

基礎物理研究所 研究会 2014年12月15日

Talk# O2

DMRG線形応答理論と強相関系の励起状態計算

北海道大学触媒化学研究センター

中谷直輝



概要

行列積状態(MPS)と密度行列繰込み群(DMRG)

時間依存MPS方程式と線形応答理論

Davidson型の固有値計算アルゴリズムによるMPS-RPA方程式の解法

S. Wouters, N. Nakatani, D. V. Neck, G. K.-L. Chan, *Phys. Rev. B* **88**, 075122 (2013)

N. Nakatani, S. Wouters, D. V. Neck, G. K.-L. Chan, *J. Phys. Chem.* **140**, 024108 (2014)

概要

行列積状態(MPS)と密度行列繰込み群(DMRG)

時間依存MPS方程式と線形応答理論

Davidson型の固有値計算アルゴリズムによるMPS-RPA方程式の解法

行列積状態(Matrix Product States, MPS)

多体波動関数(cf. 電子多体系)

$$|\Psi\rangle = \sum_{n_1 \cdots n_L} C^{n_1 \cdots n_L} |n_1 \cdots n_L\rangle \quad \text{where} \quad |n_i\rangle = \{ | \rangle, |\alpha_i\rangle, |\beta_i\rangle, |\alpha_i\beta_i\rangle \}$$

$\mathcal{O}(d^L)$ の変分自由度

$$|\Psi\rangle = \sum_{n_1 \cdots n_L} \mathbf{A}^{n_1} \cdots \mathbf{A}^{n_i} \cdots \mathbf{A}^{n_L} |n_1 \cdots n_L\rangle \quad \text{where} \quad \mathbf{A}^{n_i} = \{ A_{a_{i-1}a_i}^{n_i} \} : d \times M \times M$$

$\mathcal{O}(dM^2L)$ の変分自由度

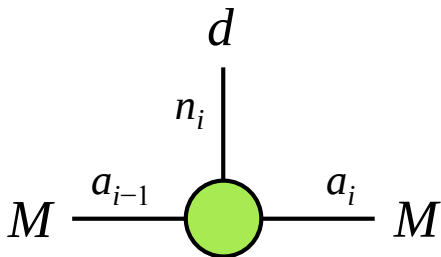
MPS波動関数の図形描写

MPS波動関数

$$|\psi\rangle = \sum_{n_1 \cdots n_L} \mathbf{A}^{n_1} \cdots \mathbf{A}^{n_i} \cdots \mathbf{A}^{n_L} |n_1 \cdots n_L\rangle \quad \text{where} \quad \mathbf{A}^{n_i} = \left\{ A_{a_{i-1}a_i}^{n_i} \right\} : d \times M \times M$$

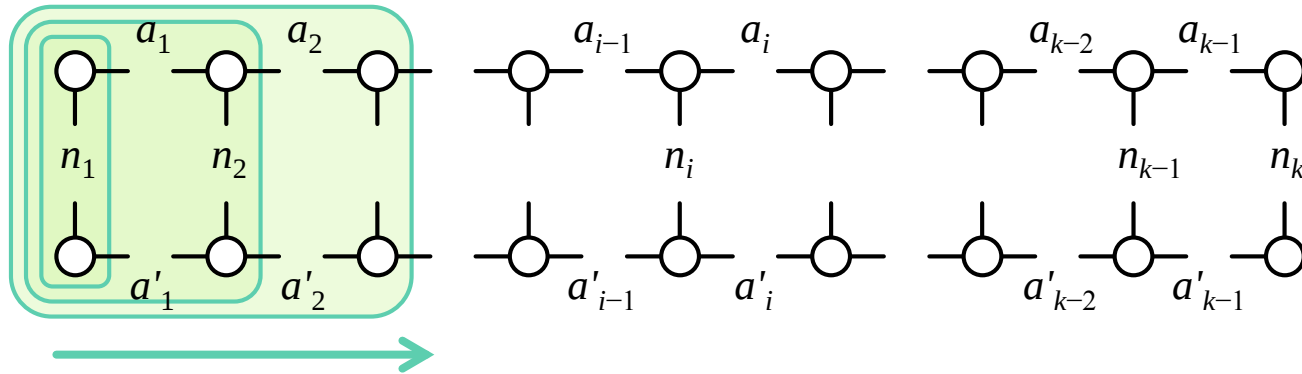
$$|\psi\rangle = \begin{array}{ccccccc} n_1 & n_2 & & n_i & & n_{k-1} & n_k \\ | & | & | & | & | & | & | \\ \bigcirc & \bigcirc & \bigcirc & \textcolor{red}{\bigcirc} & \bigcirc & \bigcirc & \bigcirc \\ a_1 & a_2 & & a_{i-1} & a_i & a_{k-2} & a_{k-1} \end{array}$$

$\mathbf{A}^{[i]}$

$$\mathbf{A}^{[i]} = \left\{ A_{a_{i-1}a_i}^{n_i} \right\} \equiv$$


波動関数の重なりと期待値の計算

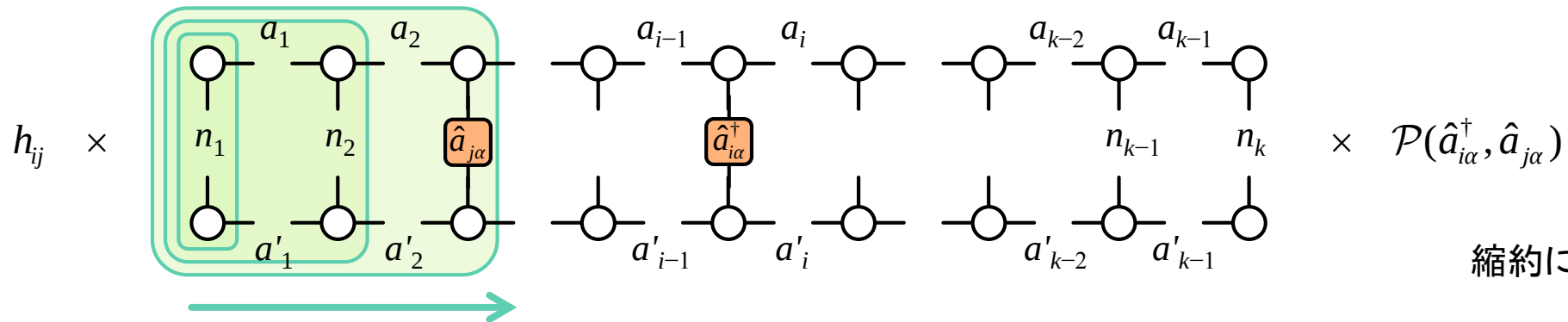
波動関数の重なり



縮約にかかるコスト

$$\mathcal{O}(M^3 L)$$

期待値の計算



縮約にかかるコスト

$$\mathcal{O}(M^3 L) \times (\text{演算子の項数})$$

Lagrangeの未定乗数法による基底状態の計算

Lagrange Multiplier

$$\mathcal{L} = \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi' \rangle + \lambda (\langle \Psi | \Psi' \rangle - 1)$$

$$= \text{Diagram 1} + \lambda \left(\text{Diagram 2} - 1 \right)$$

Diagram 1: A tensor network representing the expectation value of the Hamiltonian $\mathcal{H}$. It consists of two horizontal chains of 8 white circular nodes. A thick orange horizontal bar labeled $\mathcal{H}$ connects the two chains at each of the 8 sites.

Diagram 2: A tensor network representing the overlap $\langle \Psi | \Psi' \rangle$. It consists of two horizontal chains of 8 white circular nodes connected by 8 vertical lines, forming a grid of 8 squares.

$$\delta_i \mathcal{L} = \langle \delta_i \Psi | \mathcal{H} | \Psi' \rangle + \lambda \langle \delta_i \Psi | \Psi' \rangle$$

$$= \frac{\partial}{\partial \mathbf{A}^{[i]}} (\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi' \rangle + \lambda \langle \Psi | \Psi' \rangle)$$

$$= \text{Diagram 3} + \lambda \text{Diagram 4} = 0$$

Diagram 3: Similar to Diagram 1, but the node at site i in the bottom chain is highlighted in green. The horizontal bar is labeled $\mathcal{H}$. Indices a_{i-1} , n_i , and a_i are labeled above the nodes at sites $i-1$, i , and $i+1$ respectively.

