text{cut}}=24}$ とし、その温度変化を図 (5.3) に示した。図 (5.3) より、 $D_{\text{cut}} = \{24, 32\}$ から求めたそれぞれの自発磁化の値が温度 $T = 2.2660$ まで機械的に減少していることがわかり、これは温度 $T = 2.2660$ より大きい温度の領域は D_{cut} 依存性が強いことを意味している。そのため、自発磁化 m のフィット領域を $[2.2645 : 2.2660]$ を採用した。

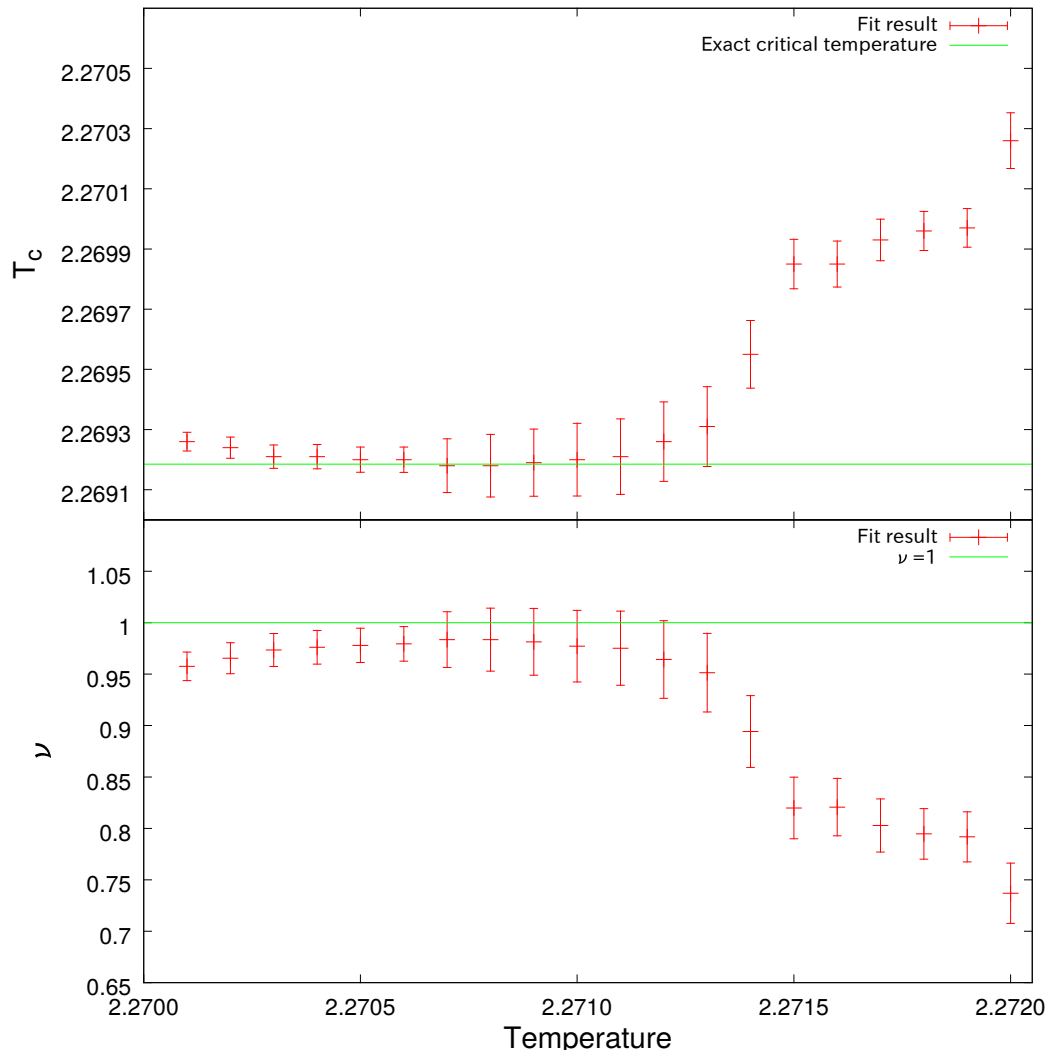


図 5.2: 相関長からの温度レンジ別の臨界温度 T_c と臨界指数 ν : 各温度ごとに相関長を温度レンジ $[x : 2.27800]$ を変え、プロットした。この時に最小値をとる温度レンジを正しいスケーリング領域を得ているとして、臨界温度 T_c を得た。同様の方法で臨界指数 ν を得た。

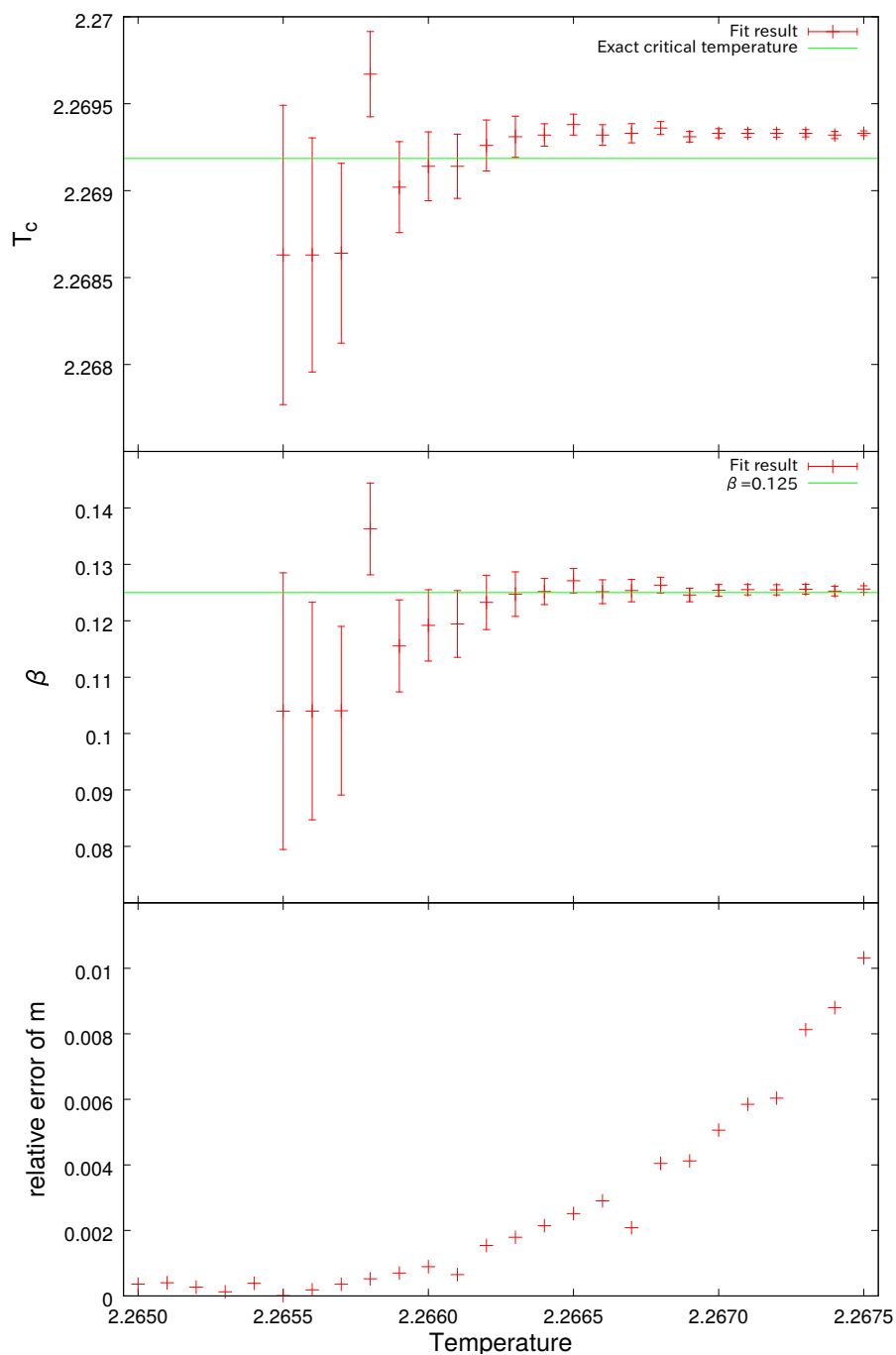


図 5.3: 自発磁化からの温度レンジ別の臨界温度 T_c と臨界指数 β と $D_{\text{cut}} = 32$ と $D_{\text{cut}} = 24$ の相関関数から得た自発磁化の相対誤差: 上二段の図の二つは各温度ごとに相関長を温度レンジ $[2.2645 : x]$ を変え、プロットした。しかし、これらの図から最小値を確認することが困難であるため、 $D_{\text{cut}} = \{24, 32\}$ から得た自発磁化の差を用いて、温度レンジを決定した。三段目の図は温度レンジを決定するために用いた $D_{\text{cut}=24,32}$ から相関関数から得た自発磁化の相対誤差をプロットした図である。

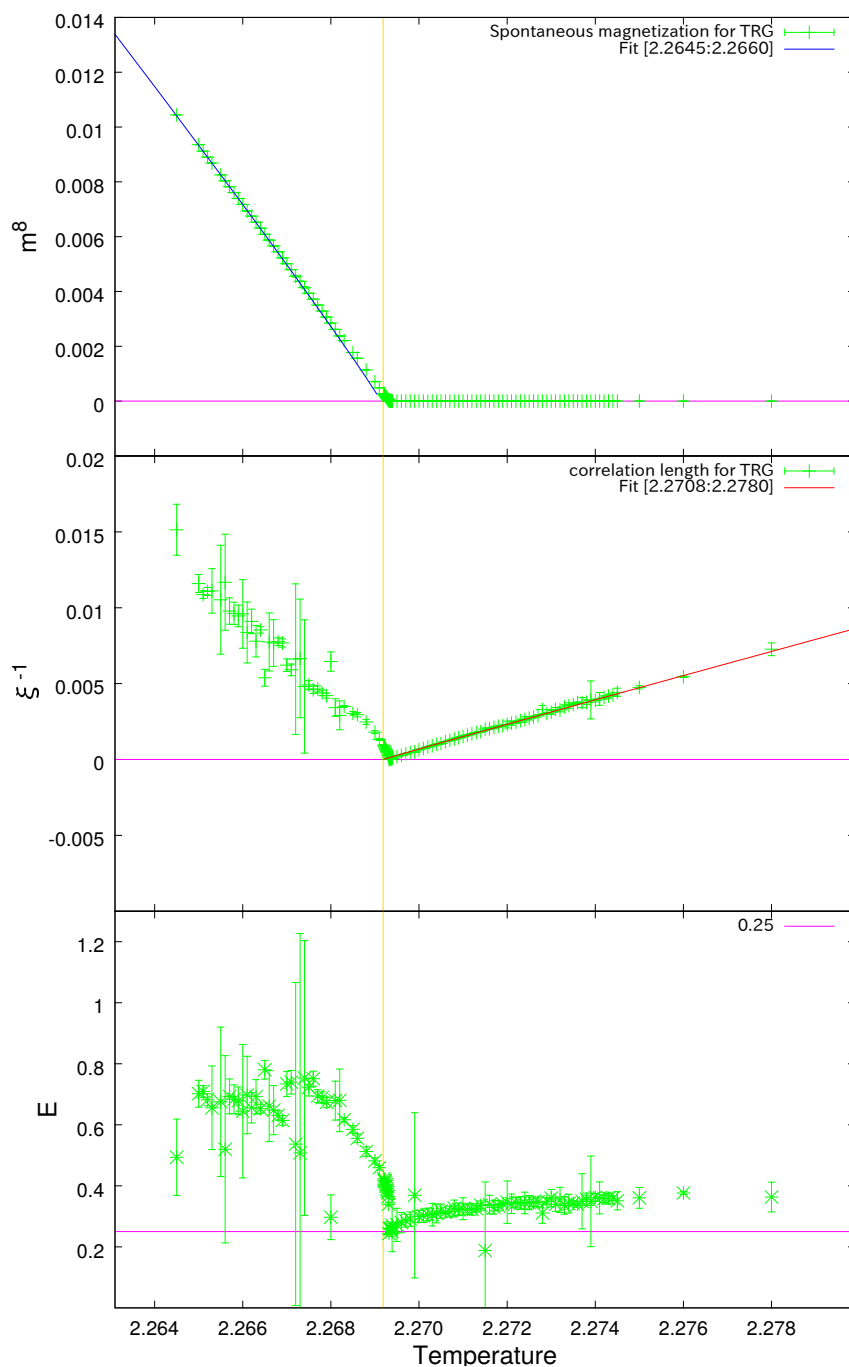


図 5.4: 相関長と自発磁化と臨界指数 η の温度変化: 一段目は温度別に数値結果から得た m から変換した m^8 、それをフィットしたフィット関数 (青線) をプロットした。温度レンジ [2.2645:2.2660] とフィット関数を用いて、フィットを実行した。二段目は温度別に数値結果から得た ξ から変換した ξ^{-1} 、それをフィットしたフィット関数 (赤線) をプロットした。三段目は温度別に数値結果から得た R をプロットした。黄色線は厳密解の臨界温度 $T_c = 2/\ln(1 + \sqrt{2}) = 2.26918\dots$ である。

第6章 まとめと展望

本論文では厳密解が知られている周期境界条件の古典的 2 次元 Ising 模型を用いて、TRG を応用した手法によって得られた二点相関関数から臨界指数と臨界温度を正しく再現することに成功した。その結果、この手法から得られた二点相関関数の計算方法の正しさを実証した。従来の手法では比熱や帯磁率から臨界指数と臨界温度を抽出する。その比熱や帯磁率を算出するためには分配関数を温度や外部磁場で二階数値微分が要求される。しかし、数値微分を実行することに有効桁を損失し、正確な比熱や帯磁率を得るためには大きい D_{cut} が要求される。また、帯磁率を得るためには外部磁場のような追加パラメーターをハミルトニアンの中に導入する必要があり、系の解析を複雑にさせる傾向がある。さらに、これらの従来の方法では D_{cut} に強く依存した臨界温度を得られるために正しい臨界温度を求めることができなかった。これらの問題点を改善するために本論文では数値微分や追加パラメーターを用いずに相関関数を得ることができる TRG の手法を用いて、検証を行った。

この手法は不純物テンソルと呼ばれるテンソルを含むテンソルネットワークを構成し、TRG を実行することで相関関数を得ることができる。この手法の長所はくりこみをくり返すごとに格子体積を指数的に増加させることができる。そのため、格子計算の分野でよく知られているモンテカルロ法と呼ばれる確率計算よりもはるかに大きな体積での数値計算を行うことができる。そして、得られた相関関数が正しいのであれば、相関関数から臨界指数と臨界温度を抽出することができると考え、検証を行った。その結果は表 (5.1) に示した。この結果を見ると十分に 2 次元 Ising 模型の臨界指数と臨界温度を再現することができたと考えられる。つまり、この手法は大きな D_{cut} や追加パラメーターを要求せずに異なる模型や高次元の模型に対しても臨界指数と臨界温度を抽出する強力な方法になるということが推測される。しかしながら、 D_{cut} の依存性を排除するために臨界温度近傍の領域、つまり、 D_{cut} に依存する領域を排除し、フィット領域を決定しなければならない。しかし、正確にフィットを決定することができれば、正しい臨界指数と臨界温度を求めることができる。このフィット領域を決定するために本論文ではこの D_{cut} に依存する領域は異なる $D_{\text{cut}} = \{24, 32\}$ でそれぞれ計算した相関関数や自発磁化を比較し、 D_{cut} 依存性を検証し、妥当なフィット領域を決定した。

本論文は初めて 2 次元 Ising 模型の相関関数から臨界指数と臨界温度を抽出できることを実証し、大きい D_{cut} や追加パラメーターを要求せずに正しい臨界指数と臨界温度を再現することができた。今後は計算精度の向上が期待できる TNR や Loop-TNR の手法を用いた相関関数を計算し、この方法を再評価することで数値の精度や計算コストでどのような利点を見出せるかに大いに興味がある。また、XY 模型や

