

ハミルトニアン の Locality を用いた非平衡量子系ダイナミクスに関する数学的な解析

桑原知剛

東北大学 材料科学高等研究所

1 目的

このノートでは一般の量子多体系の短時間の時間発展を取り扱うための理論を紹介する。具体的には以下の3点を理解することを目的とする:

1. 量子多体系のエンタングルメントエントロピーは短時間の時間発展では小さく抑えられる。
2. エンタングルメントエントロピーの値が小さい場合、量子多体系の状態は行列積状態 (Matrix Product State) で効率よく記述することができる。
3. 行列積状態を用いて時間発展を効率的に計算する手法として Time-evolving block decimation (TEBD) という手法を用いることができる。

2 量子系ダイナミクス

2.1 対象とする量子系

格子系で定義される N 個の $(1/2)$ スピン系を考え、各々のスピンを $i = 1, 2, \dots, N$ とラベル付けする。系のハミルトニアン H は簡単のため隣接相互作用するスピン系を仮定する:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} h_{i,j}, \quad (1)$$

ここで、 $\sum_{\langle i,j \rangle}$ は隣接しているスピン i, j に関する和を表し、 $h_{i,j}$ はスピン i, j で定義される任意の演算子であるとする。例えば、ハイゼンベルグモデルでは $h_{i,j} = \sigma_i^x \otimes \sigma_j^x + \sigma_i^y \otimes \sigma_j^y + \sigma_i^z \otimes \sigma_j^z$ となる。以下では、特に断りのない限り1次元系を考えていくことにする。

初期状態 $|\psi(0)\rangle$ の時間発展は一般に以下の形式で与えられる:

$$|\psi(t)\rangle = \mathcal{T} \left[e^{-i \int_0^t H(t) dt} \right] |\psi(0)\rangle. \quad (2)$$

ここで、 $\mathcal{T}[\dots]$ は時間順序積であり*1、ハミルトニアンが時間依存しないなら $\mathcal{T}[e^{-i \int_0^t H(t) dt}] = e^{-iHt}$ となる。

*1 時間順序積は以下のように定義される。

$$\mathcal{T} \left[e^{-i \int_0^t H(t) dt} \right] := \lim_{n \rightarrow \infty} e^{-i \frac{t}{n} H(t_n)} e^{-i \frac{t}{n} H(t_{n-1})} e^{-i \frac{t}{n} H(t_{n-2})} \dots e^{-i \frac{t}{n} H(t_2)} e^{-i \frac{t}{n} H(t_1)} \quad \text{with } t_m := \frac{mt}{n}. \quad (3)$$

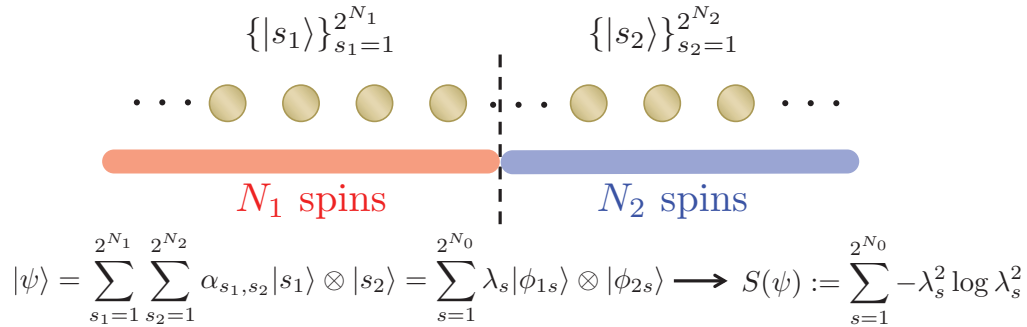


図1 Schematic picture.

システムのサイズが小さい場合 ($N \lesssim 20$) には式 (2) を直接解くことによってダイナミクスを追うことができるが、一般的に計算時間はシステムサイズに応じて指数的に増大してしまうため何らかの近似、または仮定が必要になってくる。最も簡単な近似として、量子状態が以下のように直積状態で与えられると仮定する平均場近似があげられる。このとき、

$$|\psi(t)\rangle = |\psi_1(t)\rangle \otimes |\psi_2(t)\rangle \otimes |\psi_3(t)\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N(t)\rangle \tag{4}$$

で書けると仮定して時間発展を計算していく。このように量子状態を近似すると必要なパラメータ数は高々 $O(N)$ 個であるから、ある程度大きなサイズ ($N \gtrsim 10^6$) まで効率的に計算できる。

一方で、量子状態は式 (4) のように一つの直積状態 (スピン間に相関のない状態) でなく、その任意の重ね合わせとして一般的に表現される。従って、平均場近似ではスピン間相関を無視する近似に対応しており、相関の効果が効いてくる場合に平均場近似は破綻してしまう*2。

2.2 エンタングルメントと状態の複雑性

ここでは、具体的にスピン間相関を特徴づける指標としてエンタングルメントについて述べる。この節ではエンタングルメントのより精密な定義*3には立ち入らず、最も簡単な2体系の純粋状態に限って議論する。

2.2.1 定義

以下では、簡単のため N スピン系を2つに分割して系1を N_1 スピン系、系2を N_2 スピン系で定義する (図1)。このとき、系1,2で定義される一般的な状態は、