Diagram 4: Similar to Diagram 2, but the vertical line at site i is highlighted in green. Indices a_{i-1} , n_i , and a_i are labeled above the nodes at sites $i-1$, i , and $i+1$ respectively.

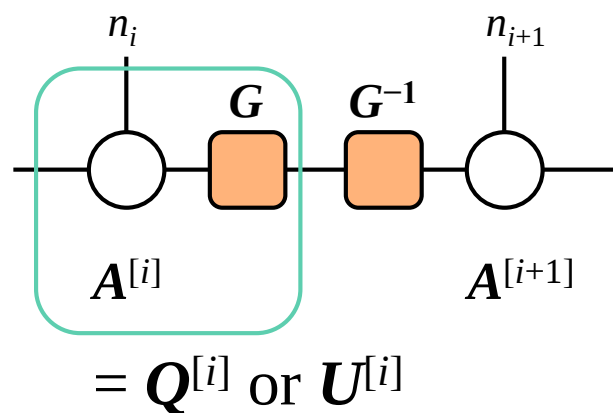
$$\mathbf{H}^{[i]} \mathbf{A}^{[i]} = E_0 \mathbf{S}^{[i]} \mathbf{A}^{[i]}$$

時間に依存しないMPS方程式

行列積のGauge自由度とCanonical表現

行列積のGauge自由度

$$AB = A(G \cdot G^{-1})B = (AG)(G^{-1}B) = A'B'$$



$$A^{[i]} = Q^{[i]} R = U^{[i]} \Sigma V^\dagger$$

where $U^{[i]\dagger} U^{[i]} = I_M$

Left-Canonical表現

行列積状態のCanonical表現

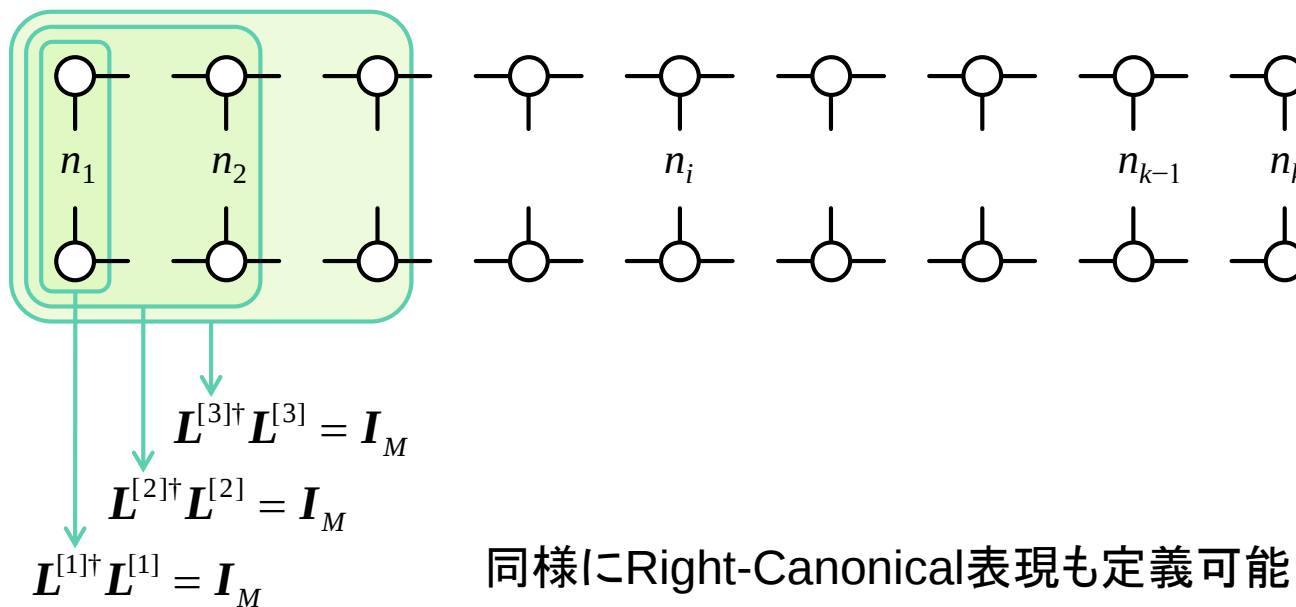
行列積状態の重なり

$$\begin{aligned}\langle \Psi | \Psi \rangle &= \sum_{n_1 \cdots n_L} \left(A^{n_1} \cdots A^{n_i} \cdots A^{n_L} \right)^\dagger A^{n_1} \cdots A^{n_i} \cdots A^{n_L} \\ &= \sum_{n_1 \cdots n_L} A^{n_L \dagger} \cdots A^{n_i \dagger} \cdots A^{n_1 \dagger} A^{n_1} \cdots A^{n_i} \cdots A^{n_L}\end{aligned}$$

Left-Canonical表現

$$Q^{[i]} \text{ or } U^{[i]} \longrightarrow L^{[i]}$$

$$L^{[i] \dagger} L^{[i]} = I_M$$

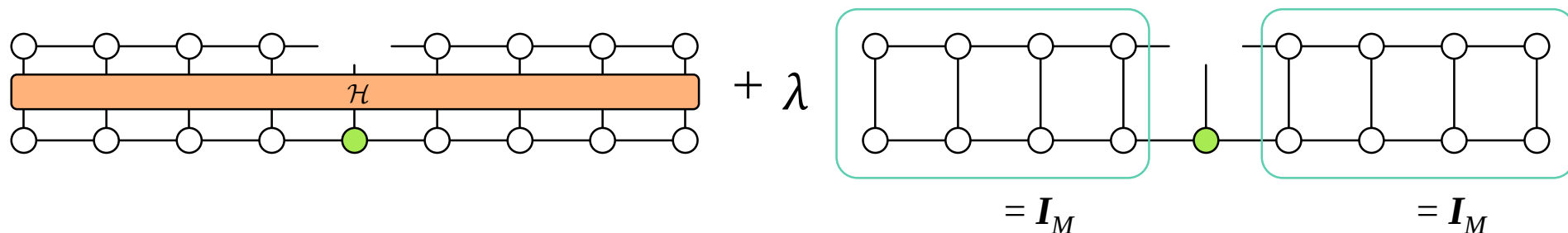


Mixed-Canonical表現

i 番目のサイトに関するmixed-canonical表現

$$|\Psi\rangle = \sum_{n_1 \cdots n_L} \mathbf{L}^{n_1} \cdots \mathbf{L}^{n_{i-1}} \boldsymbol{\psi}^{n_i} \mathbf{R}^{n_{i+1}} \cdots \mathbf{R}^{n_L} |n_1 \cdots n_L\rangle$$

where $\sum_{n_1 \cdots n_{i-1}} (\mathbf{L}^{n_1} \cdots \mathbf{L}^{n_{i-1}})^\dagger \mathbf{L}^{n_1} \cdots \mathbf{L}^{n_{i-1}} = \mathbf{I}_M$ $\sum_{n_{i+1} \cdots n_L} \mathbf{R}^{n_{i+1}} \cdots \mathbf{R}^{n_L} (\mathbf{R}^{n_{i+1}} \cdots \mathbf{R}^{n_L})^\dagger = \mathbf{I}_M$