U(1) 理論、SU(2) 理論などの自由度を無限に持つ模型でも同じように臨界指数と臨界温度を再現することができるのかということについても大いに興味がある。

謝辞

本研究を完遂し、学位論文をまとめるにあたり多大のご指導とご支援を賜りました武田真滋助教、指導教官である末松大二郎教授に深く感謝しております。様々な問題に直面しても柔軟に対応し、その時の適したご指導を頂いたことや励まして下さったことを通して、自分の思考の硬さや考えの浅さを実感することができたことは今後の人生の糧になるものであります。また、博士課程への進学及び研究生活全般にわたるご支援、ご指導を賜りました青木健一教授、久保治輔教授、青木真由美准教授、石渡弘治助教に深く感謝いたしております。研究全般及び研究生活全般にわたるご支援、ご指導を賜りました Lattice グループの河内比花留さん、坂井涼さん、八木健太さん、藤田達大さんには深く感謝しております。研究だけでなく多岐にわたりご支援、ご指導を賜りました RG グループの神戸大学の熊本慎一郎講師、小内伸之介先輩には深く感謝しております。博士課程後期進学以前から現在にわたり温かく見守っていただくとともにご支援、ご指導を賜りました米子工業高等専門学校的小林玉青講師、藤井康弘先輩、秘書の西川涼子さんには深く感謝しております。最後に、これまで温かく見守りそして辛抱強く支援して下さった両親や友人に対しては深い感謝の意を表して謝辞と致します。

参考文献

- [1] M. Levin and C. P. Nave, *Phys. Rev. Lett.* 99, 120601 (2007)
- [2] Y. Shimizu, *Mod. Phys. Lett. A* 27, 1250035 (2012)
- [3] Y. Shimizu and Y. Kuramashi, *Phys. Rev. D* 90, no. 1, 014508 (2014)
- [4] Y. Shimizu and Y. Kuramashi, *Phys. Rev. D* 90, no. 7, 074503 (2014)
- [5] S. Takeda and Y. Yoshimura, *PTEP* 2015 (2015) no.4, 043B01
- [6] K. Aoki, T. Kobayashi and H. Tomita, *Int. Jour. Mod. Phys. B* 23, 18 (2009).
- [7] Z. Y. Xie, J. Chen, M. P. Qin, J. W. Zhu, L. P. Yang, T. Xiang, *Phys. Rev. B* 86, 045139 (2012)
- [8] S. Wang, Z. Y. Xie, J. Chen, B. Normand, T. Xiang, *Chin. Phys. Lett.* 31, 070503 (2014)
- [9] J. F. Yu, Z. Y. Xie, Y. Meurice, Y. Liu, A. Denbleyker, H. Zou, M. P. Qin, J. Chen, and T. Xiang, *Phys. Rev. E* 89, 013308 (2014)
- [10] J. Unmuth-Yockey, Y. Meurice, J. Osborn, H. Zou, arXiv:1411.4213.
- [11] H. Kawauchi and S. Takeda, *Phys. Rev. D* 93, no. 11, 114503 (2016)
- [12] G. Evenbly and G. Vidal, *Phys. Rev. Lett.* 115, 180405 (2015)
- [13] S. Yang, Z. Gu, and X. Wen, arXiv:1512.04938v1
- [14] Z. Gu, M. Levin, X. Wen, *Phys. Rev. B* 78, 205116 (2008)
- [15] Y. Meurice, A. Denbleyker, Y. Liu, T. Xiang, Z. Xie, Ji-Feng Yu, Judah Unmuth-Yockey, Haiyuan Zou, arXiv:1311.4826(2013)
- [16] G. Evenbly, G. Vidal, arXiv:1412.0732v3 (2014)
- [17] J.F.Yu, Z.Y.Xie, Y.Meurice, Y. Liu, A.Denbleyker, H. Zou, M.P.Qin, J.Chen, T.Xiang, arXiv:1309.4963v1(2013)
- [18] Z. Gu and X. G. Wen, *Phys. Rev. B* 80, 155131 (2009)

- [19] 著:西森秀稔, ”相転移・臨界現象の統計物理学”(培風館/2005)
- [20] H. Kramers and G.Wannier, Phys. Rev. 60 252 (1941)
- [21] L. Onsager, Physical Review 65, 117-149 (1944)
- [22] L. Onsager, Supplemento Nuovo Cimento, 6, 261 (1949)
- [23] B. Kaugman , Phys. Rev 76 1232 (1949)
- [24] Y. Nambu , Progr. theor. Phys. 5 1 (1950)
- [25] M. Kac and J. C. Ward , Phys. Rev. 88 1332 (1952)
- [26] R. B. Potts and J. C. Ward , Progr. Theor. Phys. 13 1 (1955)
- [27] T. D. SCHULTZ, D. C. MATTIS, and E. H. LIEB , Rev. Mod. Phys. 36, 856 (1964)
- [28] C. N. Yang , Phys. Rev. 85 898 (1950)
- [29] T.T. Wu , Physical Review 149, 380-401 (1966)
- [30] I. Lyberg and B.M. McCoy , Journal of Physics A40, 3329-3346 (2007)

付録A テンソルネットワーク表示の発展

A.1 外部磁場ありの2次元 Ising 模型のテンソルネットワーク表示

2章で説明したドメインウォールを用いた Ising 模型のハミルトニアンに磁化を加え、次のように分配関数とハミルトニアンを定義した。

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-\beta H} \quad (\text{A.1})$$

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (\text{A.2})$$

そして、テンソルネットワーク表示を次のように導いた。

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \beta h \sum_i S_i} \quad (\text{A.3})$$

$$= \sum_{\{s\}} \prod_{p(i,j,k,l)} e^{\beta J (S_i S_j + S_j S_k + S_k S_l + S_l S_i) + \frac{1}{2} \beta h (S_i + S_j + S_k + S_l)} \quad (\text{A.4})$$

$$= \sum_{\{s\}} \prod_p T_{S_i S_j S_k S_l}^p \quad (\text{A.5})$$

$$T_{S_i S_j S_k S_l}^p = e^{\beta J (S_i S_j + S_j S_k + S_k S_l + S_l S_i) + \frac{1}{2} \beta h (S_i + S_j + S_k + S_l)} \quad (\text{A.6})$$

$$= \sum_{\{i,j,k,l\}} \prod_p A_{ijkl}^a \quad (\text{A.7})$$

$$S_n = \pm 1 \rightarrow n = \{0, 1\}, \quad (\text{A.8})$$

$$A_{ijkl}^p \equiv T_{S_i S_j S_k S_l}^p \quad (\text{A.9})$$

A.2 2次元 XY 模型のテンソルネットワーク表示

2次元 XY model の分配関数とハミルトニアンを次のように定義する。

$$Z = \frac{1}{(2\pi)^V} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_p d\theta_p e^{-\beta H} \quad (\text{A.10})$$

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (\text{A.11})$$

A.2.1 外部磁場なしのXY模型のテンソルネットワーク表示

XY模型のハミルトニアンを用いて、テンソルネットワーク表示を次のように導いた。[17]

$$Z = \frac{1}{(2\pi)^V} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_p d\theta_p \prod_{\langle i,j \rangle} e^{\beta \cos(\theta_i - \theta_j)} \quad (\text{A.12})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^V} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_p d\theta_p \prod_{\langle i,j \rangle} \sum_{n_{ij}=-\infty}^{\infty} I_{n_{ij}}(\beta) e^{in_{ij}(\theta_i - \theta_j)} \quad (\text{A.13})$$

ここでは、キャラクター展開とベッセル関数を用いて、元の自由度 θ とは別の新しい自由度 n を生成し、その代わりに元の自由度 θ を積分することで新しい自由度 n だけが残るテンソルネットワーク表示を導出した。キャラクター展開 $e^{\tau \cos \theta} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} I_n(\tau) e^{in\theta}$ を用いている。また $I_n(\tau)$ はベッセル関数である。そして、ある点 p' の $\theta_{p'}$ を中心にまとめる。

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{(2\pi)^V} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_p d\theta_p \sum_{\{n\}} \prod_{p'} \left(I_{n_{p'i}}(\beta) I_{n_{p'j}}(\beta) I_{n_{p'k}}(\beta) I_{n_{p'l}}(\beta) \right)^{\frac{1}{2}} e^{i\theta_{p'}(n_{p'i} - n_{p'j} - n_{p'k} + n_{p'l})} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^V} \sum_{\{n\}} \prod_p \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_p \left(I_{n_{pi}}(\beta) I_{n_{pj}}(\beta) I_{n_{pk}}(\beta) I_{n_{pl}}(\beta) \right)^{\frac{1}{2}} e^{i\theta_p(n_{pi} - n_{pj} - n_{pk} + n_{pl})} \quad (\text{A.14}) \end{aligned}$$

$$= \sum_{\{n\}} \prod_p \left(I_{n_{pi}}(\beta) I_{n_{pj}}(\beta) I_{n_{pk}}(\beta) I_{n_{pl}}(\beta) \right)^{\frac{1}{2}} \delta_{n_{pi} - n_{pj} - n_{pk} + n_{pl}, 0} \quad (\text{A.15})$$

$$= \sum_{\{n\}} \prod_p A_{n_{pi}n_{pj}n_{pk}n_{pl}}^p \quad (\text{A.16})$$

$$A_{ijkl}^p = \left(I_i(\beta) I_j(\beta) I_k(\beta) I_l(\beta) \right)^{\frac{1}{2}} \delta_{i-j-k+l, 0} \quad (\text{A.17})$$

A.2.2 外部磁場ありのXY模型のテンソルネットワーク表示

前節で説明したXY模型のハミルトニアンに磁化を加え、テンソルネットワーク表示を次のように導いた。[17]

$$Z = \frac{1}{(2\pi)^V} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_k d\theta_k e^{-\beta H} \quad (\text{A.18})$$

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - h \sum_i \cos(\theta_i) \quad (\text{A.19})$$

$$(\text{A.20})$$

$$Z = \frac{1}{(2\pi)^V} \int_{\pi}^{\pi} \prod_k d\theta_k e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) + \beta h \sum_i \cos(\theta_i)} \quad (\text{A.21})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^V} \int_{\pi}^{\pi} \prod_k d\theta_k \prod_{\langle i,j \rangle} e^{-\beta J \cos(\theta_i - \theta_j)} \prod_i e^{\beta h \sum_i \cos(\theta_i)} \quad (\text{A.22})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^V} \int_{\pi}^{\pi} \prod_k d\theta_k \prod_{\langle i,j \rangle} \sum_{n_{ij}=-\infty}^{\infty} I_{n_{ij}}(\beta J) e^{in_{ij}(\theta_i - \theta_j)} \prod_i \sum_{m_i=-\infty}^{\infty} I_{m_i}(\beta h) e^{im_i \theta_i} \quad (\text{A.23})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^V} \int_{\pi}^{\pi} \prod_k d\theta_k \sum_{\{n\}} \prod_{p(i,j,k,l)} (I_{n_{pi}}(\beta J) I_{n_{pj}}(\beta J) I_{n_{pk}}(\beta J) I_{n_{pl}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} e^{i\theta_p(n_{pi} - n_{pj} - n_{pk} + n_{pl})} \prod_i \sum_{m_i=-\infty}^{\infty} I_{m_i}(\beta h) e^{im_i \theta_i} \quad (\text{A.24})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^V} \int_{\pi}^{\pi} \prod_k d\theta_k \sum_{\{n,m\}} \prod_{p(i,j,k,l)} (I_{n_{pi}}(\beta J) I_{n_{pj}}(\beta J) I_{n_{pk}}(\beta J) I_{n_{pl}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{m_p}(\beta h) e^{i\theta_p(n_{pi} - n_{pj} - n_{pk} + n_{pl} + m_p)} \quad (\text{A.25})$$

$$= \sum_{\{n,m\}} \prod_{p(i,j,k,l)} (I_{n_{pi}}(\beta J) I_{n_{pj}}(\beta J) I_{n_{pk}}(\beta J) I_{n_{pl}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{m_p}(\beta h) \frac{1}{(2\pi)} \int_{\pi}^{\pi} d\theta_p e^{i\theta_p(n_{pi} - n_{pj} - n_{pk} + n_{pl} + m_p)} \quad (\text{A.26})$$

$$= \sum_{\{n,m\}} \prod_{p(i,j,k,l)} (I_{n_{pi}}(\beta J) I_{n_{pj}}(\beta J) I_{n_{pk}}(\beta J) I_{n_{pl}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{m_p}(\beta h) \delta_{n_{pi} - n_{pj} - n_{pk} + n_{pl} + m_p, 0}$$

$$= \sum_{\{n\}} \prod_{p(i,j,k,l)} (I_{n_{pi}}(\beta J) I_{n_{pj}}(\beta J) I_{n_{pk}}(\beta J) I_{n_{pl}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{-n_{pi} + n_{pj} + n_{pk} - n_{pl}}(\beta h) \quad (\text{A.27})$$

$$A_{ijkl}^p = (I_i(\beta J) I_j(\beta J) I_k(\beta J) I_l(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{-i+j+k-l}(\beta h) \quad (\text{A.28})$$

$$(\text{A.29})$$

A.2.3 外部磁場ありのXY模型の不純物テンソルを含むテンソルネットワーク表示 (エネルギー計算)

この節では、外部磁場ありのXY模型のハミルトニアンからエネルギーを求めるテンソルネットワーク表示を導出する。

まず、エネルギー $\langle E \rangle$ を次のように分解することができる。

$$\langle E \rangle = \frac{\int_{-\pi}^{\pi} \prod_p d\theta_p H e^{-\beta H}}{Z} \quad (\text{A.30})$$

$$= \frac{\int_{-\pi}^{\pi} \prod_p d\theta_p (\cos(\theta_i - \theta_j)) e^{-\beta H}}{Z} \quad (\text{A.31})$$

$$= \frac{\int_{-\pi}^{\pi} \prod_p d\theta_p \frac{1}{2} (e^{i(\theta_i - \theta_j)} + e^{-i(\theta_i - \theta_j)}) e^{-\beta H}}{Z} \quad (\text{A.32})$$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{\int_{-\pi}^{\pi} \prod_p d\theta_p e^{i(\theta_i - \theta_j)} e^{-\beta H}}{Z} + \frac{\int_{-\pi}^{\pi} \prod_p d\theta_p e^{-i(\theta_i - \theta_j)} e^{-\beta H}}{Z} \right) \quad (\text{A.33})$$

$$= \frac{1}{2} (\langle e^{i(\theta_i - \theta_j)} \rangle + \langle e^{-i(\theta_i - \theta_j)} \rangle) \quad (\text{A.34})$$

$$= \frac{1}{2} (E_+ + E_-) \quad (\text{A.35})$$

ここでの E_{\pm} を次のように定義する。

$$E_{\pm} = \langle e^{\pm i(\theta_i - \theta_j)} \rangle \quad (\text{A.36})$$

E_{\pm} からテンソルネットワーク表示を次のように導いた。

$$E_{\pm} = \frac{1}{(2\pi)^V Z} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_k d\theta_k e^{\pm i(\theta_a - \theta_b)} e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) + \beta h \sum_i \cos(\theta_i)} \quad (\text{A.37})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^V Z} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_k d\theta_k e^{\pm i(\theta_a - \theta_b)} \prod_{\langle i,j \rangle} e^{-\beta J \cos(\theta_i - \theta_j)} \prod_i e^{\beta h \sum_i \cos(\theta_i)} \quad (\text{A.38})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^V Z} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_k d\theta_k e^{\pm i(\theta_a - \theta_b)} \prod_{\langle i,j \rangle} \sum_{n_{ij}=-\infty}^{\infty} I_{n_{ij}}(\beta J) e^{in_{ij}(\theta_i - \theta_j)} \prod_i \sum_{m_i=-\infty}^{\infty} I_{m_i}(\beta h) e^{im_i \theta_i} \quad (\text{A.39})$$