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1=1}^{2^{N_1}} \sum_{s_2=1}^{2^{N_2}} \alpha_{s_1,s_2} |s_1\rangle \otimes |s_2\rangle, \quad \sum_{s_1=1}^{2^{N_1}} \sum_{s_2=1}^{2^{N_2}} |\alpha_{s_1,s_2}|^2 = 1 \tag{5}$$

で与えられる。このとき、 $|\psi\rangle$ が系1と系2の間でエンタングルしているとは、 $|\psi\rangle$ が以下のように直積状態に分解できないこととして定義される。

$$|\psi\rangle = |\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle, \tag{6}$$

*2 平均場近似は特殊な場合を除いてダイナミクスの近似法としては精度が悪い。しかし、無限レンジ模型などではある程度長い時間良い近似を与える。

*3 R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, and K. Horodecki, Rev. Mod. Phys. **81**, 865 (2009).

ここで、 $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$ はそれぞれ系 1, 2 について定義される状態である。例えば、2 スピン系で考えると $|\psi\rangle = (|0, 0\rangle + |1, 1\rangle)/\sqrt{2}$ はエンタングルした状態であり、 $|\psi\rangle = |0, 0\rangle$ はエンタングルしていない状態となる。

2.2.2 シュミット分解とエンタングルメントエントロピー

2 スピン系がエンタングルしているかどうかは、自明ではないことがある。例えば、 $|\psi\rangle = (|0, 0\rangle + |0, 1\rangle + |0, 1\rangle + |1, 1\rangle)/2$ は $|\psi\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$ と分解できるためエンタングルしていないが、 $|\psi\rangle = (|0, 0\rangle + |0, 1\rangle + |0, 1\rangle - |1, 1\rangle)/2$ にはこのような分解が存在せずエンタングルした状態となる。これを判別する方法としてシュミット分解を紹介する。

シュミット分解は系 1, 系 2 で基底を適切に選んで、式 (5) の状態を

$$\sum_{s=1}^{2^{N_0}} \lambda_s |\phi_{1s}\rangle \otimes |\phi_{2s}\rangle, \quad N_0 = \min(N_1, N_2) \tag{7}$$

のように変換する操作を指す。ここで、 $\{|\phi_{1s}\rangle\}$ と $\{|\phi_{2s}\rangle\}$ はそれぞれ直交する基底であり、 $1 \geq \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{2^{N_0}} \geq 0$ を満たすものとする。状態 $|\psi\rangle$ が直積状態であれば、 $\lambda_1 = 1$ でその他は全て 0 になる ($\lambda_s = 0$ for $s \geq 2$)。

シュミット分解は以下のように証明する。系 1 と系 2 の基底を変換するユニタリー行列をそれぞれ $U^{(1)}, U^{(2)}$ と定義する。このとき、

$$\begin{aligned} U^{(1)} \otimes U^{(2)} |\psi\rangle &= \sum_{s_1=1}^{2^{N_1}} \sum_{s_2=1}^{2^{N_2}} \alpha_{s_1, s_2} U^{(1)} |s_1\rangle \otimes U^{(2)} |s_2\rangle \\ &= \sum_{s'_1, s'_2} \sum_{s_1, s_2} U^{(1)}_{s_1, s'_1} \alpha_{s_1, s_2} U^{(2)}_{s_2, s'_2} |s'_1\rangle \otimes |s'_2\rangle \end{aligned} \tag{8}$$

なる。ここで、 $\{\alpha_{s_1, s_2}\}$ は 2^{N_1} 行 2^{N_2} 列の行列であることに注目する。このとき、 $U^{(1)}$ と $U^{(2)}$ を行列 α を特異値分解するユニタリー変換として取ると*4、

$$\sum_{s_1, s_2} U^{(1)}_{s_1, s'_1} \alpha_{s_1, s_2} U^{(2)}_{s_2, s'_2} = \lambda_{s'_1} \delta_{s'_1, s'_2}, \quad s'_1 \leq 2^{\min(N_1, N_2)} \tag{9}$$

ここで、 $\{\lambda_s\}$ は行列 α の特異値であり降順に並べるとする。式 (8) と (9) を合わせると、 $U^{(1)} \otimes U^{(2)} |\psi\rangle = \sum_s \lambda_s |s\rangle \otimes |s\rangle$ で分解できたので、

$$|\psi\rangle = \sum_{s=1}^{2^{N_0}} \lambda_s U^{(1)\dagger} |s\rangle \otimes U^{(2)\dagger} |s\rangle \equiv \sum_{s=1}^{2^{N_0}} \lambda_s |\phi_{1s}\rangle \otimes |\phi_{2s}\rangle \tag{10}$$

が成り立つ。これによって、(7) の分解が達成できる。

上記のシュミット分解を用いて、系 1 と系 2 の間のエンタングルメントエントロピー $S(\psi)$ を以下のように定義する：

$$S(\psi) := - \sum_s \lambda_s^2 \log \lambda_s^2 \tag{11}$$

ここで、 $S(\psi)$ は系 1(または系 2) に関する縮約密度行列 ρ_1 *5 に関するフォンノイマンエントロピー $\text{tr}(-\rho_1 \log \rho_1)$ と一

