

有限温度密度行列繰り込み群の方法^{*)}

筑波大学物理工学系

柴田 尚和

(1998年5月11日受理)

1 はじめに

密度行列繰り込み群 (DMRG) の方法は低次元多体系の性質を探る柔軟かつ一般性のある方法である。この方法は1992年にS.Whiteにより発表され[1, 2]、これまで困難であった量子一次元系の基底状態や低エネルギー励起の精密な数値的研究を可能にした。量子スピン系にみられるスピニングギャップの正確な大きさ[3]、 N 段 t - J 梯子模型の詳細な電子状態[4]、そして近藤格子模型の大きなフェルミ面[5]、さらにはフラストレーションのある量子スピン系の長距離相関関数[6]などはこの方法によってはじめて明らかになったといえる。このような量子一次元系の基底状態の研究が精力的に進む中で、古典二次元系[7, 8]やランダム量子スピン系[9]、有限温度量子一次元系[10, 11, 12, 13]などへのDMRGの応用、拡張も次々となされ、現在では低次元多体系を調べる標準的方法としてDMRGの利用が急速に広まっている。

DMRGの方法は、系の一部分を少しずつ拡張し、次第に大きくしていく繰り込み群的側面と、拡張していく部分に残す基底数を加減することで波動関数の精度をコントロールする変分法的側面を持つ。したがって、この二つの側面をともに生かすことがこの方法を用いる上で大切である。この解説は、そのための技術的秘訣について量子一次元系の有限温度の計算法を具体的対象として述べたものである。

ここで取り上げる有限温度での計算法は、DMRGと量子転送行列法を組み合わせたもので、1996年にその基本的アイデアが発表され[11]、その翌年1997年に量子スピン鎖の帯磁率の計算をもとに量子臨界点付近の対数補正が現れる低温まで信頼できる数値計算法として確立した[12, 13]。しかしながら、この方法には量子転送行列の非エルミート性に伴う数値的処理の難しさがあり、このような精度を引き出すためにはDMRGを有効に機能させる工夫が必要であった。ここで紹介する具体的計算法は、試行錯誤の結果として得られたものであるが、そこでの工夫を知っていただくことで、DMRGの能力を十分に引き出す鍵を掴んでいただきたい。

2 有限温度 DMRG の方法

DMRGの有限温度への拡張そのものは、DMRGの開発当初に絶対零度におけるアルゴリズムを自然に拡張する方法でS.White自身によりすでになされていた[2]。その方法は、有限温度での系の状態を表現するために重要な基底だけを残しながら実空間方向に繰り込みを行うもので、比較的少ない繰り込み回数で結果を得ることのできる有限系に対しては有効な方

*) 本稿は、編集部の方から特にお願ひして執筆していただいた記事である。

法であった。しかし熱力学極限を直接得ることができないため、系の臨界的性質を調べるにはあまり適していなかった。

これに対して、これから説明する量子転送行列法と DMRG を組み合わせた方法は、量子転送行列を虚時間方向に繰り込むものであり、転送行列の最大固有値から熱力学極限を直接得ることができる。そのため低温の臨界的性質をみることも可能である。この方法は量子モンテカルロ法と比較しても統計誤差や負符号問題がないところが長所であり、実際にこの方法で計算された一次元電子系（近藤格子模型）の絶縁相の比熱、帯磁率はこれまでの量子モンテカルロ法で得られていたものより精度がよい [14]。一方でこの方法の欠点を挙げれば、取り扱える系が周期一次元系に限られること、転送行列の非エルミート性に伴う数値的処理の難しさがあることである。

3 量子転送行列法

系の臨界的性質を調べるためには熱力学極限での物理量の振る舞いを知る必要がある。この熱力学極限での物理量を直接得る簡便な方法が転送行列法である [15, 16]。まずこの方法について簡単にまとめておく。

転送行列法を用いるためには、量子モンテカルロ法で良く知られた分配関数の鈴木 Trotter 分解を初めに行う必要がある。煩雑さを避けるために相互作用は隣り合う座標の間にしか働かないとすると、系のハミルトニアン H を $H_{\text{odd}} = \sum_{n=1}^{L/2} h_{2n-1,2n}$ と $H_{\text{even}} = \sum_{n=1}^{L/2} h_{2n,2n+1}$ に分解することで $[h_{2n-1,2n}, h_{2n'-1,2n'}] = [h_{2n,2n+1}, h_{2n',2n'+1}] = 0$ が成り立つようにすることができる。ここで、 $h_{i,i+1}$ はハミルトニアン H に含まれる座標 i と $i+1$ に関する部分で、 i は 1 から系の長さである N までをとる。ハミルトニアンをこのように分割すると、分配関数 Z は次のように表される。