$$= \frac{1}{Z} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_k d\theta_k e^{\pm i(\theta_a - \theta_b)} \sum_{\{n\}} \prod_{p(i,j,k,l)} (I_{n_{pi}}(\beta J) I_{n_{pj}}(\beta J) I_{n_{pk}}(\beta J) I_{n_{pl}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} e^{i\theta_p (n_{pi} - n_{pj} - n_{pk} + n_{pl})} \prod_i \sum_{m_i=-\infty}^{\infty} I_{m_i}(\beta h) e^{im_i \theta_i} \quad (\text{A.40})$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{(2\pi)^V Z} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_k d\theta_k \\
&\quad \sum_{\{n,m\}} \prod_{p(i,j,k,l) \neq a,b} (I_{n_{pi}}(\beta J) I_{n_{pj}}(\beta J) I_{n_{pk}}(\beta J) I_{n_{pl}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{m_p}(\beta h) \\
&\quad (I_{n_{ai}}(\beta J) I_{n_{aj}}(\beta J) I_{n_{ak}}(\beta J) I_{n_{al}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{m_a}(\beta h) \\
&\quad e^{i\theta_a(n_{ai}-n_{aj}-n_{ak}+n_{al}+m_a \pm 1)} \\
&\quad (I_{n_{bi}}(\beta J) I_{n_{bj}}(\beta J) I_{n_{bk}}(\beta J) I_{n_{bl}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{m_b}(\beta h) \\
&\quad e^{i\theta_b(n_{bi}-n_{bj}-n_{bk}+n_{bl}+m_b \mp 1)} \tag{A.41}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{Z} \sum_{\{n,m\}} \prod_{p(i,j,k,l) \neq a,b} \\
&\quad (I_{n_{pi}}(\beta J) I_{n_{pj}}(\beta J) I_{n_{pk}}(\beta J) I_{n_{pl}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{m_p}(\beta h) \\
&\quad \frac{1}{(2\pi)} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_p e^{i\theta_p(n_{pi}-n_{pj}-n_{pk}+n_{pl}+m_p)} \\
&\quad (I_{n_{ai}}(\beta J) I_{n_{aj}}(\beta J) I_{n_{ak}}(\beta J) I_{n_{al}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{m_a}(\beta h) \\
&\quad \frac{1}{(2\pi)} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_a e^{i\theta_a(n_{ai}-n_{aj}-n_{ak}+n_{al}+m_a \pm 1)} \\
&\quad (I_{n_{bi}}(\beta J) I_{n_{bj}}(\beta J) I_{n_{bk}}(\beta J) I_{n_{bl}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{m_b}(\beta h) \\
&\quad \frac{1}{(2\pi)} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_b e^{i\theta_b(n_{bi}-n_{bj}-n_{bk}+n_{bl}+m_b \mp 1)} \tag{A.42}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{Z} \sum_{\{n\}} \prod_{p(i,j,k,l) \neq a,b} \\
&\quad (I_{n_{pi}}(\beta J) I_{n_{pj}}(\beta J) I_{n_{pk}}(\beta J) I_{n_{pl}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{-n_{pi}+n_{pj}+n_{pk}-n_{pl}}(\beta h) \\
&\quad (I_{n_{ai}}(\beta J) I_{n_{aj}}(\beta J) I_{n_{ak}}(\beta J) I_{n_{al}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{-n_{ai}+n_{aj}+n_{ak}-n_{al} \mp 1}(\beta h) \\
&\quad (I_{n_{bi}}(\beta J) I_{n_{bj}}(\beta J) I_{n_{bk}}(\beta J) I_{n_{bl}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{-n_{bi}+n_{bj}+n_{bk}-n_{bl} \pm 1}(\beta h) \tag{A.43}
\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{Z} \sum_{\{n\}} \prod_{p(i,j,k,l) \neq a,b} A_{ijkl}^p \check{A}_{ijkl}^a \check{A}_{ijkl}^b \tag{A.44}$$

$$A_{ijkl}^p = (I_{n_{pi}}(\beta J) I_{n_{pj}}(\beta J) I_{n_{pk}}(\beta J) I_{n_{pl}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{-n_{pi}+n_{pj}+n_{pk}-n_{pl}}(\beta h) \tag{A.45}$$

$$\check{A}_{ijkl}^a = (I_{n_{ai}}(\beta J) I_{n_{aj}}(\beta J) I_{n_{ak}}(\beta J) I_{n_{al}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{-n_{ai}+n_{aj}+n_{ak}-n_{al} \mp 1}(\beta h) \tag{A.46}$$

$$\check{A}_{ijkl}^b = (I_{n_{bi}}(\beta J) I_{n_{bj}}(\beta J) I_{n_{bk}}(\beta J) I_{n_{bl}}(\beta J))^{\frac{1}{2}} I_{-n_{bi}+n_{bj}+n_{bk}-n_{bl} \pm 1}(\beta h) \tag{A.47}$$

付録B テンソルネットワークくりこみ (TNR) 関連

B.1 テンソルネットワークくりこみ (TNR)

2章で説明した基礎的なテンソルくりこみ群 (TRG) はくりこみをくり返すごとに計算精度が著しく悪化し、正しい固定点にくりこまれない可能性が高かった。そのため、その点を改良した手法の1つにテンソルネットワークくりこみ (TNR) とよばれる手法がある。この章では周期境界条件の2次元モデルで TNR のくりこみ方法を説明する。なお、テンソルネットワーク表示の分配関数を用いる。[14]

B.1.1 テンソルネットワークくりこみ (TNR)

図 B.1-1 は各格子点にテンソル A を持つ格子を表している。図 4-2 は格子点の間にディスエンタングラー u とアイソメトリー ω, v を挿入する。ディスエンタングラー u は

$$u_{ijab}u_{lkab}^\dagger = u_{abij}^\dagger u_{ablk} \quad (\text{B.1})$$

$$= M_{(i \otimes j)(a \otimes b)}^r M_{(a \otimes b)(k \otimes l)}^l \quad (\text{B.2})$$

$$= \delta_{(i \otimes j), (k \otimes l)} \quad (\text{B.3})$$

を満たすテンソルである。また、 M^r, M^l は行列である。アイソメトリー ω, v は添字 a, b, c, d の自由度を D とし、添字 i, j の自由度を D^2 であれば、

$$\omega_{iab}\omega_{baj}^\dagger = M_{i(a \otimes b)}^r M_{(a \otimes b)j}^l \quad (\text{B.4})$$

$$= \delta_{i,j} \quad (\text{B.5})$$

$$\omega_{cdi}^\dagger \omega_{iab} = M_{(a \otimes b)i}^r M_{i(c \otimes d)}^l \quad (\text{B.6})$$

$$= \delta_{(a \otimes b), (c \otimes d)} \quad (\text{B.7})$$

を満たし、添字 i, j の自由度を $D_{\text{cut}} < D^2$ であれば、

$$\omega_{iab}\omega_{baj}^\dagger = M_{i(a \otimes b)}^r M_{(a \otimes b)j}^l \quad (\text{B.8})$$

$$= \delta_{i,j} \quad (\text{B.9})$$

$$\omega_{cdi}^\dagger \omega_{iab} = M_{(a \otimes b)i}^r M_{i(c \otimes d)}^l \quad (\text{B.10})$$

$$\neq \delta_{(a \otimes b), (c \otimes d)} \quad (\text{B.11})$$

を満たすテンソルである。このアイソメトリーは基本的なテンソルくりこみ群で説明したテンソル S に相当する役割を持ち、その添字である i, j が次元を落す働きをし、最終的に新しい bond の働きをする。図 B.1-3 は古い bond をすべて総和し、4点を1点としている (図 B.2-a,b を参照)。ここでは TRG とは異なり、2種類のテンソル B, C が生成されている。図 B.1-4 は格子点に特異値分解を行い、新しい bond を生成している。図 B.1-5 は古い bond をすべて総和し、4点を1点にくりこみ、新しいテンソル A^{new} を生成している。この1回の TNR のくりこみにより、格子点の境界条件はくりこみ前のテンソルを持つ格子点と同じになる。

B.1.2 テンソル B, C の生成

図 B.1-2 と図 B.1-3, 図 B.2-a と図 B.2-b で図示されているテンソル A と A を P 変換した \tilde{A} 、アイソメトリー ω, v 、ディスエンタングラー u を用いて、テンソル B とテンソル C を生成している。そして、下記がその生成を式で表したものである。このステップは TRG の1回目の自由度の縮約に相当するステップである。

$$B_{ijkl} = v_{id_2d_1} v_{d_3d_4j}^\dagger \omega_{ld_8d_7} \omega_{d_5d_6k}^\dagger U_{n_1n_8d_7d_2} U_{n_4n_6d_6d_3}^\dagger \\ \times A_{d_1n_2n_3d_2} A_{n_3n_7d_8n_8} \tilde{A}_{d_4n_4n_5n_2} \tilde{A}_{n_5n_6d_5n_7} \quad (\text{B.12})$$

$$C_{ijkl} = \omega_{in_1n_4} \omega_{n_2n_1j}^\dagger v_{n_3n_2k}^\dagger v_{ln_4n_3} \quad (\text{B.13})$$

B.1.3 テンソル B, C の分解

図 B.1-3 と図 B.1-4 で図示されている二つのテンソル B, C を TRG のテンソルの分解と同様に特異値分解し、新しいテンソル A の生成を式で表したものが下記である。このステップは TRG の2回目のテンソルの分解のステップに相当するステップである。

$$B_{ijkl} = M_{(i\otimes j)(k\otimes l)} = U_{(i\otimes j)n} \Sigma_n V_{n(k\otimes l)}^\dagger = S_{ijn}^1 S_{kln}^3 \quad (\text{B.14})$$

$$S_{ijn}^1 = U_{(i\otimes j)n} \sqrt{\Sigma_n}, \quad S_{kln}^3 = \sqrt{\Sigma_n} V_{n(k\otimes l)}^\dagger \quad (\text{B.15})$$

$$C_{ijkl} = \tilde{M}_{(j\otimes k)(l\otimes i)} = \tilde{U}_{(j\otimes k)n} \Sigma_n \tilde{V}_{n(l\otimes i)}^\dagger = S_{jkn}^2 S_{lin}^4 \quad (\text{B.16})$$

$$S_{jkn}^2 = \tilde{U}_{(j\otimes k)n} \sqrt{\Sigma_n}, \quad S_{lin}^4 = \sqrt{\Sigma_n} \tilde{V}_{n(l\otimes i)}^\dagger \quad (\text{B.17})$$

B.1.4 自由度の縮約

図 B.1-4 と図 B.1-5 で図示されている総和は4つのテンソルを1つのテンソルにまとめている。下記の式は4つのテンソル $S^{BR}, S^{BL}, S^{CU}, S^{CD}$ が持つ古い bond を表し

ている添字 a, b, c, d をすべて総和し、残りの新しい bond を表している添字 i, j, k, l で表されるテンソル A_{ijkl}^{new} が生成されている式になる。このステップは TRG の 2 回目の自由度の縮約のステップに相当するステップである。

$$A_{ijkl}^{new} = S_{(b\otimes a)j}^{CU} S_{(c\otimes b)k}^{BR} S_{l(d\otimes c)}^{CD} S_{i(a\otimes d)}^{BL} \quad (\text{B.18})$$

B.1.5 テンソル B, C の分解と自由度の縮約の改良

4 つのアイソメトリー ω, v のみから生成されるテンソル C は行列要素が単純であり、特異値分解すると特異値が重解し、計算精度が悪化する。そのため、本論文ではテンソル C の特異値が重解することを回避し、計算精度を向上する改良を行っている。本節はその改良を説明する。まず、先にテンソル B を特異値分解し、テンソル S^2, S^4 を生成し、テンソル A の特異値 Σ^A の平方根を乗除し、テンソル S'^2, S'^4 を生成する。次にテンソル C にテンソル A の特異値 Σ の平方根を乗除し、テンソル C' を生成する。そのテンソル C' を特異値分解し、テンソル S'^1, S'^3 を生成する。そして、前節で説明された自由度の縮約時に S'^1, S'^2, S'^3, S'^4 を S^1, S^2, S^3, S^4 と再定義して、テンソル A_{ijkl}^{new} を生成する。

$$B_{ijkl} = M_{(i\otimes j)(k\otimes l)} = U_{(i\otimes j)n} \Sigma_n V_{n(k\otimes l)}^\dagger = S_{ijn}^1 S_{kln}^3 \quad (\text{B.19})$$

$$S_{ijn}^1 = U_{(i\otimes j)n} \sqrt{\Sigma_n}, \quad S_{kln}^3 = \sqrt{\Sigma_n} V_{n(k\otimes l)}^\dagger \quad (\text{B.20})$$

$$B'_{ijkl} = \frac{S_{ijn}^1 S_{kln}^3}{\sqrt{\Sigma_i^A \Sigma_j^A \Sigma_k^A \Sigma_l^A}} = S'^1_{ijn} S'^3_{kln} \quad (\text{B.21})$$

$$C'_{ijkl} = C_{ijkl} \sqrt{\Sigma_i^A \Sigma_j^A \Sigma_k^A \Sigma_l^A} \quad (\text{B.22})$$

$$= \tilde{M}_{(j\otimes k)(l\otimes i)} = \tilde{U}_{(j\otimes k)n} \Sigma_n \tilde{V}_{n(l\otimes i)}^\dagger = S'^2_{jkn} S'^4_{lin} \quad (\text{B.23})$$

$$S'^2_{jkn} = \tilde{U}_{(j\otimes k)n} \sqrt{\Sigma_n}, \quad S'^4_{lin} = \sqrt{\Sigma_n} \tilde{V}_{n(l\otimes i)}^\dagger \quad (\text{B.24})$$

$$S'^1_{ijn} = \frac{S_{ijn}^1}{\Sigma_i^A \Sigma_j^A}, \quad S'^3_{kln} = \frac{S_{kln}^3}{\Sigma_k^A \Sigma_l^A} \quad (\text{B.25})$$

B.2 TNR の最適化

TNR を実行する上でアイソメトリーとディスエンタングラーの最適化が重要になる。その最適化に対する理解と方法を記述する。図 B.3 で示した truncation error δ が最小であれば、最適化されたアイソメトリーとディスエンタングラーであると定義する。この δ が数学的の意味を特異値分解を用いて、記述したのが次の計算である。

$$\delta = \|A - B\|^2 \quad (\text{B.26})$$

$$= \text{Tr}\{(A - B)(A - B)^\dagger\} \quad (\text{B.27})$$

$$= \text{Tr}(AA^\dagger + BB^\dagger - BA^\dagger - AB^\dagger) \quad (\text{B.28})$$

$$= \text{Tr}AA^\dagger + \text{tr}BB^\dagger - \text{tr}BA^\dagger - \text{tr}AB^\dagger \quad (\text{B.29})$$

$$= \text{Tr}AA^\dagger - \text{tr}BB^\dagger \quad (\text{B.30})$$

$$\text{Tr}BB^\dagger = \text{tr}BA^\dagger = \text{tr}AB^\dagger \quad (\text{B.31})$$

$$A = U\Sigma^\infty V^\dagger, \quad B = U\Sigma^{Dcut} V^\dagger \quad (\text{B.32})$$

$$= \text{Tr}(U\Sigma^\infty V^\dagger)(U\Sigma^\infty V^\dagger)^\dagger - \text{Tr}(U\Sigma^{Dcut} V^\dagger)(U\Sigma^{Dcut} V^\dagger)^\dagger \quad (\text{B.33})$$

$$= \text{Tr}\Sigma^{\infty 2} - \text{tr}\Sigma^{Dcut 2} \quad (\text{B.34})$$

$$= \Sigma_{Dcut-1}^{\infty 2} + \Sigma_{Dcut-2}^{\infty 2} + \dots + \Sigma_\infty^{\infty 2} \quad (\text{B.35})$$

図で示した各テンソル B_u, B_ω, B_v を特異値分解することでアイソメトリー ω, v とディスエンタングラー u を最適化する。 E は図で示された各ターゲットを除いた部分のテンソルである。

$$B_u = uE_u, \quad B_\omega = \omega E_\omega, \quad B_v = vE_v \quad (\text{B.36})$$

$$E_u = \omega v AA \quad (\text{B.37})$$

$$E_\omega = uv AA \quad (\text{B.38})$$

$$E_v = \omega u AA \quad (\text{B.39})$$

そのテンソル E を特異値分解し、その分解で得られたユニタリ行列 U, V を用いて、ディスエンタングラー u の更新を以下のように行うことによって、ディスエンタングラーの最適解を導けると考えている。同様な方法を用いて、アイソメトリーの最適化も行う。

$$\text{Tr}(B_u^{new} B_u^\dagger) = \text{Tr}(u_{new} E_u u_{old}^\dagger E_u^\dagger) \quad (\text{B.40})$$

$$= \text{Tr}(u_{new} U \Sigma_u V^\dagger) \quad (\text{B.41})$$

$$\text{if } u_{new} = V U^\dagger \quad (\text{B.42})$$

$$= \text{Tr}(\Sigma_u) \rightarrow \max \quad (\text{B.43})$$

B.3 軸対称なテンソルネットワーク (P 変換可能なテンソルネットワーク)