*4 特異値分解とは m 行 n 列の行列 A が与えられたときに、 m 行 m 列のユニタリー行列 U と n 行 n 列のユニタリー行列 V を用いて、 $A = UWV$ のように変換する操作を指す。ここで、 W は m 行 n 列の対角行列であり、対角成分に特異値 ($\sqrt{WW^\dagger}$ の固有値) が対応する。

*5 縮約密度行列は系 2 のヒルベルト空間 \mathcal{H}_2 でのみ trace を取ったものを指す。式 (5) で見ると、

$$\rho_1 = \text{tr}_{\mathcal{H}_2} (|\psi\rangle\langle\psi|) = \sum_{s_1, s'_1} \sum_{s_2} \alpha_{s_1, s_2} \alpha_{s'_1, s_2}^* |s_1\rangle\langle s'_1| \tag{12}$$

となる。

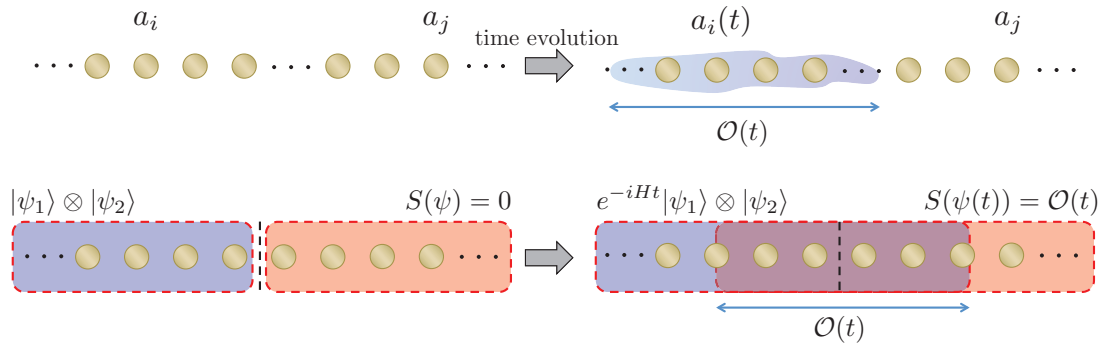


図2 Lieb-Robinson bound. 局所的な演算子は時間発展によって $\mathcal{O}(t)$ 程度の広がりを持つ非局所演算子になる。これは情報の伝達が距離にして $\mathcal{O}(t)$ 程度に制限されることを意味しており、エンタングルメントエントロピーの生成量も $\mathcal{O}(t)$ 程度であると考えられる。

致する。特に、 $|\psi\rangle$ が直積状態であれば、 $S(\psi) = 0$ になることに注意。エントロピー $S(\psi)$ が 0 に近ければ $|\psi\rangle$ は少ない数の直積状態 $|\phi_{1s}\rangle \otimes |\phi_{2s}\rangle$ で近似でき、 $S(\psi)$ が大きくなるほど近似に必要な直積状態の数が増える。

3 量子ダイナミクスにおける基本的な性質

前節からエンタングルメントエントロピーの大きさが系の相関の大きさになることを見てきた。この節では、量子ダイナミクスによって生成されるエンタングルメントに関する基本定理について述べる。

3.1 Lieb-Robinson bound

量子ダイナミクスに関する最も基本的な制限は「情報の伝達速度は有限の速度で伝わる」という性質であり、これを数学的に定式化したものが Lieb-Robinson bound という不等式になる。Lieb-Robinson bound はある局所的な演算子が時間発展したとき、それがどのくらいの速さで広がっていくかを与える (図2)。この点を見るために、以下のようにスピ i で定義される局所演算子 a_i の時間発展を見てみる:

$$a_i(t) = e^{iHt} a_i e^{-iHt} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(it)^n}{n!} \overbrace{[H, [H, [H, \dots, [H, a_i]] \dots]]}^n \quad (13)$$

ハミルトニアン H が 2 体相互作用まで含む場合、 n 重交換子 $\overbrace{[H, [H, [H, \dots, [H, a_i]] \dots]]}^n$ は $n + 1$ 個のスピを含む非局所的な演算子となる。 $a_i(t)$ の非局所性を特徴づけるのが Lieb-Robinson bound であり、以下の不等式で与えられる:

$$\|[a_i(t), a_j]\| \leq \|a_i\| \cdot \|a_j\| e^{\text{const.}(vt - r_{i,j})} \quad (14)$$

ここで、 $r_{i,j}$ はスピ i と j の間の距離 ($= |i - j|$) であり、 $\|\dots\|$ はオペレータノルムである*6。また、 v はハミルトニアンに依存するパラメータである。

Lieb-Robinson bound は局所演算子 a_i の時間発展による広がりを記述し、 $a_i(t)$ がスピ i から vt 程度の広がることを定式化する。これは、2 体相関が速度 v で広がっていくことに対応し、Lieb-Robinson bound を用いることで実際にダイナミクスを介して送ることのできる情報量 (Holevo 容量) の上界を与えることができる*7。エンタングルメントエン

*6 オペレータノルムは演算子の最大特異値として定義される。

*7 S. Bravyi, M. B. Hastings, and F. Verstraete, Phys. Rev. Lett. **97**, 50401 (2006).