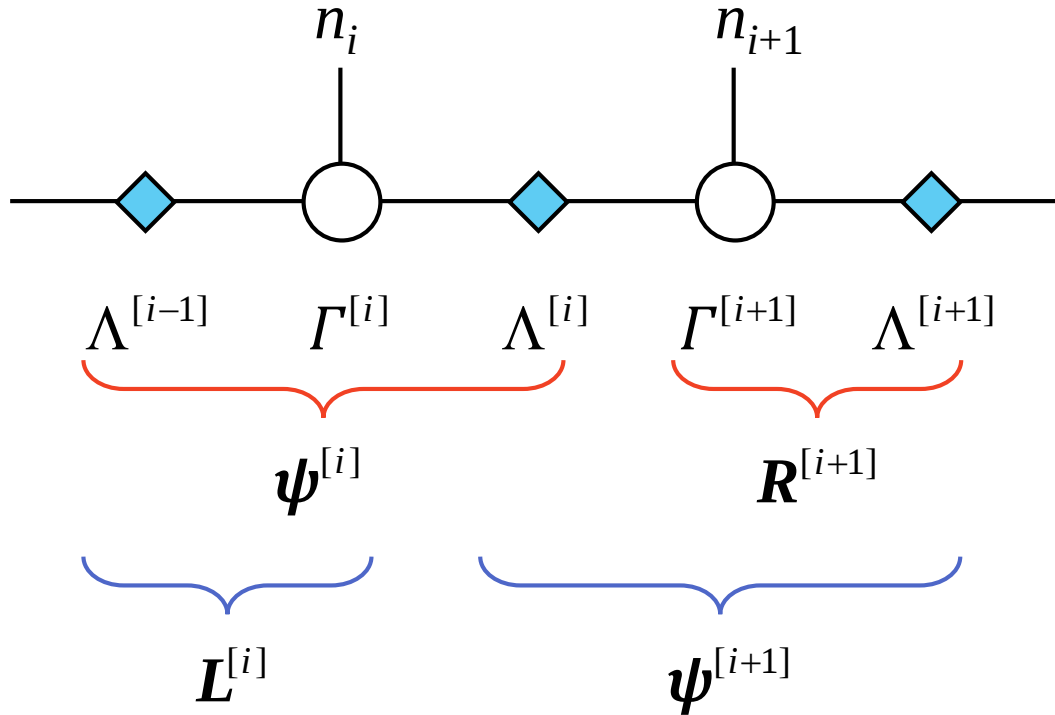


$$\mathbf{H}^{[i]} \mathbf{A}^{[i]} = \lambda \mathbf{1}^{[i]} \mathbf{A}^{[i]}$$

DMRG: Gaugeを変換しつつ全てのサイトに関してself-consistentになるように波動関数を決定

Gauge変換とsweepアルゴリズム

Vidal表現



Gaugeを変換することで

各サイトにおいて常に規格直交な基底空間を探索

$$\psi^{[i]} = L^{[i]} \Lambda^{[i]}$$

$$\psi^{[i+1]} = \Lambda^{[i]} R^{[i+1]}$$

$$\psi^{[i+1]} = L^{[i]\dagger} \psi^{[i]} R^{[i+1]} = L^{[i]\dagger} L^{[i]} \Lambda^{[i]} R^{[i+1]} = \Lambda^{[i]} R^{[i+1]}$$

概要

行列積状態(MPS)と密度行列繰込み群(DMRG)

時間依存MPS方程式と線形応答理論

Davidson型の固有値計算アルゴリズムによるMPS-RPA方程式の解法

時間依存MPS波動関数と時間依存の変分原理

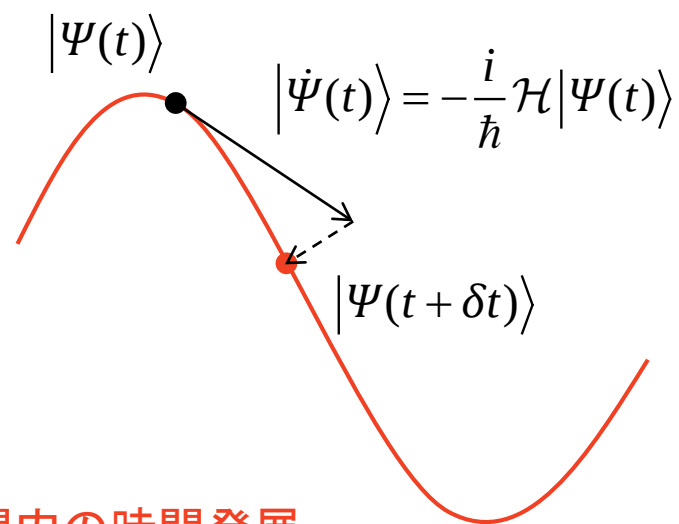
時間依存MPS波動関数

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1 \cdots n_L} \mathbf{A}_t^{n_1} \cdots \mathbf{A}_t^{n_i} \cdots \mathbf{A}_t^{n_L} |n_1 \cdots n_L\rangle \quad \mathbf{A}^{n_i}(t) \equiv \mathbf{A}_t^{n_i}$$

時間依存の変分原理

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \mathcal{H} |\Psi(t)\rangle$$

$$\langle \delta\Psi(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H} | \Psi(t) \rangle = 0$$



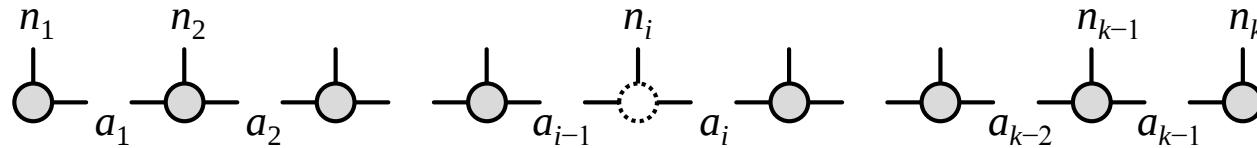
与えられたMPSの変分空間内の時間発展

—————→ t

時間依存MPS方程式

MPS波動関数の変分空間

$$|\partial_i \Psi(t)\rangle \equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{A}_t^{[i]}} |\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1 \cdots n_L} \mathbf{A}_t^{n_1} \cdots \mathbf{A}_t^{n_{i-1}} \otimes \mathbf{A}_t^{n_{i+1}} \cdots \mathbf{A}_t^{n_L} |n_1 \cdots n_L\rangle$$



$$\langle \delta \Psi(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \mathcal{H} | \Psi(t) \rangle = 0 \quad \text{where} \quad |\delta \Psi(t)\rangle = \sum_i \delta \mathbf{A}_t^{n_i} |\partial_i \Psi(t)\rangle$$

時刻*t*における時間微分を利用して時間発展シミュレーションが可能

$$i\hbar \mathbf{S}_t^{[i]} \frac{\partial \mathbf{A}_t^{[i]}}{\partial t} = \mathbf{H}_t^{[i]} \mathbf{A}_t^{[i]}$$

時間依存MPS方程式

時間依存MPS波動関数の摂動展開と線形応答理論

時間に依存する摂動 $V(t) = Ve^{-i\omega t} + V^*e^{+i\omega t}$

時間依存MPS波動関数の摂動展開

$$A_t^{n_i} = (A_0^{n_i} + \lambda B_t^{n_i} + \dots) e^{-iE_0 t}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = (\mathcal{H}_0 + V(t)) |\Psi_0\rangle$$

1次の時間依存MPS波動関数

$$\begin{aligned} |\Psi^{(1)}(t)\rangle = & \left(\sum_{n_1 \dots n_L} \mathbf{B}_t^{n_1} \dots A_0^{n_i} \dots A_0^{n_L} |n_1 \dots n_L\rangle + \dots \right. \\ & + \sum_{n_1 \dots n_L} A_0^{n_1} \dots \mathbf{B}_t^{n_i} \dots A_0^{n_L} |n_1 \dots n_L\rangle + \dots \\ & \left. + \sum_{n_1 \dots n_L} A_0^{n_1} \dots A_0^{n_i} \dots \mathbf{B}_t^{n_L} |n_1 \dots n_L\rangle \right) e^{-iE_0 t} \end{aligned}$$

MPS線形応答式

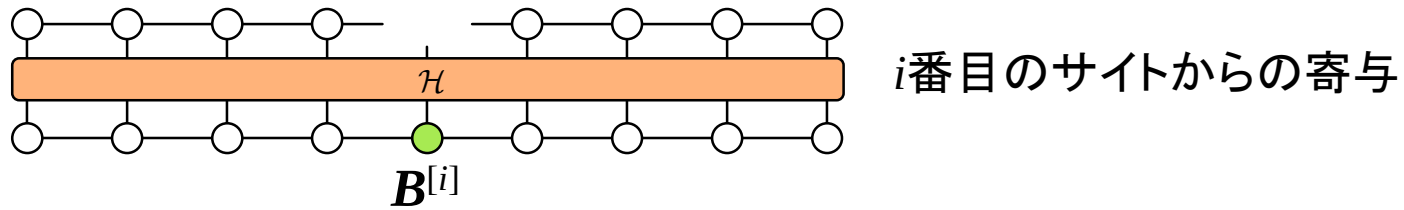
$$\begin{aligned} (\mathbf{H}_0^{[i]} - (E_0 - \omega)\mathbf{1}) \mathbf{B}_{+\omega}^{[i]} &= -\mathbf{Q}^{[i]} (\Delta \mathbf{H}_\omega^{[i]} + \mathbf{V}_0^{[i]}) \mathbf{A}_0^{[i]} \\ (\mathbf{H}_0^{[i]} - (E_0 + \omega)\mathbf{1}) \mathbf{B}_{-\omega}^{[i]} &= -\mathbf{Q}^{[i]} (\Delta \mathbf{H}_\omega^{[i]} + \mathbf{V}_0^{[i]*}) \mathbf{A}_0^{[i]} \end{aligned}$$