TNR を実行する場合、テンソル A を P 変換したテンソル \tilde{A} をテンソルネットワーク内に取り込む。その取り込み方はテンソルネットワーク全体が軸対称になっている必要がある。[16]

B.3.1 Ising 模型

Ising 模型の場合はテンソル A が P 変換したテンソル \tilde{A} と同じであり、テンソルネットワーク内にあるテンソル A をテンソル \tilde{A} と入れ替えれば、問題ない。

$$A_{ijkl}^p = A_{ilkj}^p \quad (\text{B.44})$$

B.3.2 XY 模型

XY 模型の場合はテンソル A が P 変換したテンソル \tilde{A} と同じではない。そのため、Ising 模型と同じように単純にテンソル A と入れ替えることはできない。

$$A_{ijkl}^p \neq A_{ilkj}^p \quad (\text{B.45})$$

今回は分配関数からの計算を工夫し、テンソルネットワークが軸対称になるテンソルネットワークを導く。

$$Z = \frac{1}{(2\pi)^V} \int_{-\pi}^{\pi} \prod_p d\theta_p \prod_{\langle i,j \rangle} e^{\beta \cos(\theta_i - \theta_j)} \quad (\text{B.46})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{(2\pi)^V} \sum_{\{n\}} \prod_{p_1} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_{p_1} (I_{p_1 i}(\beta) I_{p_1 j}(\beta) I_{p_1 k}(\beta) I_{p_1 l}(\beta))^{\frac{1}{2}} e^{i\theta_{p_1} (n_{p_1 i} - n_{p_1 j} - n_{p_1 k} + n_{p_1 l})} \\ &\quad \times \prod_{p_2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_{p_2} (I_{p_2 i}(\beta) I_{p_2 j}(\beta) I_{p_2 k}(\beta) I_{p_2 l}(\beta))^{\frac{1}{2}} e^{i\theta_{p_2} (-n_{p_2 i} - n_{p_2 j} + n_{p_2 k} + n_{p_2 l})} \end{aligned} \quad (\text{B.47})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{V}{2}}} \sum_{\{n\}} \prod_{p_1} A_{ijkl}^{p_1} \times \prod_{p_2} \int_{-\pi}^{\pi} d(-\theta_{p_2}) (I_{p_2 i}(\beta) I_{p_2 j}(\beta) I_{p_2 k}(\beta) I_{p_2 l}(\beta))^{\frac{1}{2}} \\ &\quad e^{i(-\theta_{p_2}) (-n_{p_2 i} - n_{p_2 j} + n_{p_2 k} + n_{p_2 l})} \end{aligned} \quad (\text{B.48})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{V}{2}}} \sum_{\{n\}} \prod_{p_1} A_{ijkl}^{p_1} \quad (\text{B.49})$$

$$\times \prod_{p_2} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta_{p_2} (I_{p_2 i}(\beta) I_{p_2 j}(\beta) I_{p_2 k}(\beta) I_{p_2 l}(\beta))^{\frac{1}{2}} e^{i\theta_{p_2} (n_{p_2 i} + n_{p_2 j} - n_{p_2 k} - n_{p_2 l})} \quad (\text{B.50})$$

$$= \sum_{\{n\}} \prod_{p_1} A_{ijkl}^{p_1} \quad (\text{B.51})$$

$$\times \prod_{p_2} (I_{p_2 i}(\beta) I_{p_2 j}(\beta) I_{p_2 k}(\beta) I_{p_2 l}(\beta))^{\frac{1}{2}} \delta_{n_{p_2 i} + n_{p_2 j} - n_{p_2 k} - n_{p_2 l}, 0} \quad (\text{B.52})$$

$$= \sum_{\{n\}} \prod_{p_1} A_{ijkl}^{p_1} \prod_{p_2} \tilde{A}_{ijkl}^{p_2} \quad (\text{B.53})$$

$$A_{ijkl}^p = \tilde{A}_{ilkj}^p \quad (\text{B.54})$$

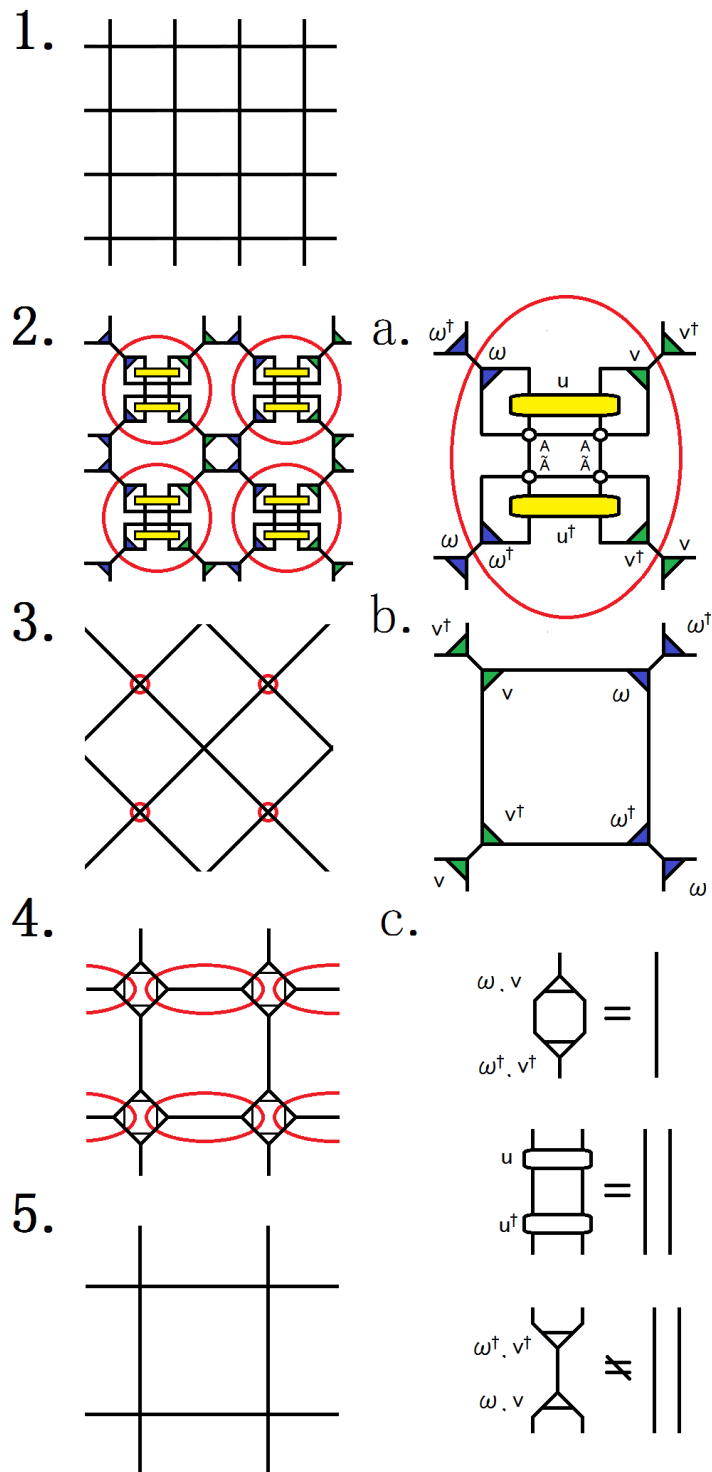


図 B.1: TNR のくりこみ過程

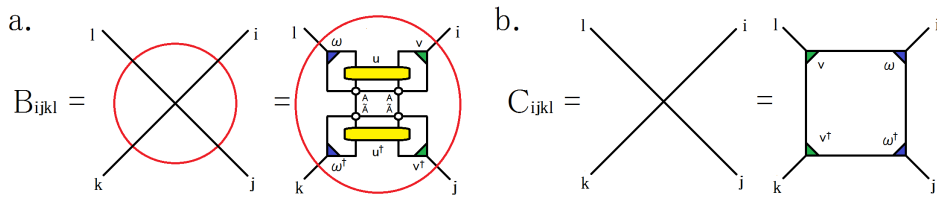


図 B.2: TNR のテンソル B, C の生成

1. $\delta_u = \left| \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \\ \text{---} \text{---} \end{array} - \begin{array}{c} \omega^t \quad \omega \\ \text{---} \text{---} \\ | \quad | \\ \text{---} \text{---} \\ \omega \quad \omega^t \end{array} \right| = |A - B_u|$

2. $\delta_\omega = \left| \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \\ \text{---} \text{---} \end{array} - \begin{array}{c} \omega^t \quad \omega \\ \text{---} \text{---} \\ | \quad | \\ \text{---} \text{---} \\ \omega \quad \omega^t \end{array} \right| = |A - B_\omega|$

3. $\delta_v = \left| \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \\ \text{---} \text{---} \end{array} - \begin{array}{c} \omega^t \quad \omega \\ \text{---} \text{---} \\ | \quad | \\ \text{---} \text{---} \\ \omega \quad \omega^t \end{array} \right| = |A - B_v|$

a. $\delta = \left| \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \\ | \quad | \\ \text{---} \text{---} \end{array} - \begin{array}{c} \omega^t \quad \omega \\ \text{---} \text{---} \\ | \quad | \\ \text{---} \text{---} \\ \omega \quad \omega^t \end{array} \right| = |A - B|$

図 B.3: TNR の最適化時に用いる truncation error の図

付録C 平均場理論による相関関数

5章で用いた相関関数のフィット関数を Landau 理論を用いて、導出する。まず、Landau 理論の理解のために臨界指数 $\beta, \alpha, \delta, \gamma$ を磁化の対称性から得た自由エネルギーから求める。次に磁化に空間依存性を持つとして Landau 理論を拡張した理論を用いて、相関関数を導出する。[19]

C.1 Landau 理論

Landau 理論は平均場理論の一種である。磁化の対称性だけを用いて、自由エネルギーを磁化の関数として定義し、その最小値が熱平衡状態を実現するという条件を用いて、臨界現象を解析する。

すべてのスピン変数 s_i の符号を反転すると磁化 m の符号が変わる。しかし、ハミルトニアン (A.2) は外部磁場 h がゼロである場合、すべてのスピン変数 s_i の符号を反転しても符号は変えない。従って、自由エネルギーもスピン変数の反転に対して不変だと思えることができる。これを大局的な反転対称性という。これは磁化 m の関数としての単位体積あたりの自由エネルギー $f(m)$ は偶関数であることを意味している。

臨界温度付近では磁化 m は十分小さいと考えるべきであり、自由エネルギーは $m = 0$ のまわりは偶数べきで展開できる。この展開を Landau 展開という。

$$f = f_0 + am^2 + bm^4 + O(m^6) \quad (\text{C.1})$$

a, b, f_0 は定数である。しかし、温度依存性を持つ。また、6次以上の高次の項を無視する。自由度エネルギー f の最小値の時に熱平衡状態が実現する。そのためには $b > 0$ である必要がある。また、 $a < 0$ である場合、最小値が $m = 0$ からずれたところに現れる。この時にすべてのスピン変数の反転すると自由エネルギーの符号は変わらないが、磁化 $m \neq 0$ の符号が異なるどちらかの状態が実現される。これを自発的対称性の破れという。

$a = 0$ を境にして自由エネルギー $f(m)$ の最小値を取る磁化 m の場所がゼロからノンゼロに変化するので、 $a = 0$ が臨界点 $T = T_c$ に相当する。そのため、 $a = k(T - T_c)/T_c = kt, t = (T - T_c)/T_c$ とする。つまり、 $a < 0$ は低温、 $a > 0$ は高温に相当する。

では、この Landau 理論を用いて、臨界指数 $\beta, \alpha, \delta, \gamma$ を求める。まずは、臨界指数 β を求めるために、実現する磁化 m_0 を求める。そのためには、低温 $a < 0$ の自

由エネルギーを磁化 m で微分し、ゼロになる磁化 m が実現する磁化 m_0 であると考える。

$$\frac{df}{dm} = 2am + 4bm^3 \quad (\text{C.2})$$

$$= 4bm \left(m + i\sqrt{\frac{a}{2b}} \right) \left(m - i\sqrt{\frac{a}{2b}} \right) = 0 \quad (\text{C.3})$$

$$m = 0, \pm i\sqrt{\frac{a}{2b}} \quad (\text{C.4})$$

$$m_0 = \sqrt{\frac{T - T_c}{2bT_c}} \quad (\text{C.5})$$

$$\propto \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{\beta = \frac{1}{2}} \quad (\text{C.6})$$

よって、 $\beta = 1/2$ である。

次に、臨界指数 α を求めるために、自由エネルギー f の最小値を温度で二階微分して比熱 C を求める必要がある。そこで臨界温度の時 ($m_0 = k(T - T_c)/T_c$) の自由エネルギー f は次のように求まる。

$$f = f_0 + am_0^2 + bm_0^4 = f_0 - \frac{k^2(T - T_c)^2}{4bT_c^2} \quad (\text{C.7})$$

$$C \propto \frac{d^2}{dT} f = \text{Constant} \quad (\text{C.8})$$

$$\propto |t|^{\alpha=0} \quad (\text{C.9})$$

この自由エネルギーを温度で二階微分することで定数が得られる。つまり、比熱は定数になる。これにより、 $\alpha = 0$ である。

さらに、臨界指数 δ を求めるために、自由エネルギーに外部磁場 h の項 $-hm$ を加え、磁化で一階微分する。

$$\frac{df}{dm} = 2am + 4bm^3 - hm = 0 \quad (\text{C.10})$$

$$h \propto m^{\delta=3} \quad (T = T_c) \quad (\text{C.11})$$

$T = T_c$ の時に $a = 0$ である。これにより、臨界指数 $\delta = 3$ である。

最後に臨界指数 γ を求めるために、式 (C.11) を用いて、 $\chi = \frac{dm}{dh}$ を求める。

$$\chi = \frac{dm}{dh} = \frac{1}{\frac{dh}{dm}} = \frac{1}{2a + 12bm^2} \quad (\text{C.12})$$

これにより、 $T > T_c$ ($a > 0$), $m = 0$ では χ は次のようになる。

$$\chi = \frac{1}{2a} = \frac{T_c}{2k(T - T_c)} \propto \left(\frac{T_c}{T - T_c} \right)^{\gamma=1} \quad (\text{C.13})$$

また、 $T < T_c$ ($a < 0$), $m = \sqrt{\frac{k(T_c - T)}{2bT_c}}$ では χ は次のようになる。

$$\chi = \frac{1}{2a + 12bm^2} = \frac{T_c}{4k(T_c - T)} \propto \left(\frac{T_c}{T - T_c} \right)^{\gamma' = 1} \quad (\text{C.14})$$

以上により、 $\gamma, \gamma' = 1$ である。なお、Landau 理論は空間次元やスピンの成分数を考慮していないため、この臨界指数は一般的には正しいものではない。

C.2 相関関数

Landau 理論はそのままの形では相関関数の振る舞いを明かにすることはできないため、磁化 m が空間依存性を持つとして理論を拡張する。空間依存性を持つ磁化 $m(\mathbf{r})$ は、位置 \mathbf{r} まわりのいくつかのスピン変数の値の平均値を表している。この時、相関関数 $G(\mathbf{r})$ は次のように表される。

$$G(\mathbf{r}) = \langle m(\mathbf{r})m(0) \rangle \quad (\text{C.15})$$

そして、Landau 理論の自由エネルギーを拡張して、次のように全体積の自由エネルギー F を定義する。

$$F = \int d\mathbf{r} a m(\mathbf{r})^2 + b(\nabla m(\mathbf{r}))^2 \quad (\text{C.16})$$

ここでの a は $a = kt$ であり、 $b > 0$ である。また、 $(\nabla m(\mathbf{r}))^2$ の項は強磁性的相互作用に相当する項である。このように定義された自由エネルギー F は 2 次項のみから構成されているために Gauss 模型と呼ばれる。