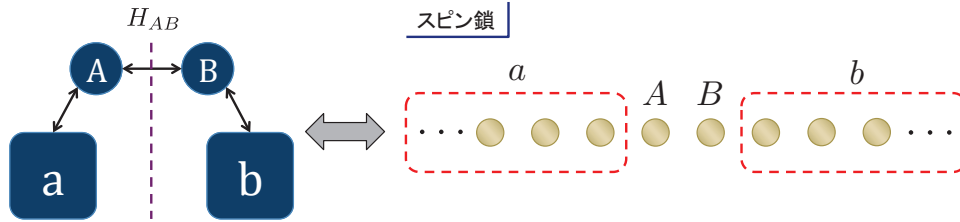


図3 SIE は図のように相互作用するシステムにおいて、 $\{a, A\}$ と $\{b, B\}$ の間のエントロピーの生成率の上界を与える。システム a と b は $\{a, A\}$ と $\{b, B\}$ の相互作用に寄与しない部分であり、エントロピー生成に寄与するのは境界相互作用 H_{AB} のみとなる。

トロピーが時間とともにどのくらい生成するかを見るために、図2のように初期状態が系1と系2の直積状態 $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ で与えられるとしてみる。このとき時間発展によって、相関は境界から $\mathcal{O}(t)$ くらいにあるスピン間に形成されると考えられる。その結果、エンタングルメントエントロピーも時間とともに、 $\mathcal{O}(t)$ の早さで増大すると見積もれる。この点を数学的に厳密にしたのが以下に述べる Small incremental entangling 定理である。

3.2 Small incremental entangling (SIE) 定理

エンタングルメントエントロピー (11) の生成速度の上界を数学的に与える Small incremental entangling (SIE) 定理を紹介する。

まず、システムを図3に簡単に示す。システムは4つの部分系 a, b, A, B で構成されるとし、これらの部分系の次元を d_a, d_b, d_A, d_B で与える。そして、時間発展演算子として $U(t) = e^{-it(H_{aA} + H_{bB} + H_{AB})}$ を定義する。

以下では、このシステムで定義される純粋状態 $|\psi\rangle$ を考えることにする。このとき、問題として「時間発展による部分系 $\{a, A\}$ と $\{b, B\}$ の間のエンタングルメントエントロピーの生成率の上界はどのように与えられるか？」を考える。ここで、エンタングルメントエントロピーは式 (11) で定義しており、時間 t 後の状態 $U(t)|\psi\rangle$ のエンタングルメントエントロピーを $S[\psi(t)]$ と表記する。このとき、エントロピー生成率は

$$\Gamma(t) := \frac{dS[\psi(t)]}{dt} \tag{15}$$

で与えられる。ここで、問題となるのは $\Gamma(t)$ の上界がどのように与えられるか、である。これに対して S. Bravyi、及び A. Kitaev によってエントロピー生成率の上界が Small incremental entangling (SIE) 予想として与えられた*8

$$\Gamma(t) \leq c \|H_{AB}\| \log d \quad \text{with} \quad d = \min(d_A, d_B) \tag{16}$$

として与える。但し、 c は次元 d に依存しない $\mathcal{O}(1)$ の定数である。この予想は2013年に K. V. Acoleyen らによって証明され、 $c = 18$ として上記の上界が数学的に厳密に証明された。*9

SIE 定理はスピン系に限らず任意の量子系で成立するが、一次元の $(1/2)$ スピン系のハミルトニアン (1) に適用すると、図3にあるように、 A と B が境界部分のスピンで、 a, b が残りの部分に対応する。すなわち $d_A = d_B = 2$ であるから、エントロピー生成率の上界は $18 \|H_{AB}\| \log 2$ となる。以上から、スピン系においてエンタングルメントエントロピーの増加率は時間に比例して増えていくことが分かった。

*8 S. Bravyi, Phys. Rev. A **76**, 052319 (2007).

*9 K. V. Acoleyen, M. Mariën and F. Verstraete, Phys. Rev. Lett. **111**, 170501 (2013).

4 行列積状態 (Matrix Product State)

平均場近似はスピン系の任意の分割に対して、エンタングルメントエントロピーが0になる場合にのみ精密になる。一方で、短時間の時間発展後であれば、SIE 定理からエンタングルメントエントロピーは小さく抑えられていることが分かっている。そこで、「エンタングルメントエントロピーが0ではないが小さいときに、状態を近似することはできないだろうか?」という疑問が出てくる。この疑問に答えるのが、以下で述べる行列積状態である*10。

4.1 定義

N 個の $(1/2)$ スピン系で定義されるヒルベルト空間内の一般的な状態 $|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle = \sum_{z_1=0}^1 \sum_{z_2=0}^1 \cdots \sum_{z_N=0}^1 f(z_1, z_2, \dots, z_N) |z_1, z_2, \dots, z_N\rangle, \quad (17)$$