線形応答式の詳解

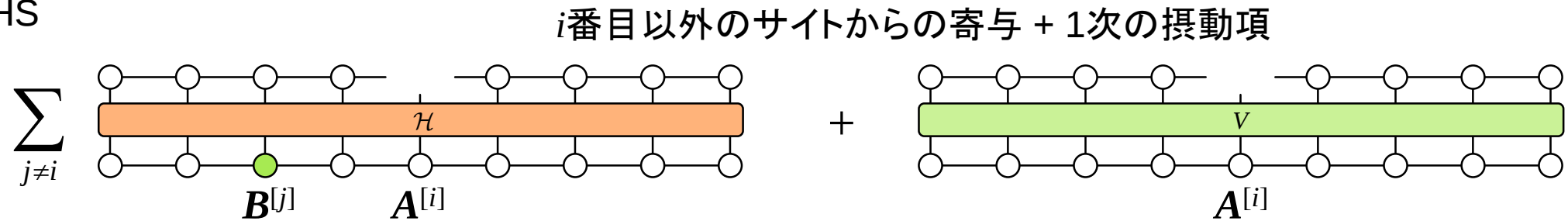
線形応答式

$$\left(\mathbf{H}_0^{[i]} - (E_0 - \omega) \mathbf{1} \right) \mathbf{B}_{+\omega}^{[i]} = -\mathbf{Q}^{[i]} \left(\Delta \mathbf{H}_\omega^{[i]} + \mathbf{V}_0^{[i]} \right) \mathbf{A}_0^{[i]}$$

LHS



RHS



i番目以外のサイトからの寄与による有効ハミルトニアンの変化

where $\Delta \mathbf{H}_\omega^{[i]} = \sum_{j \neq i}$

$\mathcal{H}$

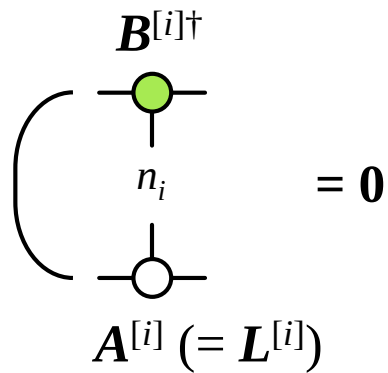
射影演算子

線形応答式

$$\left(\mathbf{H}_0^{[i]} - (E_0 - \omega) \mathbf{1} \right) \mathbf{B}_{+\omega}^{[i]} = -\mathbf{Q}^{[i]} \left(\Delta \mathbf{H}_\omega^{[i]} + \mathbf{V}_0^{[i]} \right) \mathbf{A}_0^{[i]}$$

0次の空間と直交する1次の摂動空間への射影(Gaugeの取り方に依存)

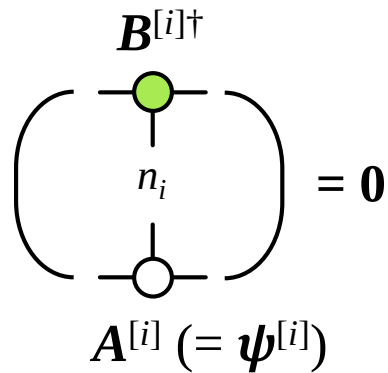
Left-Canonical表現



$$\left(\begin{array}{c} \text{---} \text{green circle} \text{---} \\ | \\ n_i \\ | \\ \text{---} \text{white circle} \text{---} \\ A^{[i]} (= L^{[i]}) \end{array} \right) = 0$$

$$\mathbf{Q}_L^{[i]} = \mathbf{I}_{dM} - \sum_{l_i} \mathbf{L}_{l_{i-1}l_i}^{n_i}{}^\dagger \mathbf{L}_{l'_{i-1}l_i}^{n'_i}$$

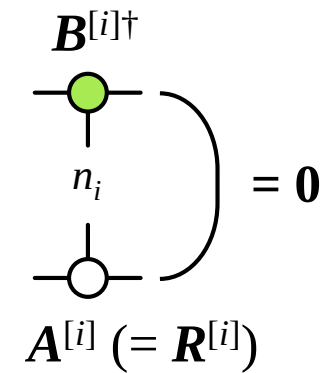
Mixed-Canonical表現



$$\left(\begin{array}{c} \text{---} \text{green circle} \text{---} \\ | \\ n_i \\ | \\ \text{---} \text{white circle} \text{---} \\ A^{[i]} (= \psi^{[i]}) \end{array} \right) = 0$$

$$\mathbf{Q}_C^{[i]} = \mathbf{I}_{dM^2} - \psi_{l_{i-1}r_i}^{n_i}{}^\dagger \psi_{l'_{i-1}r'_i}^{n'_i}$$

Right-Canonical表現



$$\left(\begin{array}{c} \text{---} \text{green circle} \text{---} \\ | \\ n_i \\ | \\ \text{---} \text{white circle} \text{---} \\ A^{[i]} (= R^{[i]}) \end{array} \right) = 0$$

$$\mathbf{Q}_R^{[i]} = \mathbf{I}_{dM} - \sum_{r_i} \mathbf{R}_{r_i r'_{i+1}}^{n'_i}{}^\dagger \mathbf{R}_{r_i r_{i+1}}^{n_i}$$

1次のMPS摂動波動関数におけるGauge自由度

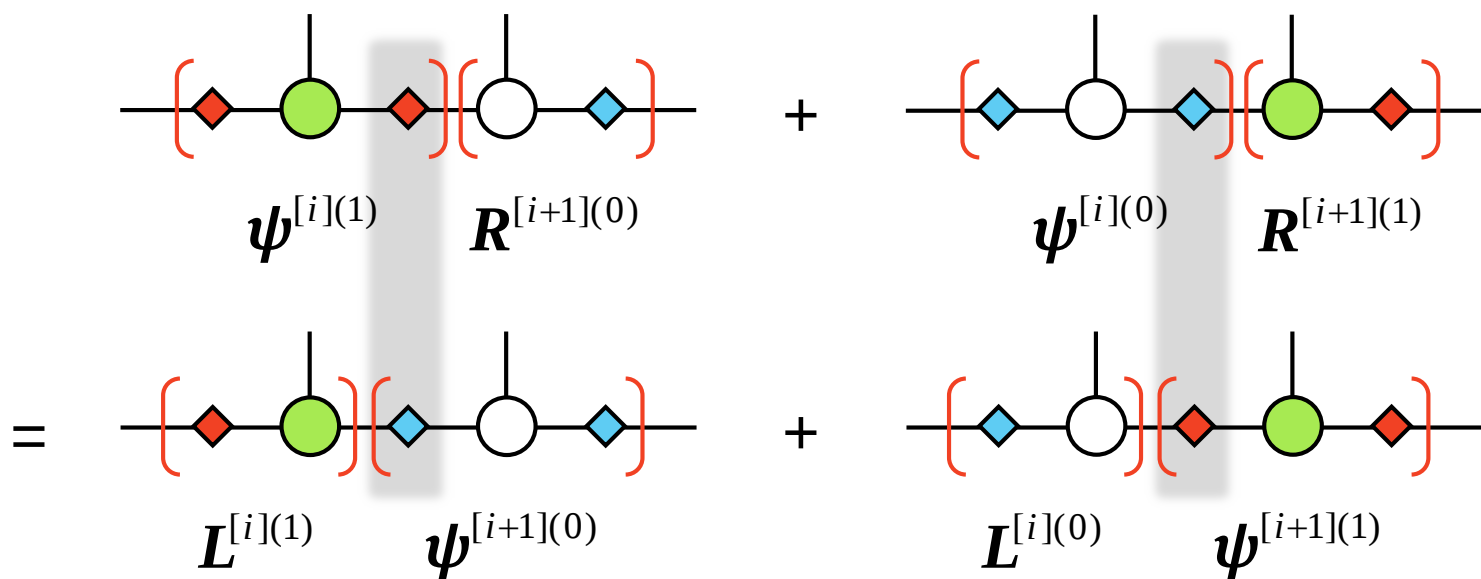
必要条件

Mixed-canonical gauge @ i -th site

$$|\Psi^{(1)}\rangle = \dots + \sum_{n_1 \dots n_L} L^{n_1(0)} \dots \psi^{n_i(1)} R^{n_{i+1}(0)} \dots R^{n_L(0)} |n_1 \dots n_L\rangle + \sum_{n_1 \dots n_L} L^{n_1(0)} \dots \psi^{n_i(0)} R^{n_{i+1}(1)} \dots R^{n_L(0)} |n_1 \dots n_L\rangle + \dots$$