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H} \quad (1)$$

$$= \lim_{M \rightarrow \infty} \text{Tr} (e^{-\beta H_{\text{odd}}/M} e^{-\beta H_{\text{even}}/M})^M \quad (2)$$

$$= \lim_{M \rightarrow \infty} \text{Tr} \left[\prod_{n=1}^{N/2} (e^{-\beta h_{2n-1,2n}/M}) \prod_{n=1}^{N/2} (e^{-\beta h_{2n,2n+1}/M}) \right]^M \quad (3)$$

ここに現れる行列 $e^{-\beta h_{i,i+1}/M}$ は、 $\langle \sigma_i \sigma_{i+1} | e^{-\beta h_{i,i+1}/M} | \sigma_i \sigma_{i+1} \rangle$ のように座標 i における自由度 σ_i をもちいて行列表現することができる。これを図 1 のように書くと、(3) 式は図 2 の様になる。ここで、図 3 のような座標 $2n-1, 2n, 2n+1$ に関する行列

$$\mathcal{T}_n = \lim_{M \rightarrow \infty} [e^{-\beta h_{2n-1,2n}/M} e^{-\beta h_{2n,2n+1}/M}]^M. \quad (4)$$

を考えるのであるが、これがここで用いる転送行列である。この行列は系が並進対称であれば $\mathcal{T} = \mathcal{T}_n$ とすることができ、この $\mathcal{T}$ を使うことで分配関数を次のように表現することがで

きる。

$$Z = \text{Tr } \mathcal{T}^{N/2}. \quad (5)$$

このように書いた後で $\mathcal{T}$ の基底を $\mathcal{T}$ の固有ベクトルで取り直すと、分配関数は結局その固有値 λ_i によって

$$Z = \sum_i \lambda_i^{N/2}. \quad (6)$$

と与えられる。したがって N が十分大きい場合を考えると分配関数は $\mathcal{T}$ の最大固有値 λ_{max} によって $Z = \lambda_{max}^{N/2}$ と決まる。

このようにして分配関数を求めてしまえば、比熱や帯磁率などの熱力学量は、分配関数から得られる自由エネルギー

$$F = -\ln Z / (N\beta) \quad (7)$$

$$= -\lambda_{max} / (2\beta) \quad (8)$$

を温度や磁場について微分することで得ることができる。このように、量子転送行列法では、分配関数の計算を行列対角化の問題に置き換えることができ、その最大固有値から熱力学極限の物理量を得ることができるのである。

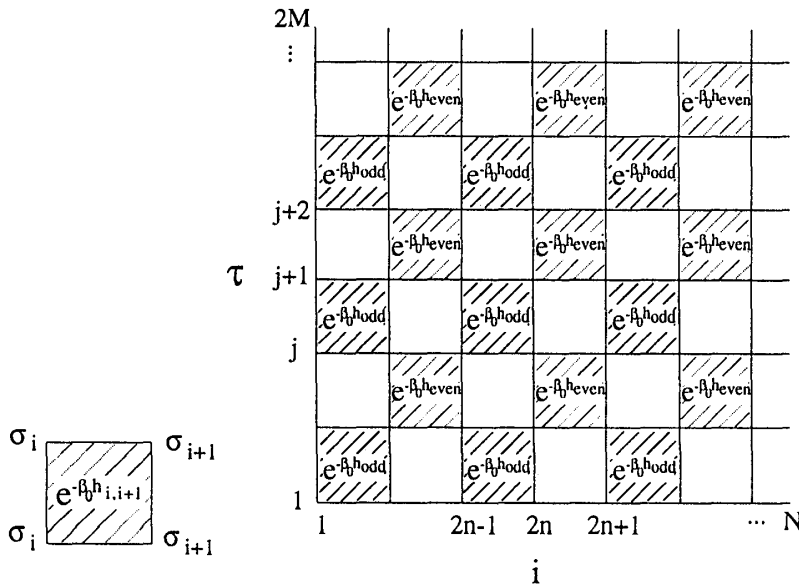


図1. $e^{-\beta_0 h_{i,i+1}}$ の行列表現

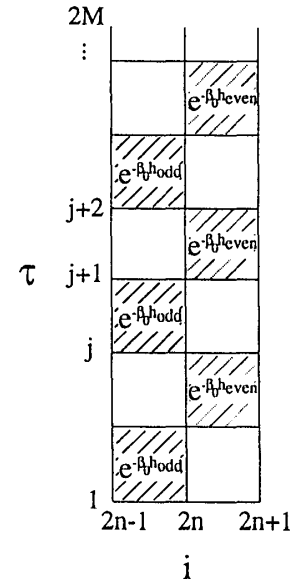


図2. 分配関数

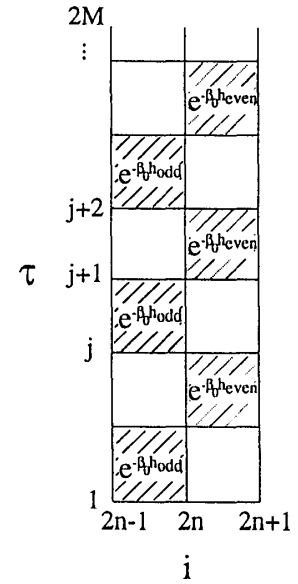


図3. 転送行列

4 転送行列を用いた有限温度 DMRG

転送行列法を用いる場合、如何にして転送行列の最大固有値を得るか、ということが問題になる。というのは、転送行列の虚時間方向の長さを与える Trotter 数 M を増やしていくと、転送行列の次元が指数関数的に増加し、その数値的対角化がすぐに困難になってしまうからである。ここでは DMRG を応用することでこの困難が解決されることを示す。