と表現される。ここで、 $|z_1, z_2, \dots, z_N\rangle \equiv |z_1\rangle \otimes |z_2\rangle \otimes \cdots \otimes |z_N\rangle$ と定義する、また $f(z_1, z_2, \dots, z_N)$ は $\{z_1, z_2, \dots, z_N\}$ に関する離散的な関数である。例えば、 $f(z_1, z_2, \dots, z_N) = \frac{1}{2^{N/2}}$ であれば、

$$|\psi\rangle = \sum_{z_1=0}^1 \sum_{z_2=0}^1 \cdots \sum_{z_N=0}^1 \frac{1}{2^{N/2}} |z_1, z_2, \dots, z_N\rangle = |+, +, \dots, +\rangle \quad (18)$$

で与えられる ($|+\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$)。一般に、状態を記述するパラメータの数は 2^N 個あるため、 $N \gtrsim 40$ くらいで計算機のメモリは足りなくなってしまう。

そこで、 $f(z_1, z_2, \dots, z_N)$ のより簡略な記述を目指すことにする。関数 $f(z_1, z_2, \dots, z_N)$ が以下の形式で与えられる場合に、行列積状態, Matrix product state (MPS), と呼ぶ:

$$f(z_1, z_2, \dots, z_N) = \vec{L} A_1^{(z_1)} A_2^{(z_2)} \cdots A_N^{(z_N)} \vec{R}, \quad (19)$$

ここで、 $\{A_i^{(z_i)}\}_{i=1}^N$ は $D \times D$ の行列であり、 $z_i = \{0, 1\}$ の各値に対して一つの行列が対応している。また、 \vec{L}, \vec{R} はそれぞれ D 次元のベクトルである。このように状態が記述できた場合、パラメータの数は 2^N から ND^2 まで減ることになる。行列次元 D を一般に「ボンド次元」と呼び、 D が大きくなるほど行列積状態で記述できる状態の幅は広がるが、必要なパラメータ数も多くなる。

行列積状態の一例を示すために、2 スピン系を考える。このとき、ある状態 $|\psi\rangle$ を MPS で表すと、

$$|\psi\rangle = \vec{L} A_1^{(0)} A_2^{(0)} \vec{R} |0, 0\rangle + \vec{L} A_1^{(0)} A_2^{(1)} \vec{R} |0, 1\rangle + \vec{L} A_1^{(1)} A_2^{(0)} \vec{R} |1, 0\rangle + \vec{L} A_1^{(1)} A_2^{(1)} \vec{R} |1, 1\rangle \quad (20)$$

となる。ここで、 $|\psi\rangle = (|0, 0\rangle + |1, 1\rangle)/\sqrt{2}$ を MPS で表現すると、 $D = 2$ として、

$$A^{(0)} = I, \quad A^{(1)} = \sigma^x, \quad \vec{L} = \{1, 0\}, \quad \vec{R} = \{1/\sqrt{2}, 0\} \quad (21)$$

と取ると実現できる。

行列積状態を表現する際には、図4のようにグラフを用いて表現すると便利であることが多い。ボックスの中に行列、及びベクトルを対応させて1次元のグラフで表現する。ボックスから出る足が1本であればベクトル、2本であれば行列

*10 行列積状態に関する最も初等的な文献は以下を参照: U. Schollwöck, Annals of Physics, **326**, 96-192 (2011).

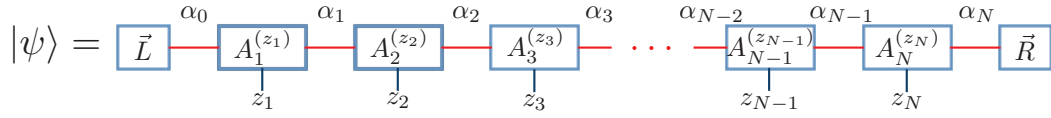


図4 (グラフ表記) 行列積状態。ボックスに一つの行列、またはベクトルが対応する。行列の足について全て和を取っていくことで、係数 $f(z_1, z_2, \dots, z_N)$ が与えられる。

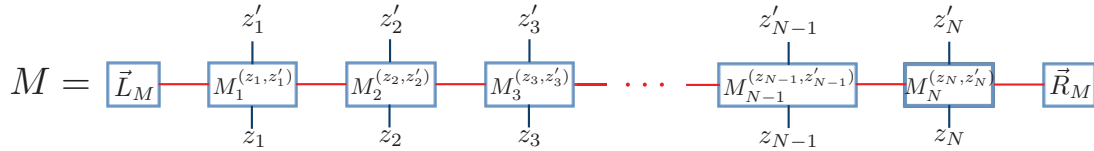


図5 (グラフ表記) 行列積演算子。

に対応していることに注意。このようなグラフが、 $f(z_1, z_2, \dots, z_N)$ の各要素

$$\begin{aligned} & \vec{L} A_1^{(z_1)} A_2^{(z_2)} \dots A_N^{(z_N)} \vec{R} \\ &= \sum_{\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_N=1}^D \vec{L}_{\alpha_0} A_{1, \alpha_0, \alpha_1}^{(z_1)} A_{2, \alpha_1, \alpha_2}^{(z_2)} A_{3, \alpha_2, \alpha_3}^{(z_3)} \dots A_{N-1, \alpha_{N-2}, \alpha_{N-1}}^{(z_{N-1})} A_{N, \alpha_{N-1}, \alpha_N}^{(z_N)} \vec{R}_{\alpha_N} \end{aligned} \quad (22)$$

