

4次元系でのテンソル繰り込み群手法の改良

Improved tensor renormalization group method for four-dimensional systems

東北大学 理学研究科 物理学専攻

C3SM2031 杉本悠斗

背景

量子色力学 (QCD) は、強い相互作用を記述する基本理論であり、陽子や中性子の内部に存在するクォークやグルーオンのダイナミクスを記述する重要な理論である。しかし、QCD は低エネルギー領域で結合定数が大きくなり摂動論的手法が適用できないため、通常は格子 QCD と呼ばれる数値的な手法が理論解析に用いられる。格子 QCD では物理量を統計的な手法であるモンテカルロ法に基づいて計算するが、有限密度での計算においては符号問題という深刻な困難が生じることが知られている。符号問題は、モンテカルロ法で取り扱う確率が複素数となるため、確率解釈が不可能になる現象であり、量子多体系に頻繁に現れる問題である。

モンテカルロ法に変わる新たなアルゴリズムとして、テンソル繰り込み群法 (TRG: Tensor Renormalization Group) [1] が近年注目を集めている。TRG 法では、分配関数などの物理量をテンソルの縮約 (テンソルネットワーク) という形式で表現し、特異値分解による情報の圧縮を繰り返すことで近似的に物理量を評価する手法である。TRG 法は、モンテカルロ法と異なり確率的操作を必要としないため、符号問題が存在せず、また熱力学極限を容易に取る事ができるなどのメリットもあり、有限密度 QCD の第一原理計算への応用が期待されている。しかしながら、高次元でのテンソル繰り込み群アルゴリズム (HOTRG) [2] は計算コストが大きく、特に 4 次元系においてはその計算コストが $O(D^{15})$ (D はボンド次元と呼ばれる計算時間と精度をコントロールするパラメーターで、通常 $O(10)$ 程である。) に及ぶため、QCD などの内部自由度の大きい系を取り扱うには現実的ではない。そのため、HOTRG 法を近似したアルゴリズムである ATRG 法 [3] が 4 次元系の計算において用いられている [4]。ATRG 法は計算コストを $O(D^9)$ まで削減できたものの、HOTRG 法同様に計算コストの増大によりボンド次元を十分に大きく取れない問題がある。一方、HOTRG 法の近似として ATRG 法と異なるアプローチを取ったものが、近年提案された MDTRG 法 [5] である。同手法では、精度の低下を抑えつつ計算コストを削減する手法として、改良された Triad 表現 [6] と呼ばれるテンソルネットワークの表現を用いている。実際に 3 次元の Ising モデルにおいて、HOTRG 法と同程度の系統誤差を達成しながらも、計算コストを大幅に削減することに成功しているが、4 次元系において適用された例はない。上記のような背景を踏まえ、本研究では将来の QCD などの複雑な 4 次元理論の計算の実現に向けて更に高速なアルゴリズムや計算手法の開発を行う事を主題とする。

本研究の概要

本研究では、4 次元のテンソル繰り込み群の高速化手法として、ATRG 法に Triad 表現を導入した Triad-ATRG 法を提案した。Triad-ATRG 法は、ATRG 法の精度を保ちつつ計算コストを $O(D^9) \rightarrow O(D^7)$ に大幅に削減したアルゴリズムであり、より大きなボンド次元 D に対して計算を実行する事が可能である。また、本研究では、ATRG や Triad-ATRG をテンソルの縮約計算に適したハードウェアである GPU (画像処理用の演算装置) 上で実装するアルゴリズムの開発も同時に行った。

まず、Triad-ATRG 法の CPU 上での計算時間のスケーリングを調査し、理論通りの計算時間の削減が達成できることを確認した。同時に、GPU 上での計算時間のスケーリングも調査し、ATRG

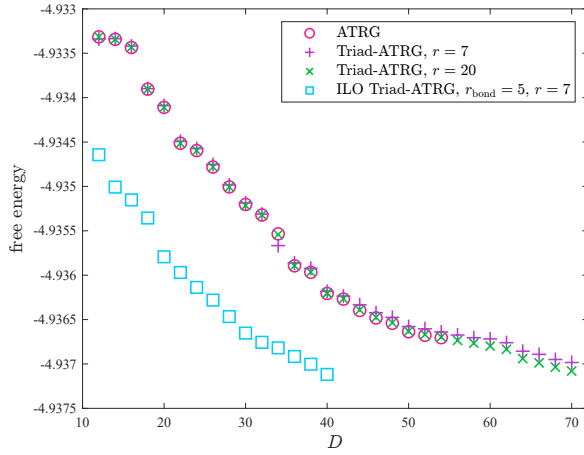


図 1: Triad-ATRG 法, ATRG 法, ILO Triad-ATRG 法の自由エネルギーの比較.