相関関数を求めるために、次のような磁化 $m(\mathbf{r})$ のフーリエ変換を用いる。

$$m(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \tilde{m}(\mathbf{q}), \quad (\text{C.17})$$

$$m(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} m(\mathbf{r}), \quad (\text{C.18})$$

$$\delta(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{C.19})$$

上式を用いると自由エネルギー F は次のように表すことができる。

$$F = \int d\mathbf{r} a m(\mathbf{r})^2 + b(\nabla m(\mathbf{r}))^2 \quad (\text{C.20})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int d\mathbf{r} d\mathbf{q} d\mathbf{q}' (a + bq^2) m(\mathbf{q}) m(\mathbf{q}') e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{q}')\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{C.21})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{q} d\mathbf{q}' (a + bq^2) m(\mathbf{q}) m(\mathbf{q}') \delta((\mathbf{q} + \mathbf{q}')) \quad (\text{C.22})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{q} (a + bq^2) m(\mathbf{q}) m(-\mathbf{q}) \quad (\text{C.23})$$

これらの変換を用いて、相関関数 $G(\mathbf{r})$ を求める。

$$G(\mathbf{r}) = \langle m(\mathbf{r})m(0) \rangle = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{q} \langle \tilde{m}(\mathbf{q})\tilde{m}(-\mathbf{q})e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \rangle \quad (\text{C.24})$$

磁化 $m(\mathbf{r})$ は実数であるので、 $\tilde{m}(-\mathbf{q}) = \tilde{m}(\mathbf{q})^*$ である。よって、

$$\langle \tilde{m}(\mathbf{q})\tilde{m}(-\mathbf{q})e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \rangle = \langle |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2 \rangle \equiv \tilde{G}(\mathbf{q}) \quad (\text{C.25})$$

を求めれば、相関関数を求めることになる。 $|\tilde{m}(\mathbf{q})| \equiv y_q$ とする。

そして、自由エネルギー F は粗視化されたハミルトニアンであるとする、次のように $\tilde{G}(\mathbf{q})$ を表すことができる。

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) = \frac{\int \prod_{\mathbf{q}'} d\tilde{m}(\mathbf{q}') |\tilde{m}(\mathbf{q})|^2 e^{-\beta F}}{\int \prod_{\mathbf{q}'} d\tilde{m}(\mathbf{q}') e^{-\beta F}} \quad (\text{C.26})$$

$$= \frac{\int \prod_{\mathbf{q}'} dy_{\mathbf{q}'} y_{\mathbf{q}}^2 e^{-\beta F}}{\int \prod_{\mathbf{q}'} dy_{\mathbf{q}'} e^{-\beta F}} \quad (\text{C.27})$$

波数 \mathbf{q} 以外についての積分を実行すると、分子と分母で打ち消し合い、次のように計算される。

$$\tilde{G}(\mathbf{q}) = \frac{\int \prod_{\mathbf{q}} dy_{\mathbf{q}} y_{\mathbf{q}}^2 e^{-\beta c_{\mathbf{q}} y_{\mathbf{q}}^2}}{\int \prod_{\mathbf{q}} dy_{\mathbf{q}} e^{-\beta c_{\mathbf{q}} y_{\mathbf{q}}^2}} = \frac{1}{2\beta c_{\mathbf{q}}} = \frac{(2\pi)^d T}{2(kt + b\mathbf{q}^2)} \quad (\text{C.28})$$

ここでの $c_{\mathbf{q}} = (kt + b\mathbf{q}^2)/(2\pi)^d$ である。そして、元の空間依存性を持つ相関関数は次のように表される。

$$G(\mathbf{r}) = \frac{T}{2} \int d\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{1}{kt + b\mathbf{q}^2} \quad (\text{C.29})$$

上式を次のように整理する。

$$G(\mathbf{r}) = \frac{T}{2b} g(\mathbf{r}) \quad (\text{C.30})$$

$$g(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{q} e^{iq_1 r_1 + q_2 r_2 + q_3 r_3 + \dots + q_d r_d} \frac{1}{w^2 + \mathbf{q}^2} \quad (\text{C.31})$$

ここでの $w = \sqrt{\frac{kt}{b}}$ である。ここで次の関係式を用いる。

$$\frac{1}{k} = \int_0^\infty du e^{-ku} \quad (\text{C.32})$$

この上式を用いると、次のように積分を実行することができる。

$$g(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{q} e^{iq_1 r_1 + q_2 r_2 + q_3 r_3 + \dots + q_d r_d} \frac{1}{w^2 + \mathbf{q}^2} \quad (\text{C.33})$$

$$= \int d\mathbf{q} \int du e^{-(w^2 + \mathbf{q}^2)u} e^{iq_1 r_1 + q_2 r_2 + q_3 r_3 + \dots + q_d r_d} \quad (\text{C.34})$$

$$= \int d\mathbf{q} \int du e^{-w^2 u} e^{-q_1^2 u + iq_1 r_1} e^{-q_2^2 u + iq_2 r_2} \dots e^{-q_d^2 u + iq_d r_d} \quad (\text{C.35})$$

$$= \int du e^{-w^2 u} e^{-(q_1 + i\frac{r_1}{2u})^2 u - \frac{r_1^2}{4u}} e^{-(q_2 + i\frac{r_2}{2u})^2 u - \frac{r_2^2}{4u}} \dots e^{-(q_d + i\frac{r_d}{2u})^2 u - \frac{r_d^2}{4u}} \quad (\text{C.36})$$

$$= \int du e^{-w^2 u - \frac{r^2}{4u}} \left(\frac{\pi}{u}\right)^{\frac{d}{2}} \quad (\text{C.37})$$

ここで、次のような第二種変形ベッセル関数を代入する。さらに、 r が十分大きいと考えると次のように表される。

$$K_{\frac{d}{2}-1}(z) = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2}z\right)^{\frac{d}{2}-1} \int_0^\infty du e^{-t - \frac{z^2}{4u}} u^{-\frac{d}{2}} \quad (\text{C.38})$$

$$\sim \sqrt{\frac{\pi}{2}} z^{-\frac{1}{2}} e^{-z}, \quad z \gg d \quad (\text{C.39})$$

$g(\mathbf{r})$ は次のように求めることができる。

$$g(\mathbf{r}) = \int du e^{-w^2 u - \frac{r^2}{4u}} \left(\frac{\pi}{u}\right)^{\frac{d}{2}} \quad (\text{C.40})$$

$$= \int du e^{-u' - \frac{w^2 r^2}{4u'}} \left(\frac{\pi w^2}{u'}\right)^{\frac{d}{2}} \quad (\text{C.41})$$

$$= 2 (\pi w^2)^{\frac{d}{2}} \left(\frac{1}{2}r\right)^{1-\frac{d}{2}} K_{\frac{d}{2}-1}(w\mathbf{r}) \quad (\text{C.42})$$

$$\sim 2 (\pi w^2)^{\frac{d}{2}} \left(\frac{1}{2}r\right)^{1-\frac{d}{2}} \sqrt{\frac{\pi}{2}} (w\mathbf{r})^{-\frac{1}{2}} e^{-w\mathbf{r}} \quad (\text{C.43})$$

$$\propto r^{-(d-1)/2} \exp\left(-\frac{r}{\sqrt{\frac{b}{kt}}}\right) \quad (\text{C.44})$$

$$\propto r^{-(d-1)/2} e^{-r/\xi} \quad (\text{C.45})$$

ここでは $u' = w^2 u$ である。そして、臨界指数 nu は次のように得られる。

$$\xi = \left(\frac{b}{kt}\right)^{\nu=1/2} \quad (\text{C.46})$$

また、臨界温度直上 $t = 0$ では、式 (C.29) での \mathbf{q} を $1/r$ とするし、積分すると次のように相関関数を求めることができる。

$$G(\mathbf{r}) \propto r^{-d+2} = r^{-d+2+\eta=0} \quad (\text{C.47})$$

臨界指数 η はゼロである。

以上により、5章で相関関数から相関長 ξ を抽出するフィット関数 (C.45) を拡張された Landau 理論から導出することができた。

付録D 2次元Ising模型の厳密解について

この章では、2次元Ising模型の厳密解の先行研究の成果を説明する。まず、2次元Ising模型の臨界温度を双対性を用いて得ることに成功したクラマース=ワニア双対性 (Kramers-Wannier duality) についてを説明する。そして、クラマース=ワニア双対性の発見後、1944年に初めて2次元Ising模型の厳密解を求めることに成功したラース・オンサーガー (Lars. Onsager) 氏の解法を簡単に説明する。2次元Ising模型の厳密解の解法の詳細は彼らの論文に任せ、本論文では1次元Ising模型の厳密解の解法を説明する。最後に2点相関関数の解法の先行研究を紹介する。

1節ではクラマース=ワニア双対性の導出を説明する。2節ではオンサーガー氏の求めた外場なしの2次元Ising模型の厳密解の結果を紹介し、外場なしの1次元Ising模型の厳密解を導出する。最後に3節では2点相関関数の先行研究を紹介する。

D.1 クラマース=ワニア双対性

クラマース=ワニア双対性は1941年にヘンドマック・クラマース (Hendrik Kramers) とグレゴリー・ワニア (Gregory Wannier) が発見した双対性である [20]。この双対性は二つの異なる2次元正方格子Ising模型の自由エネルギーを関連付ける双対性である。具体的にはこの双対性は低温から高温へ、また高温から低温への変換が可能であることを示している。その結果、2次元正方格子Ising模型の臨界温度の正確な値を求めることに成功した。

クラマース=ワニア双対性の簡単な説明をする。まず、二つの異なる2次元正方格子Ising模型のハミルトニアン H_1, H_2 を次のように定義する。

$$H_1 = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \quad (D.1)$$

$$H_2 = J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \quad (D.2)$$

スピン $s_i = \pm 1$ 、 J_1, J_2 はそれぞれの最近接の結合定数である。この時、クラマース=ワニア双対性は次のように表される。

$$\sinh(2\beta J_1) \sinh(2\beta J_2) = 1 \quad (D.3)$$

$\beta = 1/T$ は温度 T の逆数である。

ここで「相転移はある一点の温度のみに起こる」と仮定し、臨界温度 $\beta_c = \beta J_1 = \beta J_2$ とする。

$$\sinh(2\beta_c) = 1 \quad (D.4)$$

$$T_c = 1/\beta_c = 2/\ln(\sqrt{2} + 1) \quad (D.5)$$

よって、2次元正方格子の臨界温度 $T_c = 2/\ln(\sqrt{2} + 1)$ であることがわかる。

D.1.1 クラマース=ワニア双対性の導出

クラマース=ワニア双対性の導出についてを説明する。

まず、ハミルトニアン H_1 と分配関数 Z_1 を次のように定義する。

$$H_1 = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \quad (D.6)$$

$$Z_1(\beta, J_1) = \sum_{\{s\}} e^{\beta H_1} \quad (D.7)$$

スピン $s_i = \pm 1$ である。

次に高温展開し、 $e^{\beta J_1 s_i s_j} = \cosh(\beta J_1) + s_i s_j \sinh(\beta J_1)$ を次のように代入する。

$$Z_1(\beta, J_1) = \sum_{\{s\}} e^{\beta H_1} \quad (D.8)$$

$$= \sum_{\{s\}} \prod_{\langle i,j \rangle} e^{\beta J_1 s_i s_j} \quad (D.9)$$

$$= \sum_{\{s\}} \prod_{\langle i,j \rangle} (\cosh(\beta J_1) + s_i s_j \sinh(\beta J_1)) \quad (D.10)$$

$$= (\cosh(\beta J_1))^{2V} \sum_{\{s\}} \prod_{\langle i,j \rangle} \sum_{n=0}^1 (s_i s_j \tanh(\beta J_1))^n \quad (D.11)$$

V は体積である。ここでスピン s_i は次のように表すことができる。

$$\sum_{s=\pm 1} s^{1,3,5,\dots} = 0, \quad \sum_{s=\pm 1} s^{2,4,6,\dots} = 2 \quad (D.12)$$

この上記の結果を考えると次のような分配関数を得ることができる。

$$Z = 2^V (\cosh(\beta J_1))^{2V} \sum_{l:\text{loops}} (\tanh(\beta J_1))^l \quad (D.13)$$

l は格子リンク上のループの集合を表していて、そのループの長さによって、 l の値が異なる。この l は次のように表せ、新しいスピン τ を定義することができる。

$$l = \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{2} (1 - \tau_i \tau_j) \quad (D.14)$$

この関係を用いると次のような分配関数が得られる。

$$Z_1(\beta, J_1) = 2^V (\cosh(\beta J_1))^{2V} \sum_{l:\text{loops}} (\tanh(\beta J_1))^l \quad (\text{D.15})$$

$$= 2^V (\cosh(\beta J_1))^{2V} \sum_{\{\tau\}} (\tanh(\beta J_1))^{\sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{2}(1-\tau_i \tau_j)} \quad (\text{D.16})$$

$$= 2^V (\cosh(\beta J_1))^{2V} (\tanh(\beta J_1))^V \sum_{\{\tau\}} (\tanh(\beta J_1))^{-\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\tau_i \tau_j)}$$

$$= (\sinh(2\beta J_1))^V \sum_{\{\tau\}} (\tanh(\beta J_1))^{-\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\tau_i \tau_j)} \quad (\text{D.17})$$

そして、次のように再定義する。

$$e^{-2\beta J_2} = \tanh(\beta J_1) \quad (\text{D.18})$$

その結果、異なる二つの2次元正方格子 Ising 模型の分配関数の関係式を求めることができる。

$$Z_2(\beta, J_2) = \sum_{\{\tau\}} e^{J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} (\tau_i \tau_j)} \quad (\text{D.19})$$

$$Z_1(\beta, J_2) = (\sinh(2\beta J_1))^V Z_2(\beta, J_2) \quad (\text{D.20})$$

両辺に $(\sinh(2\beta J_1))^{V/2} = 1/(\sinh(2\beta J_2))^{V/2}$ をかけることにより、次のように表すことができる。

$$\frac{Z_1(\beta, J_2)}{(\sinh(2\beta J_1))^{V/2}} = \frac{Z_2(\beta, J_2)}{(\sinh(2\beta J_2))^{V/2}} \quad (\text{D.21})$$

この上記の式を用いて、1格子点あたりの自由エネルギー $f = \frac{1}{\beta V} \ln(Z)$ を求める。

$$\beta f_1(\beta, J_1) \frac{1}{2} (\sinh(2\beta J_1)) = \beta f_2(\beta, J_2) + \frac{1}{2} (\sinh(2\beta J_2))$$

この双対変換を見ると、低温と高温が入れ替わっていることがわかる。

$$\sinh(2\beta J_1) = 1/\sinh(2\beta J_2) \quad (\text{D.22})$$

そして、2次元 Ising 模型の相転移はある一つの温度のみに起こると考えると次のように臨界温度 $T_c = 1/\beta_c$ を得ることができる。

$$1 = \sinh(2\beta_c) \sinh(2\beta_c) \quad (\text{D.23})$$

$$T_c = \beta_c = 2/\ln(\sqrt{2} + 1) \quad (\text{D.24})$$

$\beta_c = \beta J_1 = \beta J_2$ である。

D.2 オンサーガー (Onsager) の解析

ラース・オンサーガー (Lars Onsager) 氏は 1944 年に初めて 2 次元 Ising 模型の厳密解 [21] を発見した。その後、Kaufman 氏や Nambu 氏、Kac 氏, Ward 氏, Potts 氏, Schultz 氏, Mattis 氏, Lieb 氏 [23, 24, 25, 26, 27] が異なる解法を見つけることに成功した。今回は 2 次元 Ising 模型の厳密解のオンサーガー氏の解法を簡単に説明する。具体的な詳細は彼らの論文に任せたいと思う。その代わりに 1 次元 Ising 模型の解法を説明する。

D.2.1 2 次元 Ising 模型の厳密解の解法の説明と結果

まず、2 次元 Ising 模型のハミルトニアン H と分配関数 Z を次のように定義する。

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \quad (\text{D.25})$$

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-\beta H} \quad (\text{D.26})$$