を表記している。各ボックスから伸びる足には D 次元が割り当てられており (i.e. $\alpha = 1, 2, 3, \dots, D$)、グラフ表現では上式のように各足について和を取る。

4.2 行列積演算子：Matrix Product Operator

行列積による記述は演算子においても可能である。一般の演算子 M は

$$M = \sum_{z_1, z'_1=0}^1 \sum_{z_2, z'_2=0}^1 \dots \sum_{z_N, z'_N=0}^1 f(z_1, z_2, \dots, z_N, z'_1, z'_2, \dots, z'_N) |z_1, z_2, \dots, z_N\rangle \langle z'_1, z'_2, \dots, z'_N|, \quad (23)$$

の形で表現できるが、Matrix Product Operator では関数 $f(z_1, z_2, \dots, z_N, z'_1, z'_2, \dots, z'_N)$ を行列積状態のときと同様に、

$$f(z_1, z_2, \dots, z_N, z'_1, z'_2, \dots, z'_N) = \vec{L}_M M_1^{(z_1, z'_1)} M_2^{(z_2, z'_2)} \dots M_N^{(z_N, z'_N)} \vec{R}_M, \quad (24)$$

の形に表現する。ここで、 $\{M_i^{(z_i, z'_i)}\}_{i=1}^N$ は $D \times D$ の行列であり、 (z_i, z'_i) の一つの組み合わせに対して一つの行列が対応している。

4.3 物理量の期待値

行列積状態で表現できる状態 $|\psi\rangle$ に演算子 M をかけると、図6のようにより大きなボンド次元を持つ行列積状態で表現できる。すなわち、 $M|\psi\rangle$ は新しい行列積状態として、

$$M|\psi\rangle = \sum_{z_1=0}^1 \sum_{z_2=0}^1 \dots \sum_{z_N=0}^1 \vec{L} \tilde{A}_1^{(z_1)} \tilde{A}_2^{(z_2)} \tilde{A}_3^{(z_3)} \dots \tilde{A}_{N-1}^{(z_{N-1})} \tilde{A}_N^{(z_N)} \vec{R} |z_1, z_2, \dots, z_N\rangle \quad (25)$$

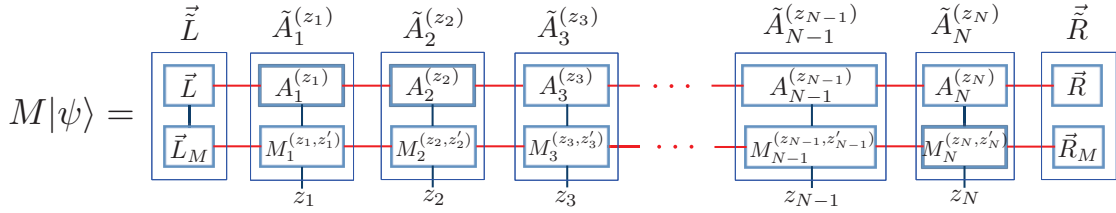


図6 (グラフ表記) 行列積状態に対する演算子の乗算.

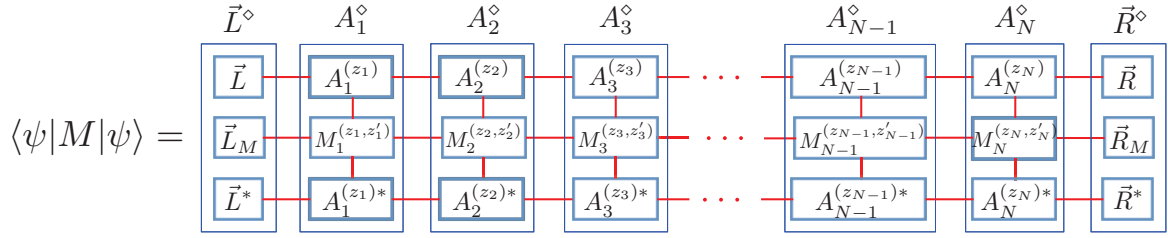


図7 (グラフ表記) 行列積状態を用いた期待値の計算.

となる。ここで、 $\vec{L} := \vec{L} \otimes \vec{L}_M$, $\vec{R} := \vec{R} \otimes \vec{R}_M$, $\tilde{A}_i^{(z_i)} := A_i^{(0)} \otimes M_i^{(0, z_i)} + A_i^{(1)} \otimes M_i^{(1, z_i)}$ であり、 $\{\tilde{A}_i^{(z_i)}\}_{i=1}^N$ は $D^2 \times D^2$ の行列形式を取る。最後に、 M に関する期待値は

$$\begin{aligned} \vec{L}^\diamond &:= \vec{L} \otimes \vec{L}_M \otimes \vec{L}^*, & \vec{R}^\diamond &:= \vec{R} \otimes \vec{R}_M \otimes \vec{R}^* \\ A_i^\diamond &:= A_i^{(0)} \otimes M_i^{(0,0)} \otimes A_i^{(0)*} + A_i^{(0)} \otimes M_i^{(0,1)} \otimes A_i^{(1)*} + A_i^{(1)} \otimes M_i^{(1,0)} \otimes A_i^{(0)*} + A_i^{(1)} \otimes M_i^{(1,1)} \otimes A_i^{(1)*} \end{aligned} \quad (26)$$