DMRG の方法は量子一次元系の基底状態を精度よく求める方法として知られているが、これは与えられたハミルトニアン の最大固有値と対応する固有ベクトルを精度よく求める方法ともいえる。このハミルトニアン の次元は系の大きさが大きくなると指数関数的に増大するため、転送行列の対角化と同様の問題が生じている。しかしながら、この方法では最大固有値とその固有ベクトルをできるだけ少ない基底で正確に再現できるように部分系の基底をうまく変換してこの問題を解決している。したがって、このときのハミルトニアン を転送行列に置き換え、類似の方法で Trotter 数の大きな転送行列の最大固有値とその固有ベクトルを求めることができれば DMRG を使った転送行列法の定式化が可能となる。

少し具体的に考えてみよう。絶対零度 DMRG では4つのユニット (例えばスピン) を含んだハミルトニアン をまず考え、それを分割して両端の部分をハミルトニアン のブロックとし、そのブロック少しずつ実空間方向に拡張していく。同様のことを転送行列に対して行なうには、まず Trotter 数 M が2の小さな転送行列をつくり、それを分割することで転送行列のブロック $\mathcal{T}_{(M=2)}^A$, $\mathcal{T}_{(M=2)}^B$ を定義し、それを虚時間 (β) 方向に拡張すればよい。すなわち、Trotter 数が M の転送行列 $\mathcal{T}_{(M)}$ を

$$\mathcal{T}_{(M)} = \begin{cases} \mathcal{T}_{(M)}^A e^{-\beta_0 h_{\text{even}}} e^{-\beta_0 h_{\text{odd}}} \mathcal{T}_{(M)}^B & M : \text{even} \\ \mathcal{T}_{(M)}^{A'} e^{-\beta_0 h_{\text{odd}}} e^{-\beta_0 h_{\text{even}}} \mathcal{T}_{(M)}^{B'} & M : \text{odd} \end{cases} \quad (9)$$

のように定義し、

$$\mathcal{T}_{(M=2)}^A = e^{-\beta_0 h_{\text{odd}}} \quad (10)$$

$$\mathcal{T}_{(M=2)}^B = e^{-\beta_0 h_{\text{even}}} \quad (11)$$

を出発点として、

$$\mathcal{T}_{(M)}^A e^{-\beta_0 h_{\text{even}}} \rightarrow \mathcal{T}_{(M+1)}^{A'} \quad (12)$$

$$e^{-\beta_0 h_{\text{odd}}} \mathcal{T}_{(M)}^B \rightarrow \mathcal{T}_{(M+1)}^{B'}, \quad (13)$$

$$\mathcal{T}_{(M)}^{A'} e^{-\beta_0 h_{\text{odd}}} \rightarrow \mathcal{T}_{(M+1)}^A \quad (14)$$

$$e^{-\beta_0 h_{\text{even}}} \mathcal{T}_{(M)}^{B'} \rightarrow \mathcal{T}_{(M+1)}^B. \quad (15)$$

のように拡張する。これを図で示すと図4のようになる。ただし $h_{\text{odd}} = h_{2n-1, 2n}$, $h_{\text{even}} = h_{2n, 2n+1}$ とした。

この虚時間方向への拡張の際に基底の数の制限をして転送行列の次元が増加しないようにしなければならない。今求めているものは最大固有値であるから、まず、絶対零度 DMRG と同

様に転送行列の最大固有値を与える左右の固有ベクトル V^L, V^R に注目する。ここで左 (右) の固有ベクトルは転送行列に左 (右) からベクトルを掛けたときの固有ベクトルで、それらは転送行列が一般に非エルミートであることから互いに異なっている。この V^L, V^R のをできるだけ正しいものに保ちながら、拡張しようとしている部分の基底の数を減らすことができる。基底の減少による最大固有値のずれを小さく抑えることができる。そのために固有ベクトルのノルム $\sum_{ij} V_{ij}^L V_{ij}^R$ を少ない基底の数で、できるだけ保つような新しい基底への変換 $i \rightarrow k$ を探すことにする。そこで、いま拡張をしようとする部分の一般化された密度行列

$$\rho_{ii'}^A = \sum_j V_{ij}^L V_{i'j}^R \quad (16)$$

を考えるのである。ここで i は拡張の対象となっている部分の基底、 j はそれ以外の部分の基底を表す。この密度行列のトレースがノルムであるから、 V^L, V^R のノルムに大きく寄与する基底はこの密度行列を対角化したときに得られる固有値の大きなものに対応する固有ベクトルによって与えられる。したがって、固有値の大きなものから順にその固有ベクトルを選び出せば、与えられた基底の数で最も良く転送行列の最大固有値を与える新たな転送行列のブロックの基底を得ることができる。