スピン $s_i = \pm 1$ である。

次に分配関数を整理し、行列 V を定義する。

$$Z = \sum_{\{s\}} \prod_{\langle i,j \rangle} (e^{\beta s_i s_j}) \quad (\text{D.27})$$

$$= \sum_{\{s\}} \prod_i (e^{\beta s_i s_{i+\hat{\mu}}}) (e^{\beta s_i s_{i+\hat{\nu}}}) \quad (\text{D.28})$$

$$= \sum_{\{s\}} \prod_i (e^{\beta U_1(\mu_i)}) (e^{\beta U_2(\mu_i, \mu_{i+1})}) \quad (\text{D.29})$$

$$= \sum_{\{\mu\}} \prod_i V(\mu_i, \mu_{i+1}) \quad (\text{D.30})$$

$$= \text{Tr} V(\mu_i, \mu_{i+1})^V \quad (\text{D.31})$$

V は体積である。 $\hat{\mu}$ は右ベクトル、 $\hat{\nu}$ は上ベクトルである。行列 V と U_1, U_2 は次のように定義する。

$$V(\mu_i, \mu_{i+1}) = (e^{\beta U_1(\mu_i)}) (e^{\beta U_2(\mu_i, \mu_{i+1})}) \quad (\text{D.32})$$

$$U_1(\mu_i) = s_i s_{i+\hat{\mu}} \quad (\text{D.33})$$

$$U_2(\mu_i, \mu_{i+1}) = s_i s_{i+\hat{\nu}} \quad (\text{D.34})$$

U_1 は層内のエネルギーを表し、 U_2 は層間のエネルギーを表している。行列 V は次のように考えると、 $2^N \times 2^N$ 行列と見ることができる。

$$V(\mu_i, \mu_j) = \langle \mu_i | V | \mu_j \rangle = V_{ij} \quad (\text{D.35})$$

$i, j = 1, 2, \dots, N$ である。この行列 V を固有値分解することで次のような分配関数を得られる。

$$Z = \text{Tr}V(\mu_i, \mu_{i+1})^V \quad (\text{D.36})$$

$$= \sum_{m=1}^{2^N} (\lambda_m)^V \quad (\text{D.37})$$

$$\sim (\lambda_0)^V \quad (\text{D.38})$$

この固有値 λ_0 を求めることにより、次のような分配関数を得られる。

$$\ln(Z)/V = \ln(2) - \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\omega d\omega' \ln(\cosh^2(2\beta) - \sinh(2\beta)(\cos(\omega) + \cos(\omega')))$$

そして、磁化 M もこのように求めることができる [22, 28]。

$$M = (1 - (\sinh(2J_1\beta) \sinh(2J_2\beta))^{-2})^{1/8} \quad (\text{D.39})$$

D.2.2 1次元 Ising 模型の厳密解の解法

2次元 Ising 模型よりも容易な 1次元 Ising 模型の厳密解の解法を説明する。

まず、1次元 Ising 模型のハミルトニアンと分配関数を次のように定義する。

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \quad (\text{D.40})$$

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-\beta H} \quad (\text{D.41})$$

$$= \sum_{\{s\}} \prod_{\langle i,j \rangle} e^{\beta s_i s_j} \quad (\text{D.42})$$

スピン $s_i = \pm 1$ である。

行列 V を次のように定義する。

$$\langle s_i | V | s_j \rangle = e^{\beta s_i s_j} \equiv V_{s_i s_j} \quad (\text{D.43})$$

$$V = V^T = \begin{pmatrix} e^\beta & e^\beta \\ e^{-\beta} & e^{-\beta} \end{pmatrix} \quad (\text{D.44})$$

また、 V はパウリ行列を用いて、次のように表すことができる。

$$V = e^\beta (I + \sigma_x e^{-2\beta}) \quad (\text{D.45})$$

$$V = 2 \sinh^{1/2}(2\beta) e^{\beta' \sigma^x} \quad (\text{D.46})$$

$\tanh(\beta') = e^{2\beta}$, $\tanh(\beta) = e^{2\beta'}$, $\sinh(\beta) \sinh(\beta) = 1$ を用いた。

次に行列 V を固有値分解を行うことで次のような分配関数を得られる。

$$Z = \text{Tr} \begin{pmatrix} e^\beta & e^\beta \\ e^{-\beta} & e^{-\beta} \end{pmatrix}^V \quad (\text{D.47})$$

$$= \text{Tr} \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}^V \quad (\text{D.48})$$

$$= \lambda_+^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^V \right] \quad (\text{D.49})$$

固有値 $\lambda_+ > \lambda_-$ より、 $V \rightarrow \infty$ の場合、次のような分配関数を得られる。

$$Z = \lambda_+^N \quad (\text{D.50})$$

行列 V の固有値 $\lambda_{+,-}$ の値は次のような結果である。

$$\lambda_+ = e^\beta + e^{-\beta} = 2 \cosh(\beta) \quad (\text{D.51})$$

$$\lambda_- = e^\beta - e^{-\beta} \quad (\text{D.52})$$

以上より、1次元 Ising 模型の分配関数 Z と自由エネルギー F は次のように得られる。

$$Z = (2 \cosh(\beta))^V \quad (\text{D.53})$$

$$\beta F = -V \ln(2 \cosh(\beta)) \quad (\text{D.54})$$

D.3 2点相関関数

2点相関関数はテプリッツ行列を用いて、1966年に Tai.Tsun.Wu 氏に解かれ、最近では2006年に I.Lyberg 氏と B.M.McCoy 氏によって研究されている。本論文ではその結果を紹介し、具体的な詳細は彼らの論文 [29, 30] に任せたいと思う。

臨界温度と各相 (高温相・低温相) の2点相関関数は次のように得られる。

$$S_r = \langle s_{(0,0)} s_{(r,r)} \rangle \quad (\text{D.55})$$

$$T = T_c, \quad S_r \simeq \left(1 - \frac{1}{64r^2} \right) r^{-1/4} \quad (\text{D.56})$$

$$T < T_c, \quad S_r \simeq \left(1 + \frac{\frac{T}{T_c} e^{-r/\xi}}{(\pi r)^2 \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{-1/4}} \right) \quad (\text{D.57})$$

$$T > T_c, \quad S_r \simeq \frac{e^{-\frac{r}{2\xi}}}{r^2 \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{1/4}} \quad (\text{D.58})$$

なお、本研究では T を固定し、 r が十分大きい場合、2点関数のフィット関数 $G(r) = \langle s_{(0,0)} s_{(r,0)} \rangle - C$ を以下のように定義する。 $\frac{T}{T_c} = \text{Const}$ 。

$$G(r) \equiv A \frac{e^{-r/\xi}}{r^E} \simeq \langle s_{(0,0)} s_{(r,0)} \rangle + C \quad (\text{D.59})$$

A, C, E はフリーパラメーターとする。

付録E TRG と TNR の数値計算結果の比較

この章では周期境界条件の2次元 Ising 模型を TRG, TNR でそれぞれ数値計算した結果をそれぞれ図示した。計算した物理量は分配関数、自由エネルギー、内部エネルギー、比熱であり、特に TRG と TNR の違いが顕著に見える比熱をさらに詳しく図示した。また、固定テンソル解析も行い、 D_{cut} ごとの臨界温度を求め、 $D_{\text{cut}} = 16$ での固定テンソルを評価する関数を図示した。

E.1 2次元 Ising 模型の数値結果

E.1.1 物理量の導出

分配関数とハミルトニアンを次のように定義する。

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-\beta H} \quad (\text{E.1})$$

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j, \quad S_n = \pm 1 \quad (\text{E.2})$$

次に、自由エネルギー F (free energy)、内部エネルギー E (energy)、比熱 H (specific heat) を次のように定義する。 β は温度 T の逆数である。

$$F = -T \ln(Z) \quad (\text{E.3})$$

$$E = \frac{d}{d\beta} \ln(Z) \quad (\text{E.4})$$

$$= \frac{dT}{d\beta} \frac{d}{dT} \ln(Z) \quad (\text{E.5})$$

$$= -T^2 \frac{d}{dT} \ln(Z) \quad (\text{E.6})$$

$$H = \frac{d}{dT} E \quad (\text{E.7})$$

$$= -\frac{d}{dT} T^2 \frac{d}{dT} \ln(Z) \quad (\text{E.8})$$

$$= -2T \frac{d}{dT} \ln(Z) - T^2 \frac{d^2}{dT^2} \ln(Z) \quad (\text{E.9})$$

$$= \frac{2E}{T} - T^2 \frac{d^2}{dT^2} \ln(Z) \quad (\text{E.10})$$

E.1.2 条件

- 2次元 Ising 模型
- 周期境界条件
- 新しく生成される bond の自由度の上限 $D_{\text{cut}} = 16$
- 温度の範囲 ($dT = 0.01$ ごと) [2.20-2.30](TRG), [2.20-2.29](TNR)

E.1.3 数値微分の誤差

TRG の数値計算結果では分配関数、自由エネルギーや分配関数を 1 階微分する内部エネルギーは大きな飛びが見られないが、分配関数を 2 階微分する比熱は大きな数値的な飛びが見られる (図 E.2)。この飛びの由来は分配関数の誤差である。厳密な logscale の分配関数を $\ln(Z^0)$ であるとし、 α を厳密値からの差だとし、微分時の誤差を考える。 E_0 をエネルギーの厳密値とする。

$$\ln(Z) = \ln(Z^0) + \alpha(\beta) \quad (\text{E.11})$$

$$E = \frac{d}{d\beta} (\ln(Z^0) + \alpha(\beta)) \quad (\text{E.12})$$

$$= \frac{d}{d\beta} \ln(Z^0) + \frac{d}{d\beta} \alpha(\beta) \quad (\text{E.13})$$

$$= E^0 + \frac{dT}{d\beta} \frac{d}{dT} \alpha(T) \quad (\text{E.14})$$

$$= E^0 - T^2 \frac{d}{dT} \alpha(T) \quad (\text{E.15})$$

仮に、ある温度 T_0, T_1 の差 $dT = T_1 - T_0$ であるとし、誤差 α と温度差 dT の値をそれぞれ $\alpha = 10^{-4}$, $dT = 10^{-2}$ とする。そして、1 階微分するエネルギーの誤差のオーダーを下記のように考えると誤差のオーダーは $O(10^{-2})$ になる。

$$\frac{d}{dT} \alpha(T) = \frac{\alpha(T_1) - \alpha(T_0)}{dT} = O\left(\frac{10^{-4}}{10^{-2}}\right) = O(10^{-2}) \quad (\text{E.16})$$

続いて、2 階微分する比熱の誤差も同様に考えると誤差のオーダーは $O(1)$ になる。そのため、 $dT = 10^{-2}$ の場合には数値的な飛びを回避するための logscale の分配関数の誤差は $O(10^{-6})$ 以下であることが求められる。

E.1.4 TRG と TNR の計算結果

TRG の数値計算結果では分配関数、自由エネルギー、内部エネルギー、比熱は大きな飛びが見られない (図 E.4, E.3)。特に比熱は TRG に比べると目に見えて改善されていることがわかる。また、図 E.4 を参照すると明らかに臨界点の場所が異なることがわかる。

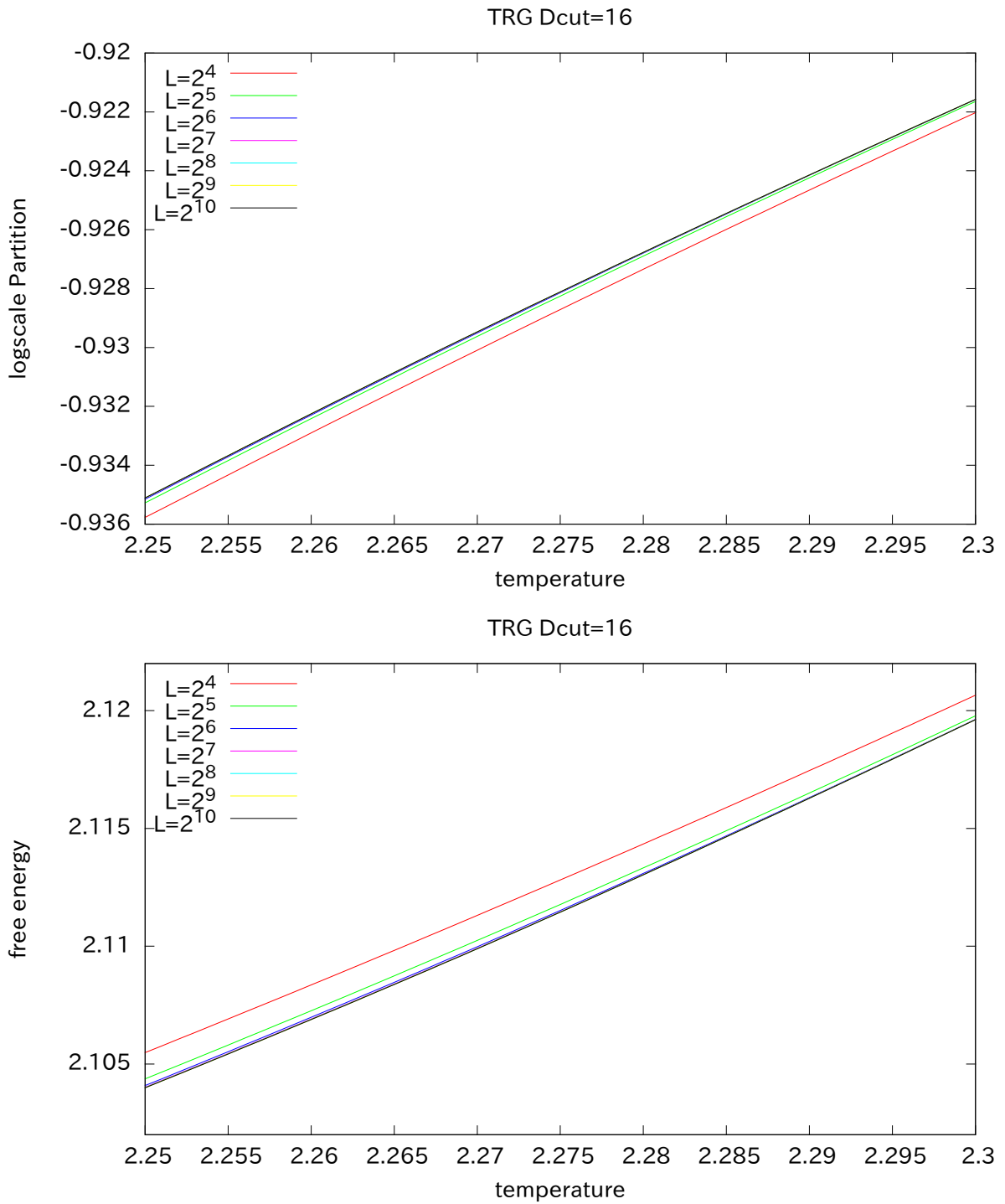


図 E.1: TRG の物理量結果 (logscale Partition function, Free energy):格子サイズ $L(L = 2^4, 2^5, 2^6, 2^7, 2^8, 2^9, 2^{10})$ での物理量の変化を表している。体積 $V = L \times L$ 。

