

行列積表現による演算子の繰込み群と MPS ライブラリの開発

○中谷 直輝¹, Garnet K.-L. Chan²¹ 北大触媒研, ² Princeton Univ.

naokin@cat.hokudai.ac.jp

DMRG 法において波動関数は、各分子軌道に関する行列 $\{A^i\}$ の積で表現され、行列積状態(MPS)と呼ばれる(式(1))。ここで n_i は i 番目の分子軌道の占有状態を表す添え字である。

$$|\Psi\rangle = \sum_{n_1 \cdots n_k} A^{n_1} \cdots A^{n_i} \cdots A^{n_k} |n_1 \cdots n_k\rangle \quad (1)$$

MPS 表現の利点は、各行列の次元をある一定数 M で近似することで、Fock 空間を張りながらも最適化すべきパラメータの数を圧縮できることである。DMRG 法はこの MPS 表現に対する変分原理から導かれており、多体状態を記述する有効な手法として物性物理を中心に広く利用されている。本研究では、同じアイデアに基づいて演算子の行列積表現である行列積演算子(MPO)の効率的な生成アルゴリズムの開発を行った。これらの行列積表現は当然ながら、波動関数と演算子の性質を持つため、波動関数と演算子の代数計算は原理的に行列積表現を使って書き下すことが可能である。この性質を簡便に利用できるように、MPO を一般化された行列、MPS を一般化されたベクトルとして取り扱うことが可能な線形代数ライブラリの開発も併せて行った。今回はデモンストレーションとして、波動関数の虚時間発展による基底状態の計算を取り上げる。

虚時間発展演算子は、 $e^{-\hat{H}\tau}$ (\hat{H} は系のハミルトニアン、 τ は虚時間)と表される。本研究では、虚時間発展演算子を MPO 表現で表すことを考える。まず、虚時間発展演算子の指数関数部分を Taylor 展開し、式(2)のようにある次数までを考慮することにする。

$$e^{-\hat{H}\tau} = \hat{1} - \hat{H}\tau + \frac{1}{2!} \hat{H}^2 \tau^2 - \frac{1}{3!} \hat{H}^3 \tau^3 + \mathcal{O}(\tau^4) \quad (2)$$

電子系を考えると、 \hat{H} は 2 体の演算子となることから、例えば式中の \hat{H}^2 は 4 体、 \hat{H}^3 は 6 体の演算子となる。このような高次の多体演算子の取り扱い、従来の量子計算の枠組みでは困難であるため、一般的には $\hat{1} - \hat{H}\tau$ で近似してしまうことが多い。本研究では MPO を用いて多体演算子を近似的に表現することで、さらに高次の項まで取り込むことを可能にした。時間発展演算子の MPO 表現さえ与えられれば、これを MPS 波動関数に対して順次掛けていくことで時間発展の計算が可能である。この掛け算は、DMRG 法で利用される sweep アルゴリズムによって効率的に計算可能である。

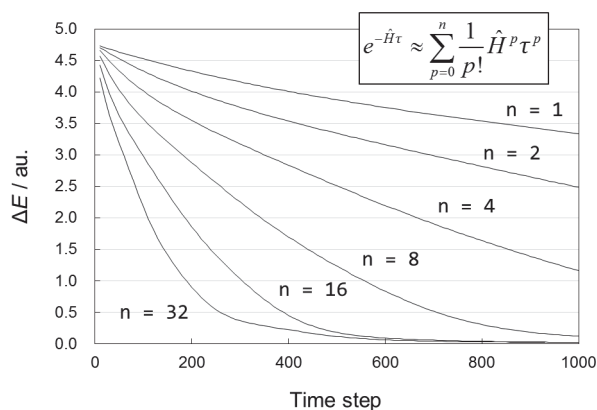


Figure 1 Energy convergence of imaginary time-evolution for C₂₀H₂₂ molecule. Note that n is the order of Taylor series incorporated in the propagator.

本研究では、これを BLAS の行列-ベクトル積サブルーチン GEMV と同様の形式で実装し、代数ライブラリとして利用できるようにデザインした。

Figure 1 に C₂₀H₂₀ 分子の full- π valence-CI に対する虚時間発展計算の数値結果を示す。最大で Taylor 展開の 32 次までを考慮した虚時間発展シミュレーションを行った結果、エネルギーはすみやかに基底状態へ収束した。このことから、MPO 表現を利用することで多体演算子を精度良くかつコンパクトに取り扱うことが出来ると考えられる。