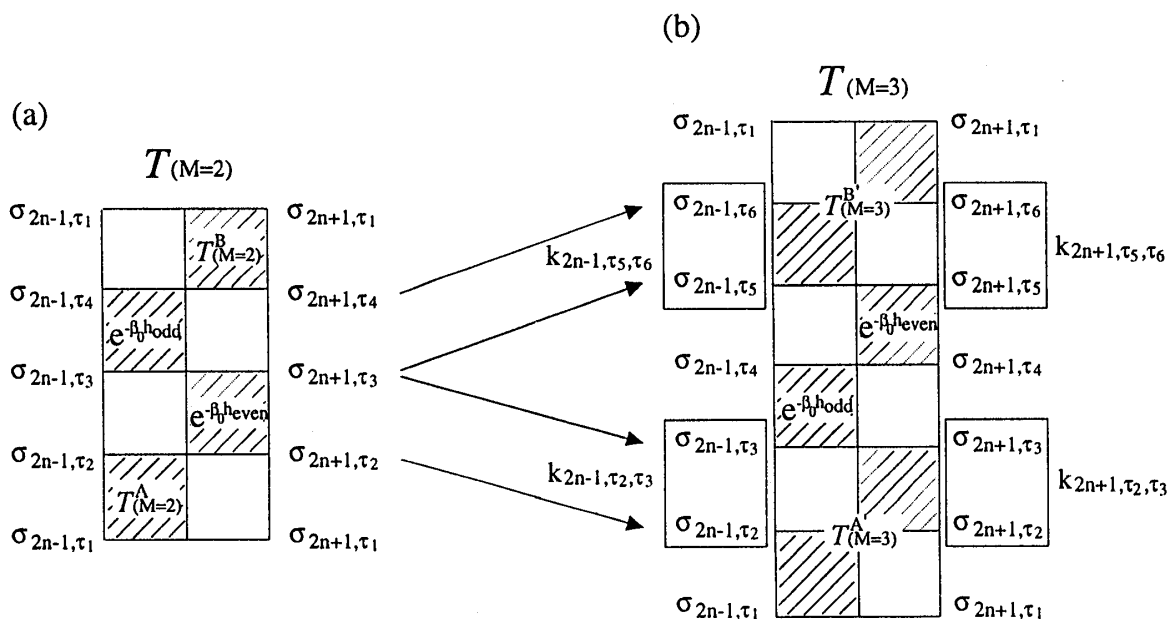


図4. (a) $M=2$ の転送行列、(b) $M=3$ の転送行列

次に、こうして得られた新しい基底を用いて転送行列のブロックを表現する必要がある。一般に非エルミートな密度行列を対角化すると、異なった左右の固有ベクトル $v_i^{L(k)}$, $v_i^{R(k)}$ が得られる。この固有ベクトルは変換前の基底 i と変換後の基底 k を関係付ける変換行列であるから、転送行列は右側と左側の基底の添字を i, i' とすることで

$$T_{kk'}^A = \sum_{ii'} v_i^{R(k)} T_{ii'}^A v_{i'}^{L(k')} \quad (17)$$

のように左右で異なる変換を受けることになる。ただし、この左右の固有ベクトル $v_i^{L(k)}$, $v_i^{R(k)}$ は直交関係

$$\sum_i v_i^{L(k)} v_i^{R(k')} = \delta_{kk'}. \quad (18)$$

を満たしているので、転送行列の右側と左側の基底の直交関係は上の変換において正しく保たれている。

このようにして、新しい基底 k の数を制限した上で、転送行列の固有ベクトルの精度をできるだけ保つ基底変換を行なうことができる。基底の数を制限することで生じる誤差は大まかに捨てた基底のもつ密度行列の固有値の和で与えられると予想される。すなわち、 γ^k を密度行列の k 番目の大きさの固有値として m 個の基底を残せば、全ての固有値の和を 1 として $1 - \sum_{k=1}^m \gamma^k$ が誤差の目安となる。したがって、この誤差が比較的小さな m において十分に小さくなっていけば、この計算方法が有効に働くことになる。図 5 に実際の密度行列の固有値分布を示すが、確かに固有値の大きなものが比較的少数の基底に限られていて、小さな m においても誤差が小さく抑えられることがわかる。このような状況であれば、上述の繰り返しを繰り返すことで任意の Trotter 数の転送行列を十分な精度で得ることができる。