を用いて、

$$\langle\psi|M|\psi\rangle = \vec{L}^\diamond A_1^\diamond A_2^\diamond \cdots A_N^\diamond \vec{R}^\diamond \quad (27)$$

と表現される。これは、 $D^3 \times D^3$ の行列 $\{A_i^\diamond\}_{i=1}^N$ の内積を用いて与えられ、図7のようにグラフ表現することができる。

4.4 行列積状態とエンタングルメントエントロピーの関係

任意の状態を考える場合には、行列積状態による状態の近似は非常に精度の悪いものとなっている。これは行列積状態がシュミット分解を D 次で打ち切っている近似に対応するからである (図8)。以下のようにスピン $\{1, 2, \dots, i\}$ とスピン $\{i+1, i+2, \dots, N\}$ で分割すると、

$$\vec{R}_s^{(z_i)} := \{A_{1,s}^{(z_i)}, A_{2,s}^{(z_i)}, \dots, A_{D,s}^{(z_i)}\}, \quad \vec{L}_s^{(z_{i+1})} := \{A_{s,1}^{(z_{i+1})}, A_{s,2}^{(z_{i+1})}, \dots, A_{s,D}^{(z_{i+1})}\} \quad (28)$$

のベクトルを用いて、

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{z_1, z_2, \dots, z_N=0}^1 \vec{L} A_1^{(z_1)} A_2^{(z_2)} \cdots A_N^{(z_N)} \vec{R} |z_1, z_2, \dots, z_N\rangle \\ &= \sum_{s=1}^D \left(\sum_{z_1, z_2, \dots, z_i=0}^1 \vec{L} A_1^{(z_1)} A_2^{(z_2)} \cdots A_{i-1}^{(z_{i-1})} \vec{R}_s^{(z_i)} |z_1, z_2, \dots, z_i\rangle \right) \\ &\quad \otimes \left(\sum_{z_{i+1}, z_{i+2}, \dots, z_N=0}^1 \vec{L}_s^{(z_{i+1})} A_{i+2}^{(z_{i+2})} A_{i+3}^{(z_{i+3})} \cdots A_N^{(z_N)} \vec{R} |z_{i+1}, z_{i+2}, \dots, z_N\rangle \right) = \sum_{s=1}^D \alpha_s |\phi_{1s}\rangle \otimes |\phi_{2s}\rangle \end{aligned} \quad (29)$$

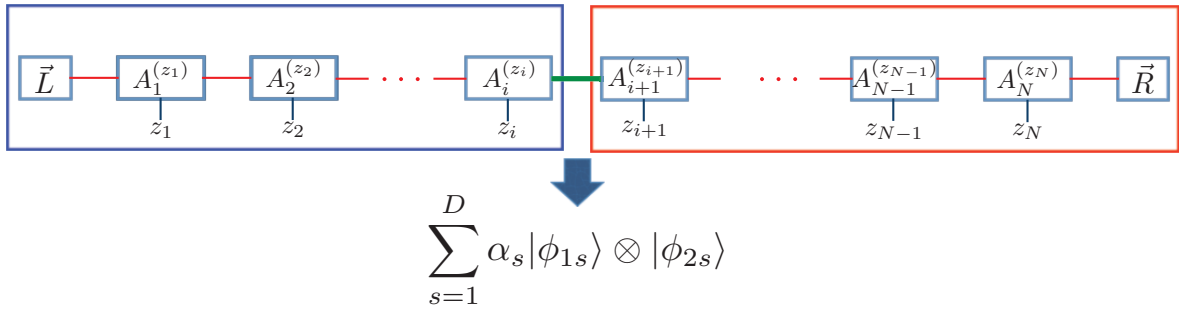


図8 行列積状態のエンタングルメント。行列積状態は任意の分割に対して高々 D 個の直積状態の和で表現でき、エントロピーは常に $\log D$ より小さくなる。

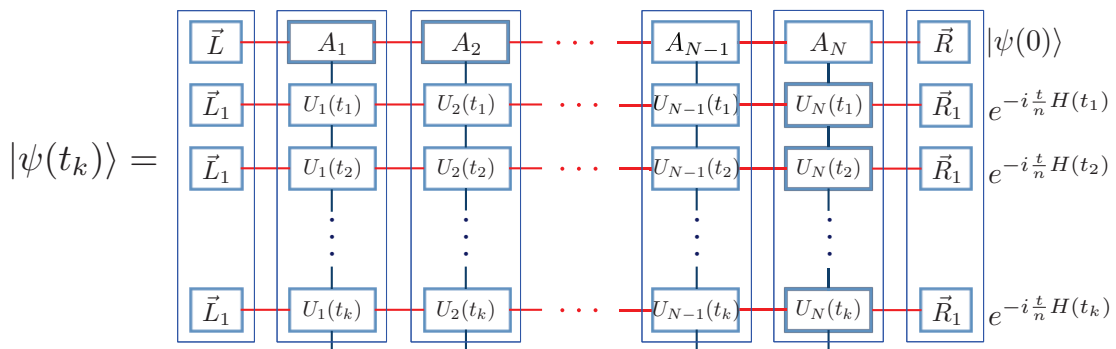


図9 TEBDの概略図。初期状態 $|\psi(0)\rangle$ を $\{A_i\}_{i=1}^N$ の行列積状態 (ボンド次元 D)、各ステップ t/n のユニタリー変換を $\{U_i(t_m)\}_{i=1}^N$ の行列積演算子 (ボンド次元 D_H) で表現する。このとき、時間発展によりボンド次元が DD_H^k と増加するので、各ステップごとに縮約して計算を実行していく。