Mixed-canonical gauge @ $i+1$ -th site

$$= \dots + \sum_{n_1 \dots n_L} L^{n_1(0)} \dots R^{n_i(1)} \psi^{n_{i+1}(0)} \dots R^{n_L(0)} |n_1 \dots n_L\rangle + \sum_{n_1 \dots n_L} L^{n_1(0)} \dots L^{n_i(0)} \psi^{n_{i+1}(1)} \dots R^{n_L(0)} |n_1 \dots n_L\rangle + \dots$$



1次波動関数のGauge変換と1次の繰込み行列

条件式

$$\psi^{[i](1)} R^{[i+1](0)} + \psi^{[i](0)} R^{[i+1](1)} = L^{[i](1)} \psi^{[i+1](0)} + L^{[i](0)} \psi^{[i+1](1)} \quad (1)$$

(1)に $L^{[i](0)\dagger}$ を掛けると

↓ 1次波動関数のGauge変換

$$L^{[i](0)\dagger} \psi^{[i](1)} R^{[i+1](0)} + L^{[i](0)\dagger} \psi^{[i](0)} R^{[i+1](1)} = \psi^{[i+1](1)} \quad (2)$$

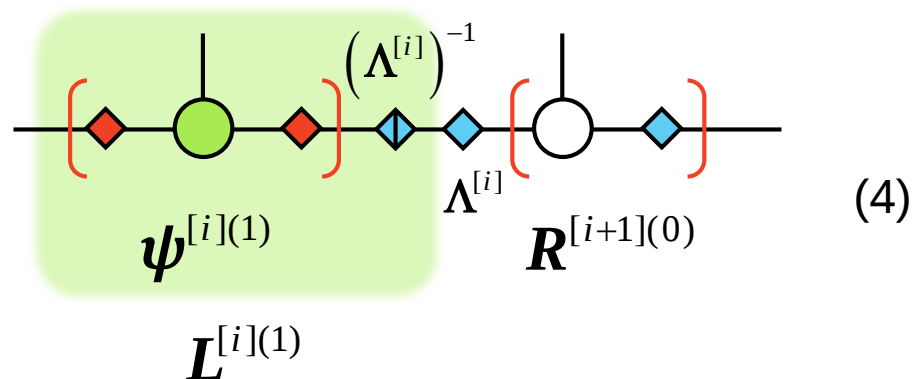
(1)に $Q_L^{[i]} = I_{dM} - L^{[i](0)} L^{[i](0)\dagger}$ を掛けると

$$Q_L^{[i]} \psi^{[i](1)} R^{[i+1](0)} = L^{[i](1)} \psi^{[i+1](0)} \quad (3)$$

(3)に $R^{[i+1](0)\dagger}$ を掛けると

$$Q_L^{[i]} \psi^{[i](1)} = L^{[i](1)} \Lambda^{[i]}$$

$$L^{[i](1)} = Q_L^{[i]} \psi^{[i](1)} (\Lambda^{[i]})^{-1}$$



概要

行列積状態(MPS)と密度行列繰込み群(DMRG)

時間依存MPS方程式と線形応答理論

Davidson型の固有値計算アルゴリズムによるMPS-RPA方程式の解法

乱雑位相近似(Random Phase Approximation, RPA)

時間依存MPS波動関数の調和近似

$$\mathbf{B}_t^{[i]} = \mathbf{X}^{[i]} e^{-i\omega t} + \mathbf{Y}^{[i]*} e^{+i\omega t}$$

時間依存Schrödinger方程式に代入して線形近似

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H} & \mathbf{W} \\ \mathbf{W}^* & \mathbf{H}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} \mathbf{S} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{S}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{Y} \end{pmatrix}$$

where

LdM^2 次元のベクトル

$$\mathbf{X} = \{ \mathbf{X}^{[1]}, \dots, \mathbf{X}^{[i]}, \dots, \mathbf{X}^{[L]} \}$$
$$\mathbf{Y} = \{ \mathbf{Y}^{[1]}, \dots, \mathbf{Y}^{[i]}, \dots, \mathbf{Y}^{[L]} \}$$

$2LdM^2 \times 2LdM^2$ 次元の非エルミート一般化固有値問題

$$\mathbf{H}_{ij} = \left\{ H_{a_{j-1}n_j a_j}^{a_{i-1}n_i a_i} \right\} = \langle \partial_i \Psi_0 | \mathcal{H} | \partial_j \Psi_0 \rangle$$

$$\mathbf{S}_{ij} = \left\{ S_{a_{j-1}n_j a_j}^{a_{i-1}n_i a_i} \right\} = \langle \partial_i \Psi_0 | \partial_j \Psi_0 \rangle$$

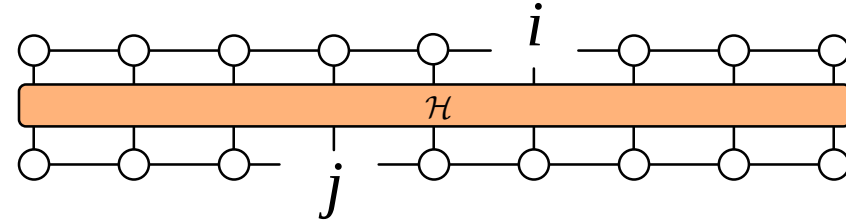
$$\mathbf{W}_{ij} = \left\{ W_{a_{j-1}n_j a_j}^{a_{i-1}n_i a_i} \right\} = \langle \partial_i \partial_j \Psi_0 | \mathcal{H} | \Psi_0 \rangle$$

それぞれ $dM^2 \times dM^2$ 次元の行列

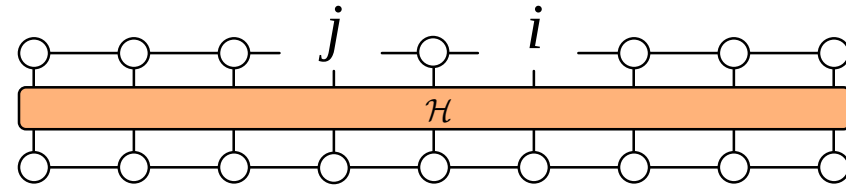
RPA方程式の詳解

各行列要素の図形表示

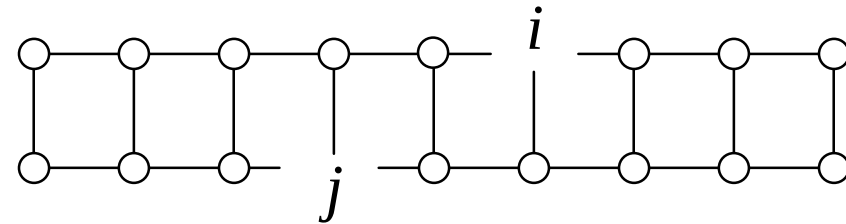
$$\mathbf{H}_{ij} = \left\{ H_{a_{j-1}n_j a_j}^{a_{i-1}n_i a_i} \right\} = \langle \partial_i \Psi_0 | \mathcal{H} | \partial_j \Psi_0 \rangle$$



$$\mathbf{W}_{ij} = \left\{ W_{a_{j-1}n_j a_j}^{a_{i-1}n_i a_i} \right\} = \langle \partial_i \partial_j \Psi_0 | \mathcal{H} | \Psi_0 \rangle$$



$$\mathbf{S}_{ij} = \left\{ S_{a_{j-1}n_j a_j}^{a_{i-1}n_i a_i} \right\} = \langle \partial_i \Psi_0 | \partial_j \Psi_0 \rangle$$