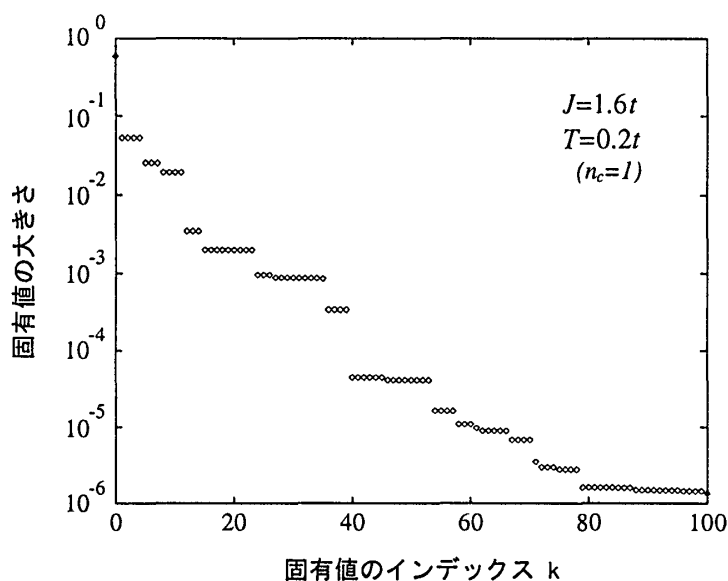


図5. 一次元近藤格子模型の密度行列の固有値の分布

5 有限温度 DMRG の実際と計算上の工夫

この章では、実際に転送行列を作るところから熱力学量を得るところまでを具体的に説明し、有限温度 DMRG の計算を行う際の問題点や注意点にふれていく。

5.1 転送行列の表現

まず転送行列を表現するところから考えていこう。転送行列は分配関数を鈴木 Trotter 分解したときに座標 $2n-1, 2n, 2n+1$ に関する部分を切り出すことで得られる。前に行ったようなチェッカーボード型の分解を考えると、転送行列は局所的なハミルトニアンを指数部にもつ行列 $e^{-\beta_0 h_{2n-1, 2n}}, e^{-\beta_0 h_{2n, 2n+1}}$ の積

$$\mathcal{T} = \lim_{M \rightarrow \infty} [e^{-\beta h_{2n-1, 2n}/M} e^{-\beta h_{i, i+1}/M}]^M. \quad (19)$$

として与えられる。

さて、実空間座標 i と虚時間座標 τ_j を使って転送行列を具体的に表現しよう。まず、 $\Delta\tau = 2(\tau_{j+1} - \tau_j) = \beta/M = \beta_0$ として

$$r(i, i+1; \tau_j, \tau_{j+1}) = \langle \sigma_{i, \tau_{j+1}}, \sigma_{i+1, \tau_{j+1}} | e^{-\Delta\tau h_{i, i+1}} | \sigma_{i, \tau_j}, \sigma_{i+1, \tau_j} \rangle \quad (20)$$

とすると、 Trotter 数が M の転送行列 $\mathcal{T}_{(M)}$ は

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{(M)} = & r(2n-1, 2n; \tau_1, \tau_2) r(2n, 2n+1; \tau_2, \tau_3) r(2n-1, 2n; \tau_3, \tau_4) \cdots \\ & \cdots r(2n-1, 2n; \tau_{2M-1}, \tau_{2M}) r(2n, 2n+1; \tau_{2M}, \tau_1) \end{aligned} \quad (21)$$

と書ける。したがって、 $r(i, i+1; \tau_j, \tau_{j+1})$ の行列表現を求めれば、その積から転送行列を得ることができる。鈴木 Trotter 分解の帰結として、この行列要素を決めるハミルトニアン $h_{i, i+1}$ は、同じ虚時間座標 τ_j, τ_{j+1} をもつ他のすべての行列 $r(i', i'+1; \tau_j, \tau_{j+1})$ に含まれるハミルトニアン $h_{i', i'+1}$ と交換する。したがって、ハミルトニアンを指数部にもつこの行列 $r(i, i+1; \tau_j, \tau_{j+1})$ は、 $\sigma_{i, \tau_j}, \sigma_{i, \tau_{j+1}}, \sigma_{i+1, \tau_j}, \sigma_{i+1, \tau_{j+1}}$ によって張られる局所的な部分空間での固有値、固有ベクトルによって行列表現できる。