と書ける。ここで、 $\{|\phi_{1s}\rangle\}_{s=1}^D, \{|\phi_{2s}\rangle\}_{s=1}^D$ は互いに直交しているとは限らない。従って、行列積状態のエンタングルメントエントロピーは高々 $\log D$ であり、これ以上のエンタングルメントを持つような状態を記述しようとすると精度が落ちてしまう。

4.5 Time-evolving block decimation (TEBD)

初期状態を直積状態としたときの時間発展を考えてみると、SIE 定理によりエンタングルメントエントロピーの生成率が不等式 (16) で抑えられることから、時間 t の後はエントロピー $\mathcal{O}(t)$ 程度である。従って、行列積状態 $D = e^{\mathcal{O}(t)}$ と取ると効率的な記述ができることを意味する。量子系の時間発展を、行列積状態を用いて効率計算する方法を Time-evolving block decimation (TEBD) と呼ぶ^{*11}。

TEBD では時間発展演算子 $U(0, t) = \mathcal{T}[e^{-i \int_0^t H(t) dt}]$ を

$$U(0, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} e^{-i \frac{t}{n} H(t_n)} e^{-i \frac{t}{n} H(t_{n-1})} e^{-i \frac{t}{n} H(t_{n-2})} \dots e^{-i \frac{t}{n} H(t_2)} e^{-i \frac{t}{n} H(t_1)} \quad \text{with } t_m := \frac{mt}{n} \quad (30)$$

と分解する。そして、

$$e^{-i \frac{t}{n} H(t_{n-1})} = 1 - i \frac{t}{n} H(t_{n-1}) + \mathcal{O}(n^{-2}) \quad (31)$$

^{*11} G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **91**, 147902 (2003).

を行列積演算子形式に変換した上で、初期状態 $|\psi\rangle$ に乗算していく (図6参照)。ハミルトニアンは相互作用が短距離であれば、一般的に小さいボンド次元の行列積演算子に変換できることが知られている^{*12}。

このとき、ユニタリー変換の行列積演算子がボンド次元 D_H を持ち、初期状態 $|\psi(0)\rangle$ を記述する行列積状態がボンド次元 D を取るとすると、 k ステップ後に

$$|\psi(t_k)\rangle = e^{-i\frac{t}{n}H(t_k)}e^{-i\frac{t}{n}H(t_{k-1})}\dots e^{-i\frac{t}{n}H(t_2)}e^{-i\frac{t}{n}H(t_1)}|\psi(0)\rangle \quad (32)$$

はボンド次元 DD_H^k の行列積状態になってしまう (図9)。TEBD のアルゴリズムでは、各ステップの計算のたびにボンド次元 $D \times D$ の行列に縮約していくことで計算を行っていく具体的には、状態を2分割してシュミット分解 (7) した上で特異値の小さい状態を切り捨てる。アルゴリズムを組む際には、行列積状態でカノニカル形式と呼ばれる形式をとることで効率的な計算が行える^{*13}。

TEBD では、状態 $|\psi(t)\rangle$ をボンド次元 D の行列積状態で近似するため、エンタングルメントエントロピーが $\mathcal{O}(\log D)$ で抑えられる場合に限られる。これは時間にして、 $t \lesssim \log D$ で成立する近似であることを意味する。従って、ダイナミクスの時間が長くなると、ボンド次元のサイズも時間とともに指数増大してしまうため、TEBD では長時間の数値計算は難しい。TEBD が長時間に渡って有効であるような例として、低エネルギー領域のダイナミクスが挙げられる。一般的に、低エネルギー状態においては、エンタングルメントエントロピーが小さく抑えられることが知られており^{*14}、長時間後であっても状態 $|\psi(t)\rangle$ は小さなボンド次元 D で良く近似される。これを用いることで、例えば時間周期系^{*15}におけるエネルギー吸収のシミュレーションが可能になる^{*16}。

^{*12} B. Pirvu, V. Murg, J. I. Cirac, and F. Verstraete, *New J. Phys.* **12**, 25012 (2010).

^{*13} カノニカル形式は MPS の実際のアルゴリズムを組む際に本質的な役割を果たす。文献 [U. Schollwöck, *Annals of Physics*, **326**, 96-192 (2011)] の 4.4 節を参照。

^{*14} F.G.S.L. Brandão and M. Cramer, *Phys. Rev. B* **92**, 115134 (2015).

^{*15} これは、式 (2) でハミルトニアン $H(t)$ の時間依存性が $H(t) = H(t+T)$ (T :周期) のように時間に関して周期的構造を持っている場合を指す。

^{*16} T. Kuwahara, T. Mori, and K. Saito, *Ann. Phys. (N. Y.)* **367**, 96 (2016).