2次のMPS摂動波動関数における独立な自由度

2次の摂動空間の直交性

0次波動関数との直交性: OK

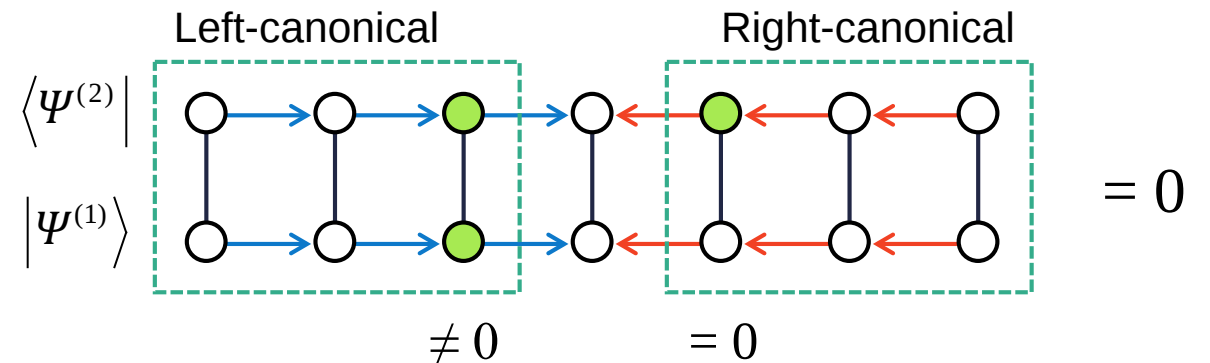
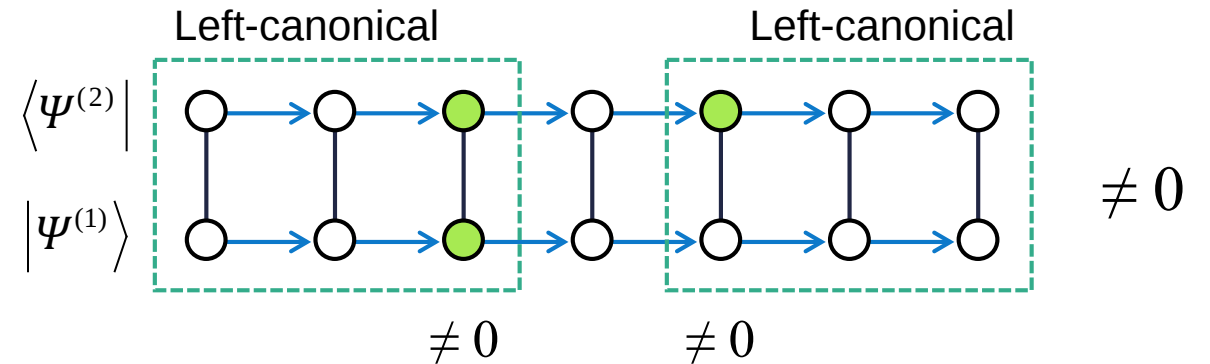
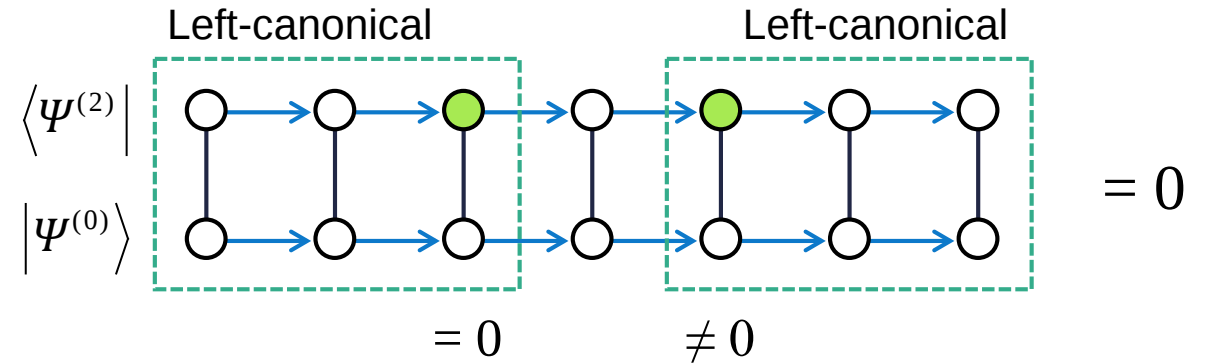
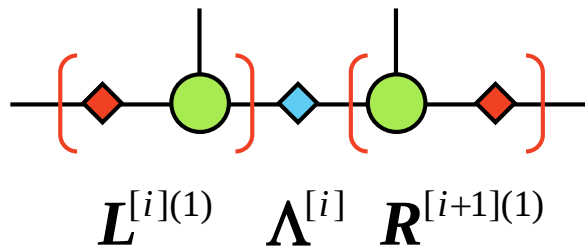
1次もしくは2次波動関数との直交性:

Gaugeの取り方に依存

Mixed-canonical表現を上手く利用することで、独立な自由度を選ぶことが可能

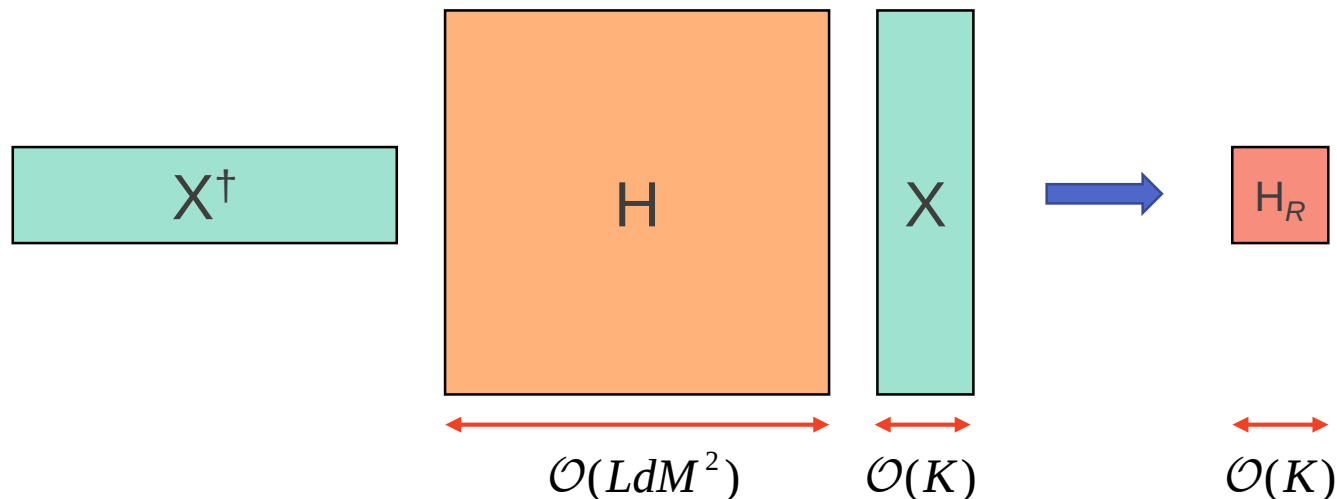
※1 Gaugeの変換は不可

※2 3次以上へは応用できない



Davidson対角化アルゴリズム

巨大次元の行列対角化: 限られた数の最小(最大)固有値だけを知りたい場合



試行ベクトルで展開された空間への射影: 小さな行列の固有値問題へ帰着させる

計算コスト $\propto$ (行列 $\times$ ベクトル演算) $\times$ 求める固有値の数

直接対角化		Hをあらわに計算		Hをあらわに計算しない
$\mathcal{O}(L^3 d^3 M^6)$	$\longrightarrow$	$\mathcal{O}(L^2 d^2 M^4 K)$	$\longrightarrow$	$\mathcal{O}(LdM^3 K) \times \mathcal{O}(N_{\text{ops.}})$
				基底状態と同じ計算オーダー

MPS-RPA方程式の解法

試行ベクトルで展開されたRPA方程式

$$\begin{pmatrix} \mathbf{H}_R & \mathbf{W}_R \\ \mathbf{W}_R^* & \mathbf{H}_R^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_X \\ \alpha_Y \end{pmatrix} = \hbar\omega \begin{pmatrix} \mathbf{S}_R & \mathbf{D}_R \\ -\mathbf{D}_R^* & -\mathbf{S}_R^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_X \\ \alpha_Y \end{pmatrix}$$

where $\{\mathbf{H}_R\}_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}_\mu^* & \mathbf{Y}_\mu^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H} & \mathbf{W} \\ \mathbf{W}^* & \mathbf{H}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{X}_\nu \\ \mathbf{Y}_\nu \end{pmatrix}$