具体的に $S = 1/2$ ハイゼンベルグモデルの場合を考えてみよう。この場合、 $r(i, i+1; \tau_j, \tau_{j+1})$ に含まれるハミルトニアンは $h_{i, i+1} = JS_i \cdot S_{i+1}$ である。固有値 E_m は、 $-3J/4, J/4, J/4, J/4$ 、また、対応する固有ベクトルは、 $|\sigma_{i, \tau_j}, \sigma_{i+1, \tau_j}\rangle$ を基底にとって

$$|V_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle) \quad (22)$$

$$|V_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle) \quad (23)$$

$$|V_3\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle \quad (24)$$

$$|V_4\rangle = |\downarrow, \downarrow\rangle \quad (25)$$

となる。まず、 $\langle \uparrow_{i,\tau_j}, \downarrow_{i+1,\tau_j} |$ に関する行列要素を調べよう。

$$\langle \uparrow_{i,\tau_j}, \downarrow_{i+1,\tau_j} | e^{-\Delta\tau h_{i,i+1}} | \uparrow_{i,\tau_{j+1}}, \downarrow_{i+1,\tau_{j+1}} \rangle = \quad (26)$$

$$\sum_m \langle \uparrow_{i,\tau_j}, \downarrow_{i+1,\tau_j} | V_m \rangle \langle V_m | e^{-\Delta\tau E_m} | V_m \rangle \langle V_m | \uparrow_{i,\tau_{j+1}}, \downarrow_{i+1,\tau_{j+1}} \rangle \quad (27)$$

であるから、

$$\langle \uparrow_{i,\tau_j}, \downarrow_{i+1,\tau_j} | e^{-\Delta\tau h_{i,i+1}} | \uparrow_{i,\tau_{j+1}}, \downarrow_{i+1,\tau_{j+1}} \rangle = \frac{1}{2}(e^{\Delta\tau J/4} + e^{-\Delta\tau J/4}) \quad (28)$$

となる。同様に、

$$\langle \uparrow_{i,\tau_j}, \downarrow_{i+1,\tau_j} | e^{-\Delta\tau h_{i,i+1}} | \downarrow_{i,\tau_{j+1}}, \uparrow_{i+1,\tau_{j+1}} \rangle = -\frac{1}{2}(e^{\Delta\tau J/4} - e^{-\Delta\tau J/4}) \quad (29)$$

$$\langle \uparrow_{i,\tau_j}, \uparrow_{i+1,\tau_j} | e^{-\Delta\tau h_{i,i+1}} | \uparrow_{i,\tau_{j+1}}, \uparrow_{i+1,\tau_{j+1}} \rangle = e^{-\Delta\tau J/4} \quad (30)$$

となるので、基底を $|\uparrow_{i,\tau_j}, \uparrow_{i+1,\tau_j}\rangle, |\uparrow_{i,\tau_j}, \downarrow_{i+1,\tau_j}\rangle, |\downarrow_{i,\tau_j}, \uparrow_{i+1,\tau_j}\rangle, |\downarrow_{i,\tau_j}, \downarrow_{i+1,\tau_j}\rangle$ の順に並べると、 τ_j から τ_{j+1} への行列として

$$e^{\Delta\tau J/4} \begin{pmatrix} e^{-\Delta\tau J/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cosh(-\Delta\tau J/2) & \sinh(-\Delta\tau J/2) & 0 \\ 0 & \sinh(-\Delta\tau J/2) & \cosh(-\Delta\tau J/2) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\Delta\tau J/2} \end{pmatrix} \quad (31)$$

が得られる。この行列は基底を $|\uparrow_{i,\tau_j}, \uparrow_{i,\tau_{j+1}}\rangle, |\uparrow_{i,\tau_j}, \downarrow_{i,\tau_{j+1}}\rangle, |\downarrow_{i,\tau_j}, \uparrow_{i,\tau_{j+1}}\rangle, |\downarrow_{i,\tau_j}, \downarrow_{i,\tau_{j+1}}\rangle$ ととりなおして、 $\langle \uparrow_{i,\tau_j}, \downarrow_{i+1,\tau_j} | e^{-\Delta\tau h_{i,i+1}} | \uparrow_{i,\tau_{j+1}}, \downarrow_{i+1,\tau_{j+1}} \rangle \rightarrow \langle \uparrow_{i,\tau_j}, \uparrow_{i,\tau_{j+1}} | e^{-\Delta\tau h_{i,i+1}} | \downarrow_{i+1,\tau_j}, \downarrow_{i+1,\tau_{j+1}} \rangle$ のようにして i から $i+1$ への行列として表現し直すと

$$e^{\Delta\tau J/4} \begin{pmatrix} e^{-\Delta\tau J/2} & 0 & 0 & \cosh(-\Delta\tau J/2) \\ 0 & 0 & \sinh(-\Delta\tau J/2) & 0 \\ 0 & \sinh(-\Delta\tau J/2) & 0 & 0 \\ \cosh(-\Delta\tau J/2) & 0 & 0 & e^{-\Delta\tau J/2} \end{pmatrix} \quad (32)$$

となる。これがこれから用いる転送行列を構成する最小単位 $r(i, i+1; \tau_j, \tau_{j+1})$ の具体的な姿である。以下ではこの行列をスピン自由度 σ_{i,τ_j} を使って $r(\sigma_{i,\tau_j}, \sigma_{i,\tau_{j+1}}; \sigma_{i+1,\tau_j}, \sigma_{i+1,\tau_{j+1}})$ と表わす。