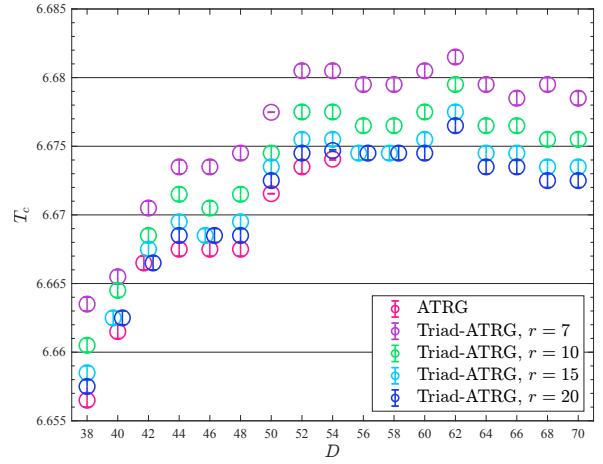


図 2: ATRG 法, Triad-ATRG 法での相転移点の比較. 誤差は温度の解像度である.

法と Triad-ATRG 法ともに CPU と比較してよりスケーリングの改善が確認された. 特に, Triad-ATRG 法は $O(D^6)$ 以下のスケーリングを示しており, ボンド次元を大きくするに従い大幅な計算時間の短縮が可能となった.

次に, Triad-ATRG 法が ATRG 法と同等の精度を与えていることを, 4 次元の Ising モデルの自由エネルギーを計算することで確認した (図 1). 特に, $D = 54$ では, ATRG 法と Triad-ATRG 法 ($r = 20$) との差異は, わずか 0.00015% であった.

次に, 相転移点や内部エネルギーなどの物理量についても, Triad-ATRG 法が ATRG 法と同等の精度を持つことを実際の数値計算で確認した. 特に, 相転移点の計算では, 先行研究より大きい $D = 70$ までの計算が可能となり, 相転移点の収束性が D を大きくすることで向上することを示した (図 2). 以上の結果は, Triad-ATRG 法が ATRG 法と同等の精度を持ちながら, 大幅に計算コストを削減した画期的なアルゴリズムであり, 4 次元系の計算において強力な手法になることを示唆している.

次に, Triad-ATRG 法や ATRG 法で一番近似が激しい部分であるボンド入れ替えと呼ばれる操作について, [5] で提案された内線オーバーサンプリングの手法を Triad-ATRG 法に適用したアルゴリズム (ILO Triad-ATRG) を提案し, さらなる精度の向上を図った. この結果, ILO Triad-ATRG 法は ATRG 法よりも, 同じボンド次元でより低い自由エネルギーを達成する事が示された (図 1). 論文では, 以上に加えて, Triad-ATRG 法を用いた 4 次元イジングモデルの相構造の解析も行なっている. 本研究で得られた結果は, Triad-ATRG 及び ILO Triad-ATRG が 4 次元において効率的な手法であることを強く示しており, 将来の有限密度 QCD などの複雑な 4 次元理論の計算の実現に向けた重要な基盤手法となることが期待される.

参考文献

- [1] M. Levin and C. P. Nave, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 120601 (2007), [[arXiv:cond-mat/0611687](#)].
- [2] Z. Y. Xie et al., *Phys. Rev. B* **86**, 045139 (2012), [[arXiv:1201.1144](#)].
- [3] D. Adachi et al., *Phys. Rev. B* **102**, 054432 (2020), [[arXiv:1906.02007](#)].
- [4] S. Akiyama and Y. Kuramashi, *JHEP* **10**, 077, [[arXiv:2304.07934](#)].
- [5] K. Nakayama (2019), [[arXiv:2307.14191](#)].
- [6] D. Kadoh and K. Nakayama (2019), [[arXiv:1912.02414](#)].

発表論文

- [7] Y. Sugimoto and S. Sasaki, *PoS LATTICE2024*, 038 (2025), [[arXiv:2412.14104](#)]