行列要素をsweepアルゴリズムを用いて効率的に計算

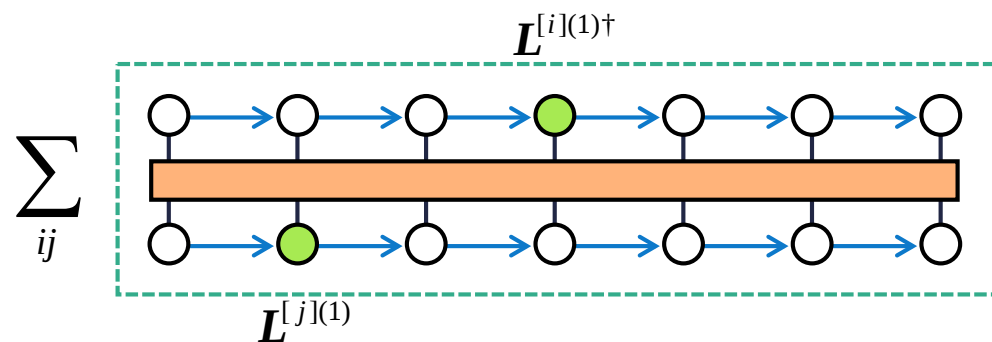
k 回目の繰り返しから $k+1$ 回目の近似固有ベクトルを計算

$$\mathbf{X}_\mu^{[i](k+1)} = \sum_{\mu'} \left(\mathbf{X}_{\mu'}^{[i](k)} \alpha_{X,\mu'\mu} + \mathbf{Y}_{\mu'}^{[i](k)} \alpha_{Y,\mu'\mu} \right)$$

$$\mathbf{Y}_\mu^{[i](k+1)} = \sum_{\mu'} \left(\mathbf{Y}_{\mu'}^{[i](k)} \alpha_{X,\mu'\mu} + \mathbf{X}_{\mu'}^{[i](k)} \alpha_{Y,\mu'\mu} \right)$$