この行列は繰り込みの出発点で用いる転送行列のブロックでもあり、 $i = 2n - 1$ の場合

$$\mathcal{T}_{(M=2)}^A(\sigma_{2n-1,\tau_j}, \sigma_{2n-1,\tau_{j+1}}; \sigma_{2n,\tau_j}, \sigma_{2n,\tau_{j+1}}),$$

$i = 2n$ の場合

$$\mathcal{T}_{(M=2)}^B(\sigma_{2n,\tau_j}, \sigma_{2n,\tau_{j+1}}; \sigma_{2n+1,\tau_j}, \sigma_{2n+1,\tau_{j+1}})$$

に対応している。したがって、DMRG の最初のステップで用いるトロッター数が 2 の転送行列 $\mathcal{T}_{(M=2)}$ は

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{T}_{(M=2)}(\sigma_{2n-1,\tau_1}, \sigma_{2n-1,\tau_2}, \sigma_{2n-1,\tau_3}, \sigma_{2n-1,\tau_4}; \sigma_{2n+1,\tau_1}, \sigma_{2n+1,\tau_2}, \sigma_{2n+1,\tau_3}, \sigma_{2n+1,\tau_4}) \\
 &= \sum_{\sigma_{2n,\tau_1}} \sum_{\sigma_{2n,\tau_2}} \sum_{\sigma_{2n,\tau_3}} \sum_{\sigma_{2n,\tau_4}} \mathcal{T}_{(M=2)}^A(\sigma_{2n-1,\tau_1}, \sigma_{2n-1,\tau_2}; \sigma_{2n,\tau_1}, \sigma_{2n,\tau_2}) \\
 & \quad r(\sigma_{2n,\tau_2}, \sigma_{2n,\tau_3}; \sigma_{2n+1,\tau_2}, \sigma_{2n+1,\tau_3}) r(\sigma_{2n-1,\tau_3}, \sigma_{2n-1,\tau_4}; \sigma_{2n,\tau_3}, \sigma_{2n,\tau_4}) \\
 & \quad \mathcal{T}_{(M=2)}^B(\sigma_{2n,\tau_4}, \sigma_{2n,\tau_1}; \sigma_{2n+1,\tau_4}, \sigma_{2n+1,\tau_1})
 \end{aligned} \tag{33}$$

となる。

5.2 転送行列の演算に関する問題と対策

さて、上で求めた行列の対角化に関して絶対零度 DMRG との比較をしてみたい。上に示した通り、一番始めに対角化しなければならない転送行列の要素の数は、一サイト当たりの自由度を n として n^8 となる。これは絶対零度 DMRG の最初のステップで対角化しなければならない 4 サイトのハミルトニアン行列の大きさと同じである。ところが、行列要素を転送行列のブロック $\mathcal{T}^A, \mathcal{T}^B, r$ から求めようとすると、中間状態のインデックス $\sigma_{2n,\tau_1}, \sigma_{2n,\tau_2}, \sigma_{2n,\tau_3}, \sigma_{2n,\tau_4}$ に関する和が必要となる。したがって大規模行列の対角化によく用いられるランチョス法のように、行列を繰り返し演算して固有値、固有ベクトルを求める場合、絶対零度 DMRG と比較して n^4 倍も対角化に時間がかかることになる。もし、転送行列全体を計算機のメモリー上に保存することができれば、中間状態に関するインデックスの操作は初めの一回だけですむ。しかし、一番始めに対角化する転送行列の次元が n^4 であるのに対して、繰り込みの際に残す状態の数を m とすると転送行列の次元は最終的に $n^2 m^2$ となるから必要となる配列の大きさが $n^4 m^4$ と非常に大きくなってしまい結果的に m が小さく制限されてしまう。そこで、対角化の際の中間状態に関するインデックスの操作を軽減する方法について次に考えることにする。

まず、転送行列の対角化の前に中間状態 σ_{2n,τ_2} について先に和をとったブロック

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{T}_{(M=2)}^a(\sigma_{2n-1,\tau_1}, \sigma_{2n-1,\tau_2}, \sigma_{2n,\tau_3}; \sigma_{2n,\tau_1}, \sigma_{2n+1,\tau_2}, \sigma_{2n+1,\tau_3}) \\
 &= \sum_{\sigma_{2n,\tau_2}} \mathcal{T}_{(M=2)}^A(\sigma_{2n-1,\tau_1}, \sigma_{2n-1,\tau_2}; \sigma_{2n,\tau_1}, \sigma_{2n,\tau_2}) \\
 & \quad r(\sigma_{2n,\tau_2}, \sigma_{2n,\tau_3}; \sigma_{2n+1,\tau_2}, \sigma_{2n+1,\tau_3})
 \end{aligned} \tag{34}$$