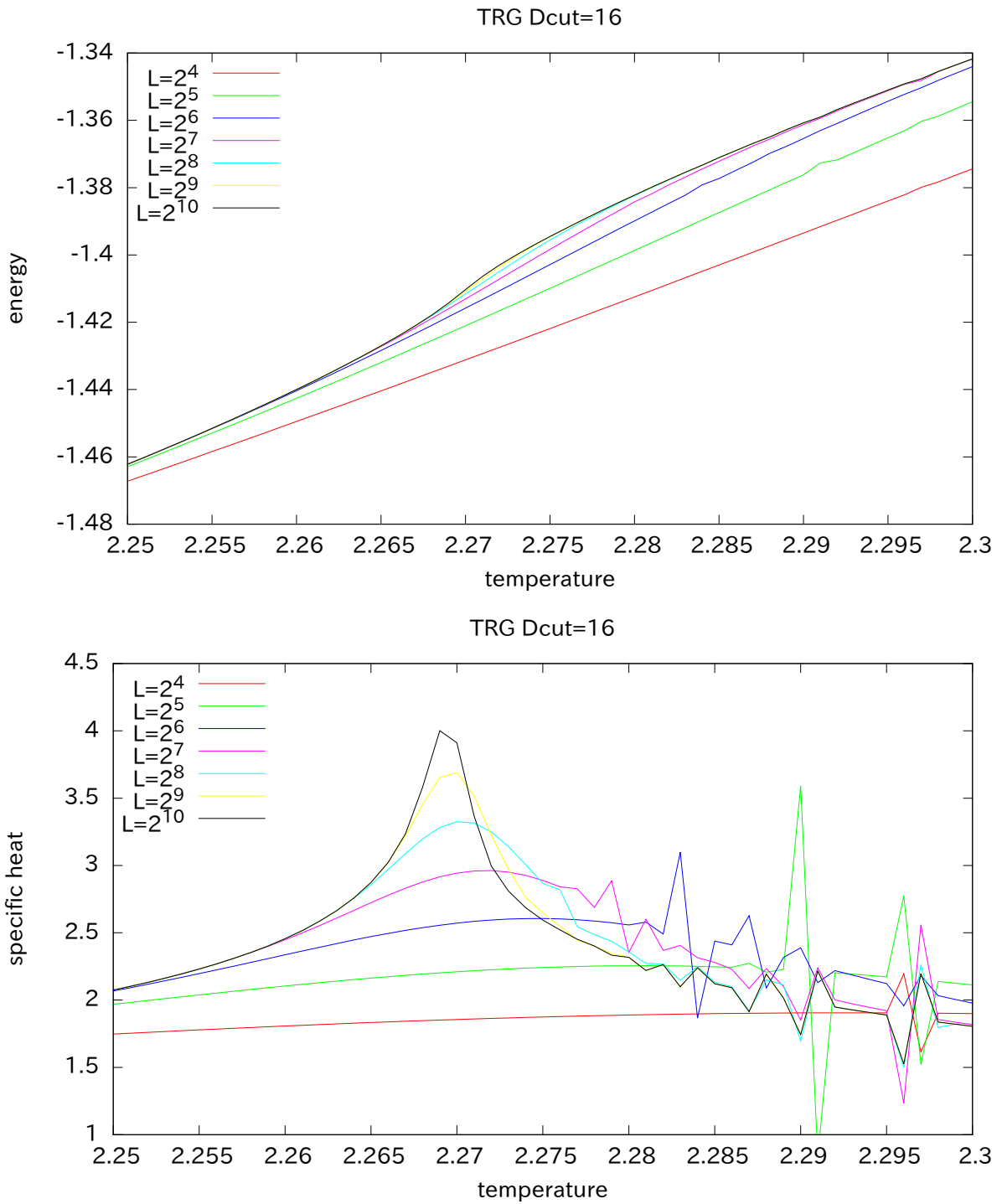


図 E.2: TRG の物理量結果 (Energy, Specific heat):格子サイズ $L(L = 2^4, 2^5, 2^6, 2^7, 2^8, 2^9, 2^{10})$ での物理量の変化を表している。

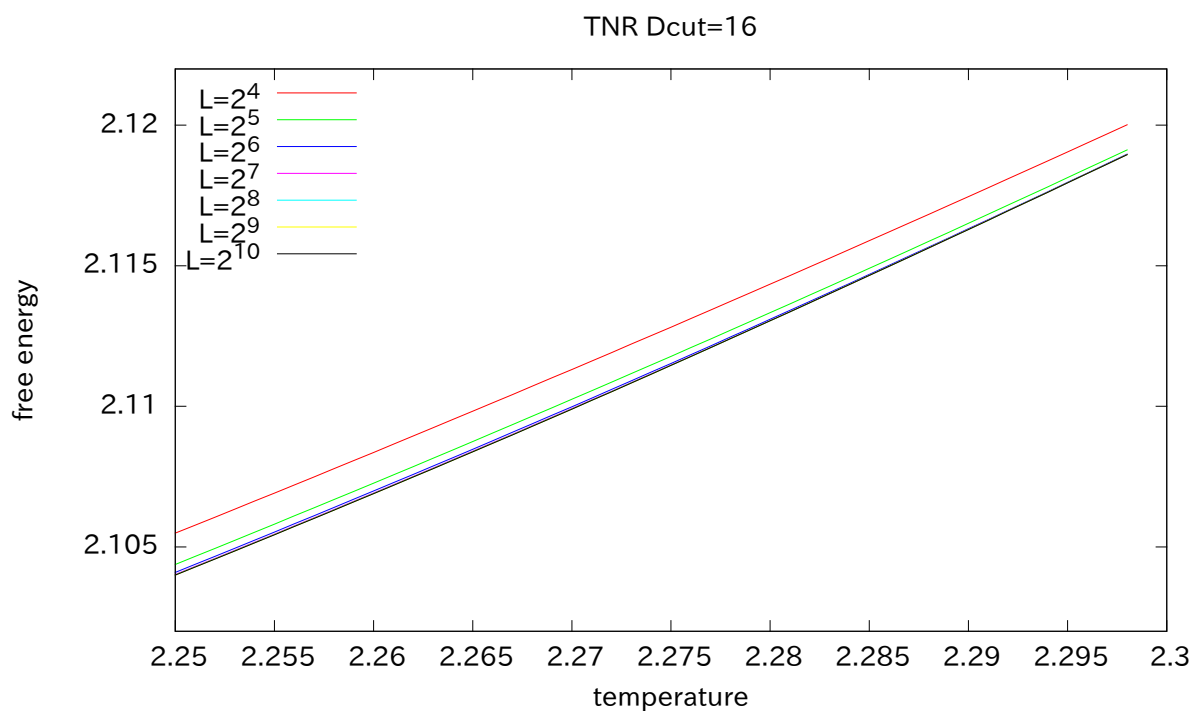
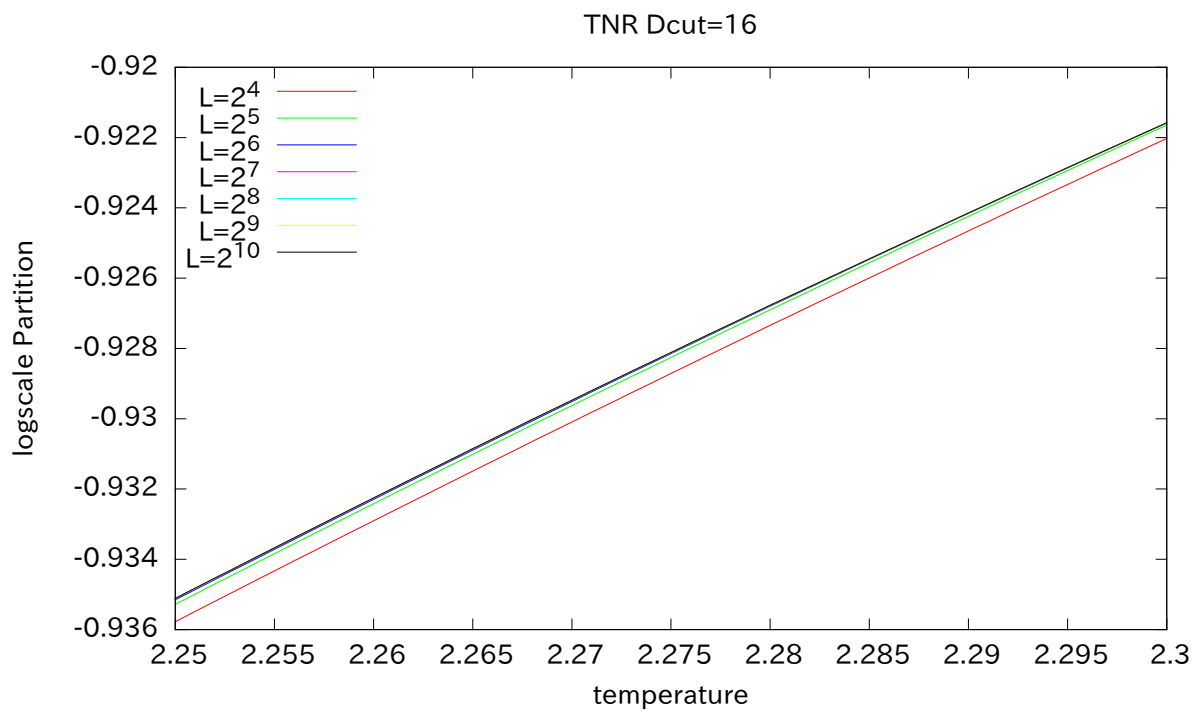


図 E.3: TNR の物理量結果 (logscale Partition function, Free energy, Energy, Specific heat): 格子サイズ $L (L = 2^4, 2^5, 2^6, 2^7, 2^8, 2^9, 2^{10})$ での物理量の変化を表している。

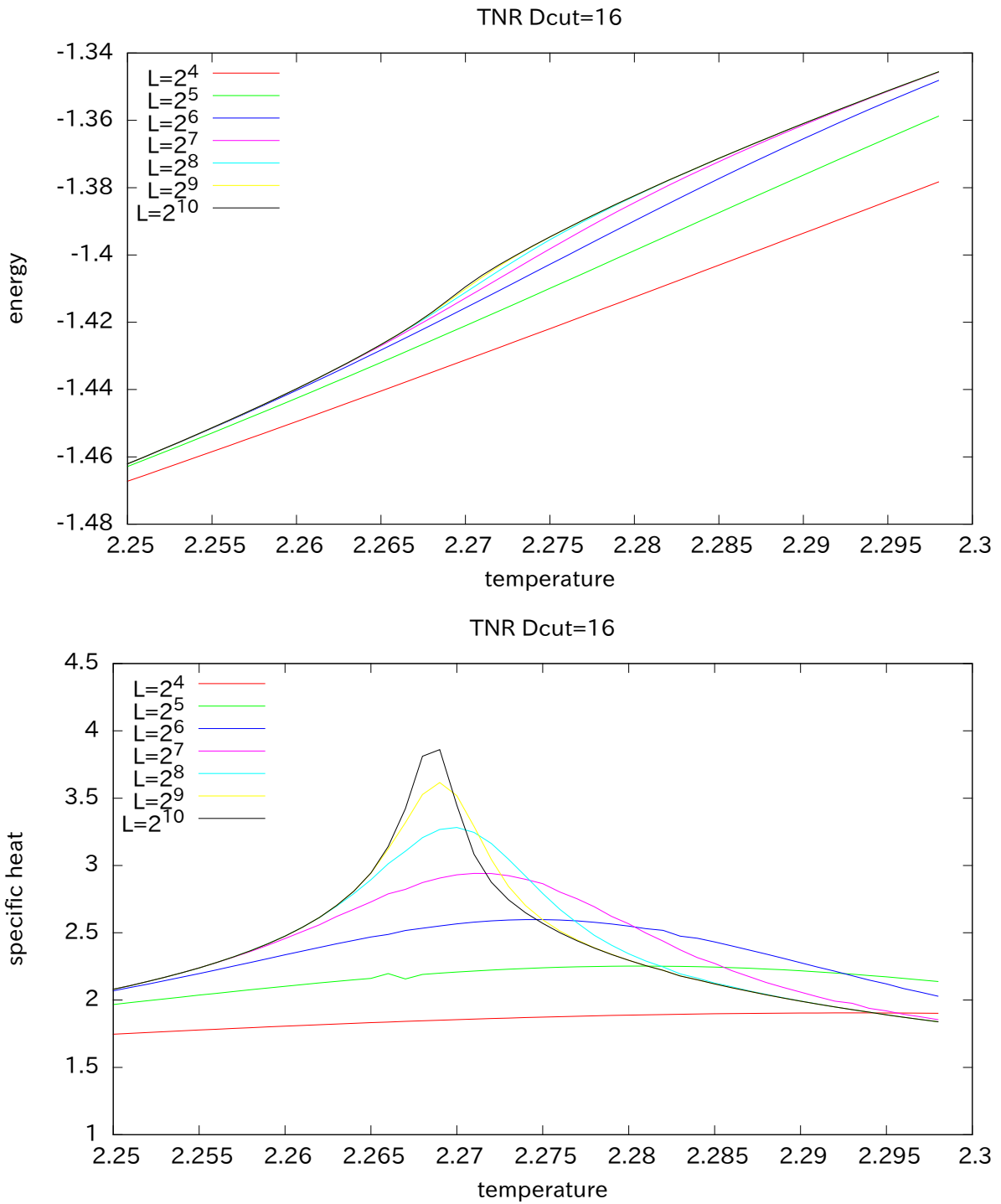


図 E.4: TNR の物理量結果 (logscale Partition function, Free energy, Energy, Specific heat): 格子サイズ L ($L = 2^4, 2^5, 2^6, 2^7, 2^8, 2^9, 2^{10}$) での物理量の変化を表している。

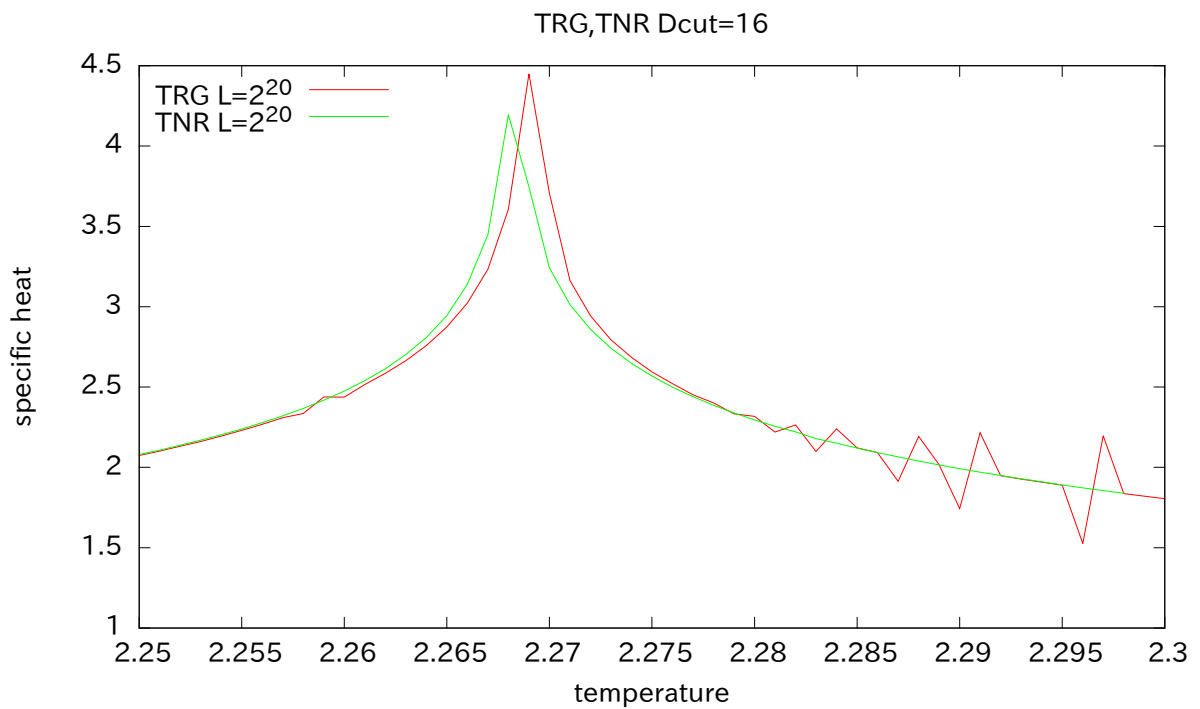
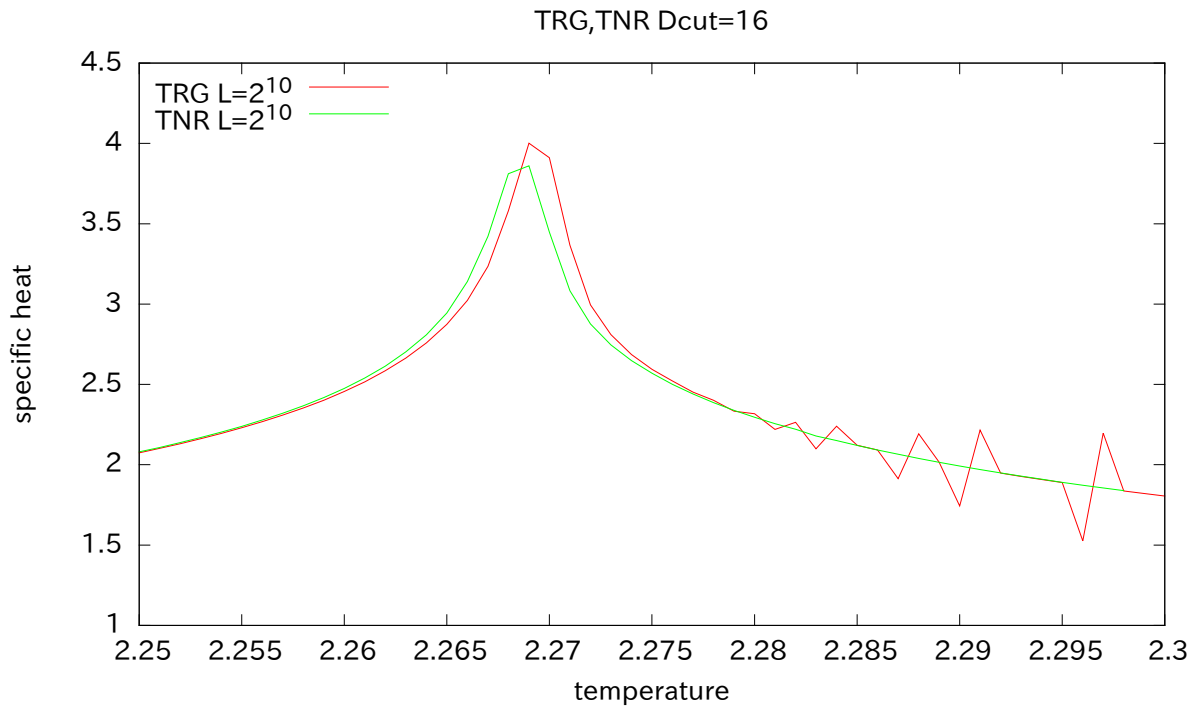