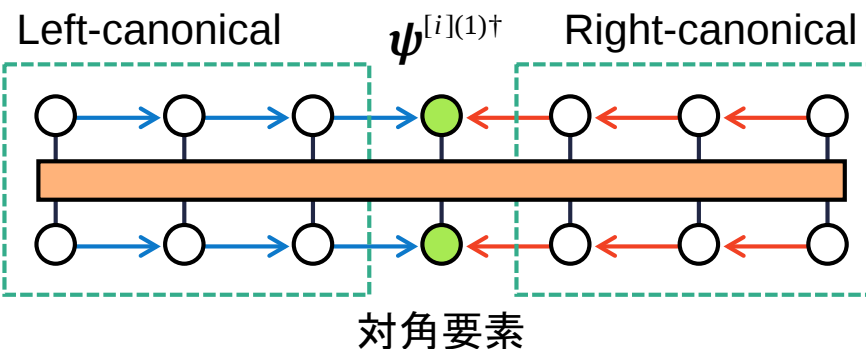
MPS-RPA方程式のsweepアルゴリズムによる解法

Left-canonical表現

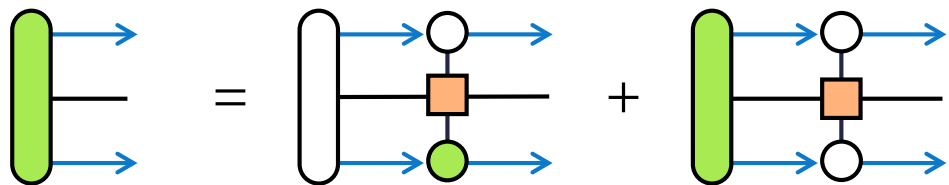


=

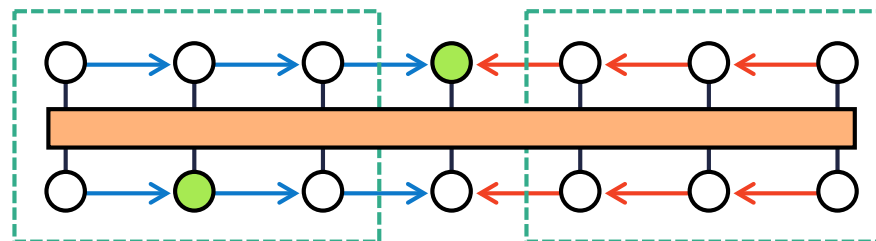
Mixed-canonical表現に変換して計算



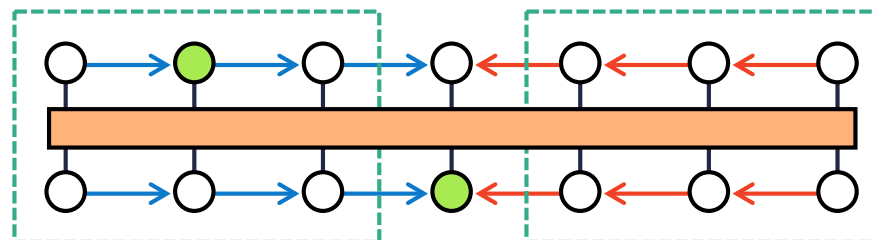
1次の繰込み演算子



$+\sum_i \sum_{j<i}$

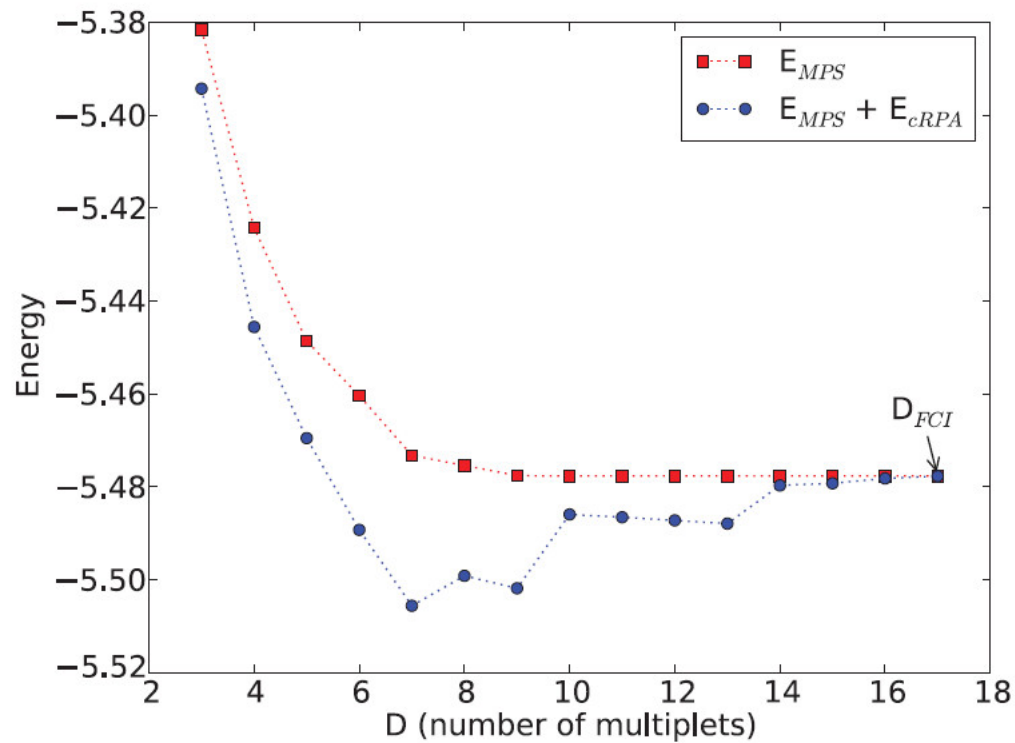


$+\sum_i \sum_{j<i}$

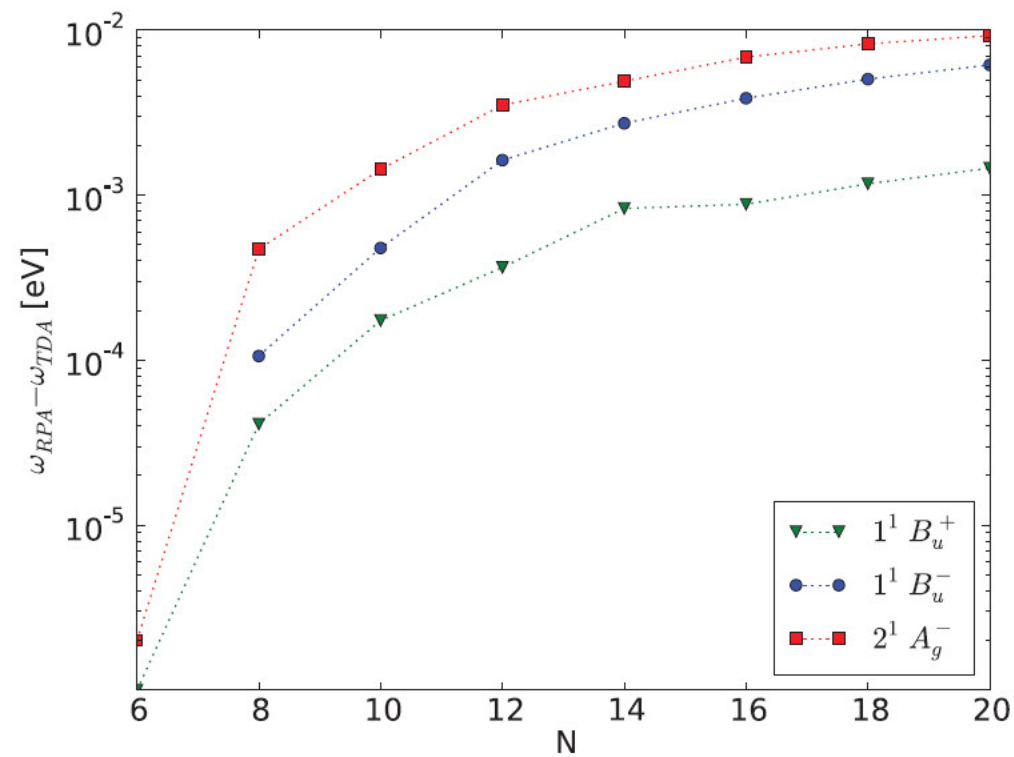


非対角要素

ベンチマーク: 1次元の格子模型



RPA E_{corr} for Hubbard ($L = 6$, $N = 4$, $U = 1$)

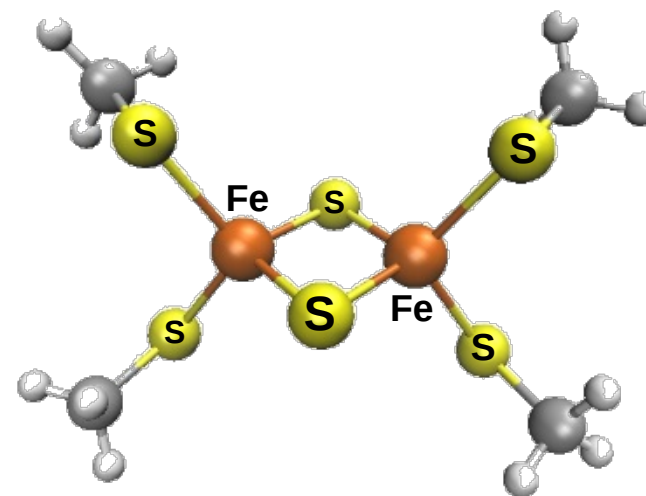
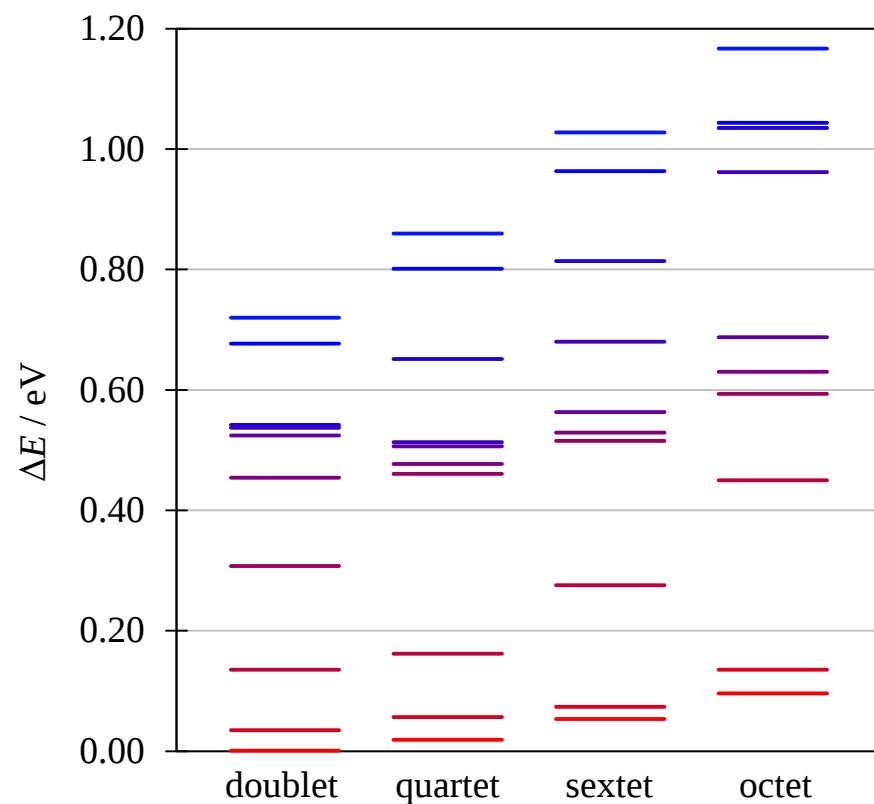


$\omega_{TDA} - \omega_{RPA}$ for PPP model ($D = 20$)

ベンチマーク: Fe₂S₂クラスターの擬縮退励起状態



Tamm-Dancoff近似による励起状態計算



線形応答のレベルで擬縮退励起状態も計算可能

まとめ: Hartree-Fock法との類似点

Hartree-Fock法 (粒子に関する平均場近似)

MPS/DMRG (サイトに関する平均場近似)

波動関数

Slater determinant

$$|\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)\rangle = \hat{A} \{ \psi_1(\mathbf{x}_1) \cdots \psi_i(\mathbf{x}_i) \cdots \psi_N(\mathbf{x}_N) \}$$

Matrix Product States

$$|\Psi(\mathbb{A})\rangle = \sum_{n_1 \cdots n_k} \text{Tr}_{\mathbb{A}} A^{n_1} \cdots A^{n_i} \cdots A^{n_k} |n_1 \cdots n_k\rangle$$

固有値方程式

$$\hat{f}_i \psi_i(\mathbf{x}_i) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{x}_i) \quad \rightarrow \quad FC_i = \varepsilon_i SC_i$$

$$\mathbf{H}^{[i]} \mathbf{A}^{[i]} = E_0 \mathbf{S}^{[i]} \mathbf{A}^{[i]}$$

時間依存の変分原理

$$i\hbar \mathbf{S}(t) \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{C}_i(t) = \mathbf{F}(t) \mathbf{C}_i(t)$$

$$i\hbar \mathbf{S}_t^{[i]} \frac{\partial \mathbf{A}_t^{[i]}}{\partial t} = \mathbf{H}_t^{[i]} \mathbf{A}_t^{[i]}$$

ゲージ不変性

占有軌道内のユニタリ変換に対して期待値が変化しない

繰込まれた基底内のユニタリ変換に対して期待値が変化しない

まとめ: 特徴と問題点

特徴

時間発展シミュレーション

- 実時間シミュレーションにおいて全エネルギーが保存する

励起状態計算

- 多数の励起状態を同時に、かつ基底状態計算と同程度のコストで計算可能
- TDA/RPAのレベルでも低励起状態であれば高い精度で計算可能

解析的微分

- 2次微分のためのCoupled-perturbed MPS方程式の解法

問題点

- Fock空間基底の一般的な構築手法が不明(3次以上の空間の従属性を排除できない)
- 基底状態を構成する繰込み基底が張っていない空間の寄与は取り込めない

(例) 基底状態と励起状態の対称性が異なる場合など