図 E.5: TRG,TNR の物理量結果 (Specific heat) の拡大図:格子サイズ $L(L = 2^{10}, 2^{20})$ での物理量の変化を表している。

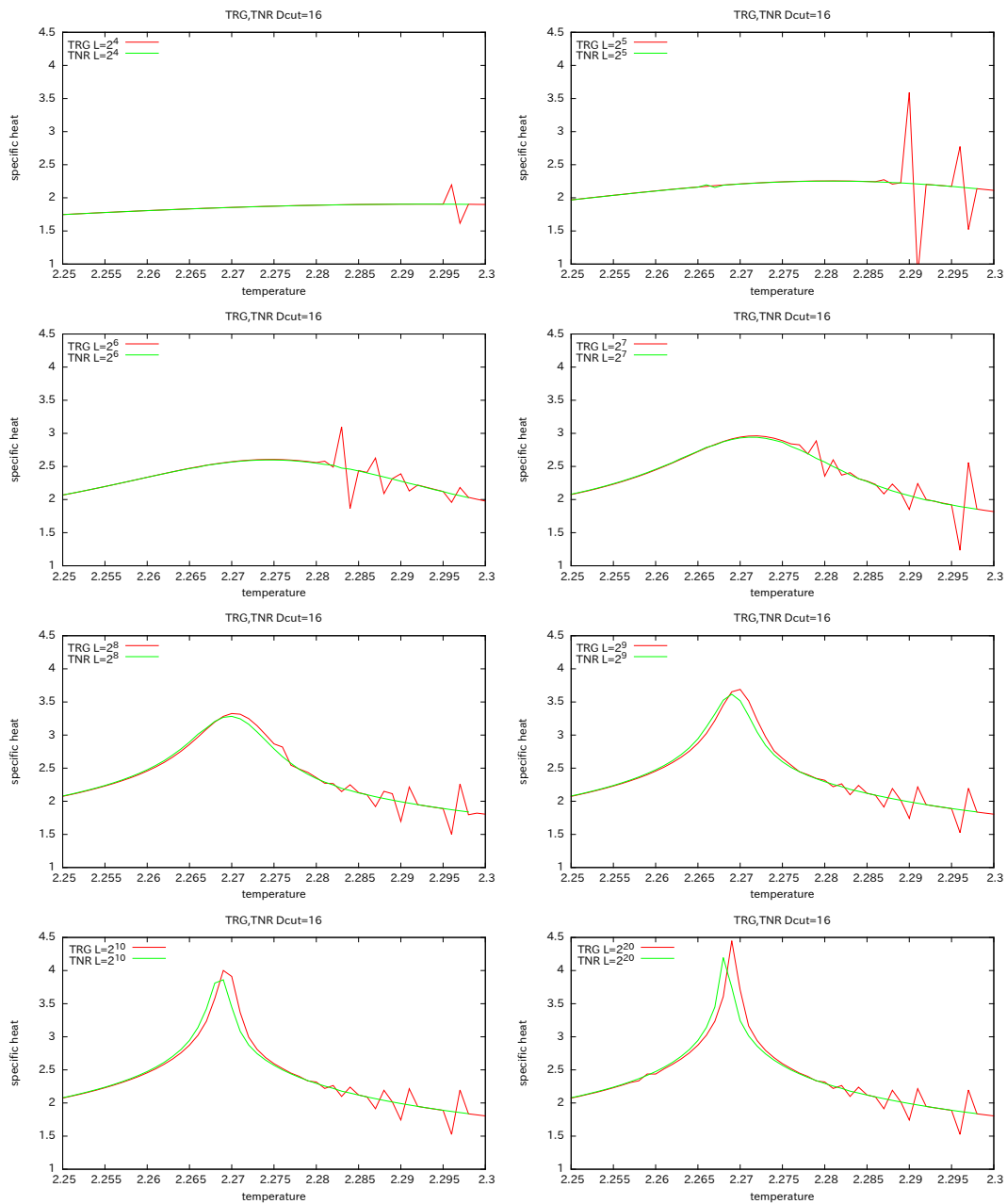


図 E.6: TRG,TNR の物理量結果 (Specific heat):格子サイズ $L(L = 2^4, 2^5, 2^6, 2^7, 2^8, 2^9, 2^{10}, 2^{20})$ をそれぞれ TNR と TRG を比較し、図示した。

E.2 固定点テンソルの解析

前節で説明された比熱のピークを視覚的に確認することで臨界点を決定することも可能であるが、今回はテンソルくりこみ群特有の臨界点の解析を行い、臨界点を決定する。この解析法はテンソルくりこみ群によってくりこまれたテンソル A はくりこみをくり返すごとに固定点テンソルと呼ばれるテンソルに収束すると考え、くりこまれたテンソル A の構造を解析し、臨界点を決定する。図 E.7 が解析結果である。

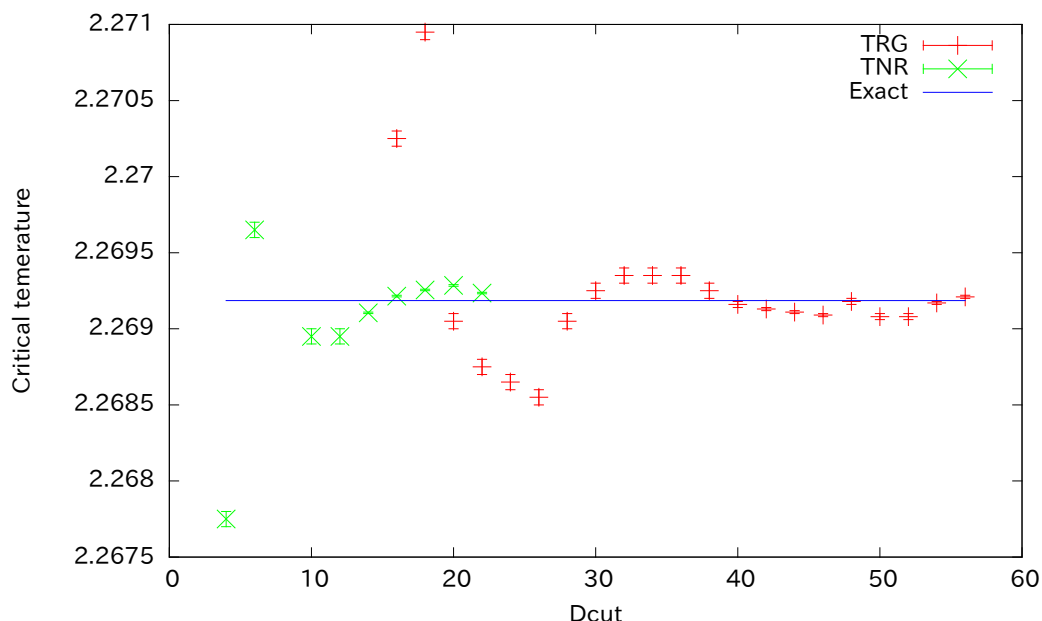


図 E.7: TRG, TNR の各 D_{cut} ごとの臨界温度: 厳密値の臨界温度 $T = 2/\ln(1 + \sqrt{2})$

2次元 Ising 模型の場合、くりこまれたテンソル A は低温の固定点テンソル T_{Z_2} 、または高温の固定点テンソル T_{TRI} のどちらかに収束する。そのテンソル A の構造を数値的に評価し、低温・高温の固定点テンソルのどちらに収束しているかを判断する。その数値的に評価する関数を X として下記のように定義する。[18]

$$X_1 = \frac{\left(\sum_{ij} A_{ijij}\right)^2}{\sum_{ijkl} A_{ijkj} A_{klil}} \quad (\text{E.17})$$

$$X_2 = \frac{\left(\sum_{ij} A_{ijij}\right)^2}{\sum_{ijkl} A_{ijkl} A_{klij}} \quad (\text{E.18})$$

2次元 Ising 模型の場合、 X_1, X_2 に違いがないため、今回は $X = X_1$ として図 E.8, E.9 に $D_{\text{cut}} = 16$ の結果を図示する。

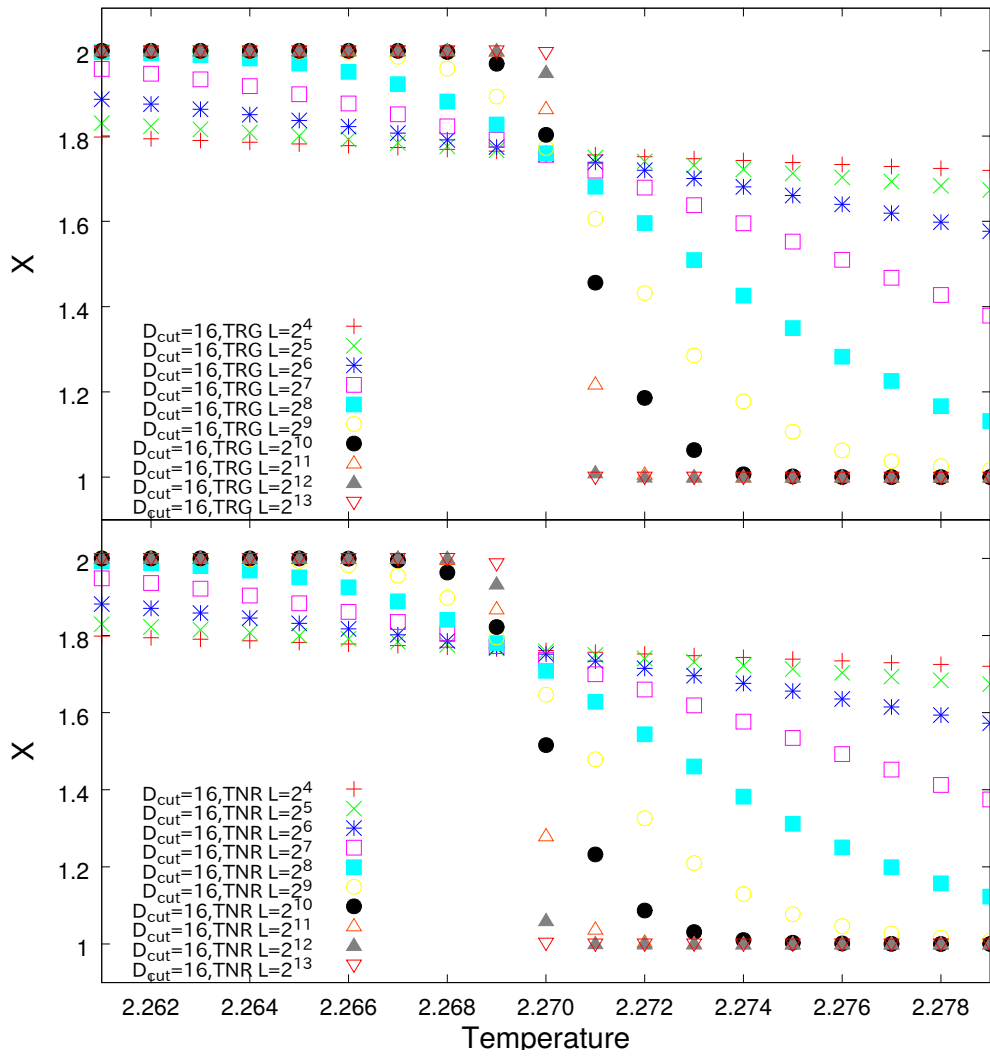


図 E.8: TRG,TNR を用いた $D_{\text{cut}} = 16$ での各温度ごとの X の変化: 十分に大きな格子サイズ L を取ることである温度を境にそれぞれ収束する値が二つに分かれる。この時、異なる値に分かれる境目の温度を臨界温度として図 E.7 に示した。

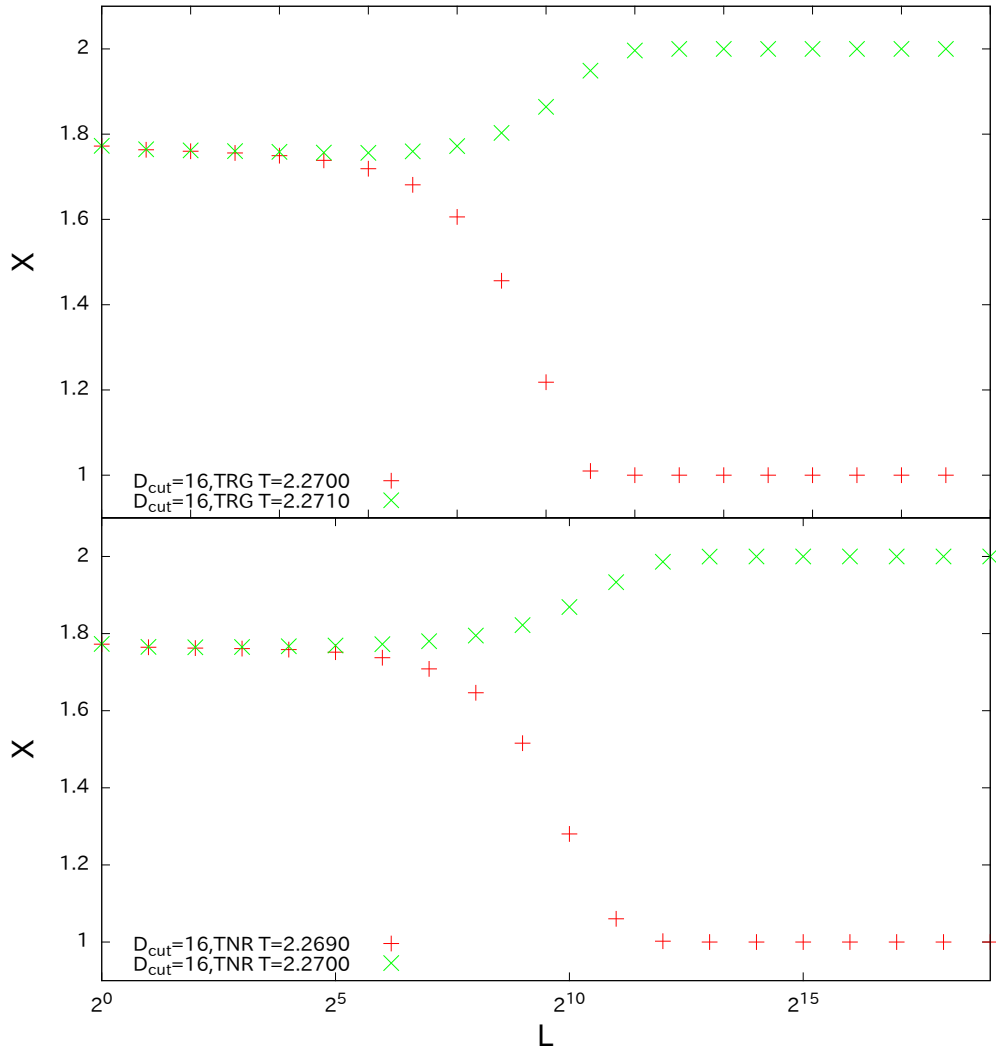


図 E.9: TRG, TNR を用いた $D_{\text{cut}} = 16$ での格子サイズ L ごとの X の変化, TRG では温度 ($T = 2.270$ (赤線), 2.271 (緑線)), TNR では温度 ($T = 2.2699$ (赤線), 2.700 (緑線)): 格子サイズ L が小さいときは同一の値を取る。しかし、格子サイズ L が大きくなるに従い、それぞれの温度の影響が現れ、異なる値に収束していくことがわかる。