と、同様に σ_{2n,τ_4} について和をとったブロック

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{T}_{(M=2)}^b(\sigma_{2n-1,\tau_3}, \sigma_{2n-1,\tau_4}, \sigma_{2n,\tau_1}; \sigma_{2n,\tau_3}, \sigma_{2n+1,\tau_4}, \sigma_{2n+1,\tau_1}) \\
 &= \sum_{\sigma_{2n,\tau_4}} r(\sigma_{2n-1,\tau_3}, \sigma_{2n-1,\tau_4}; \sigma_{2n,\tau_3}, \sigma_{2n,\tau_4}) \\
 & \quad \mathcal{T}_{(M=2)}^B(\sigma_{2n,\tau_4}, \sigma_{2n,\tau_1}; \sigma_{2n+1,\tau_4}, \sigma_{2n+1,\tau_1})
 \end{aligned} \tag{35}$$

を対角化の際に利用することが考えられる。この二つのブロックを使うと、転送行列は

$$\begin{aligned} & \mathcal{T}_{(M=2)}(\sigma_{2n-1,\tau_1}, \sigma_{2n-1,\tau_2}, \sigma_{2n-1,\tau_3}, \sigma_{2n-1,\tau_4}; \sigma_{2n+1,\tau_1}, \sigma_{2n+1,\tau_2}, \sigma_{2n+1,\tau_3}, \sigma_{2n+1,\tau_4}) \\ &= \sum_{\sigma_{2n,\tau_1}} \sum_{\sigma_{2n,\tau_3}} \mathcal{T}_{(M=2)}^a(\sigma_{2n-1,\tau_1}, \sigma_{2n-1,\tau_2}, \sigma_{2n,\tau_3}; \sigma_{2n,\tau_1}, \sigma_{2n+1,\tau_2}, \sigma_{2n+1,\tau_3}) \\ & \quad \mathcal{T}_{(M=2)}^b(\sigma_{2n-1,\tau_3}, \sigma_{2n-1,\tau_4}, \sigma_{2n,\tau_1}; \sigma_{2n,\tau_3}, \sigma_{2n+1,\tau_4}, \sigma_{2n+1,\tau_1}) \end{aligned} \quad (36)$$

となるので、転送行列の演算の際には残りの $\sigma_{2n,\tau_3}, \sigma_{2n,\tau_1}$ の分だけの和で済み、 n^2 倍だけ対角化が高速化される。また、 $\mathcal{T}_{(M=2)}^a$ 、 $\mathcal{T}_{(M=2)}^b$ を保存するための配列の大きさは n^6 であり、転送行列そのものの大きさ n^8 より十分小さくて済む。

しかし、このような工夫の後でも、なお残った中間状態のインデックス $\sigma_{2n,\tau_3}, \sigma_{2n,\tau_1}$ が残っている。したがって、絶対零度 DMRG と比較して n^2 倍だけ余分に計算時間がかかることになる。さらなる工夫は、転送行列の持つ保存則を利用することである。

いま、転送行列を構成する最小単位になっている行列 $r(\sigma_{i,\tau_j}, \sigma_{i,\tau_{j+1}}; \sigma_{i+1,\tau_j}, \sigma_{i+1,\tau_{j+1}})$ を考えよう。良く知られているように τ_j 方向の保存量はハミルトニアン $h_{i,i+1}$ と可換な量で、ハイゼンベルグ模型を例にとると $S_i^z + S_{i+1}^z$ がその一つである。そのため (31) に示す通り、基底 $|\uparrow_{i,\tau_j}, \downarrow_{i+1,\tau_j}\rangle$ に $e^{-\Delta\tau h_{i,i+1}}$ を掛けても、 $S_i^z + S_{i+1}^z$ が異なる基底 $|\uparrow_{i,\tau_{j+1}}, \uparrow_{i+1,\tau_{j+1}}\rangle$ や $|\downarrow_{i,\tau_{j+1}}, \downarrow_{i+1,\tau_{j+1}}\rangle$ への行列要素は生じない。すなわち

$$S_{i,\tau_j}^z + S_{i+1,\tau_j}^z = S_{i,\tau_{j+1}}^z + S_{i+1,\tau_{j+1}}^z \quad (37)$$

であることが行列要素を持つための条件になっている。ここで、この条件式を

$$S_{i,\tau_j}^z - S_{i,\tau_{j+1}}^z = -S_{i+1,\tau_j}^z + S_{i+1,\tau_{j+1}}^z \quad (38)$$

のように書き直す。すると今度は i 方向に関する保存式が得られる。これは、 $|\sigma_{i,\tau_j}, \sigma_{i,\tau_{j+1}}\rangle$ という基底を考えたとき、空間座標 i については $S_{i,\tau_j}^z - S_{i,\tau_{j+1}}^z$ で決まる量子数 Q を次のように与え、

$$\begin{aligned} |\uparrow_{i,\tau_j}, \uparrow_{i,\tau_{j+1}}\rangle & \cdots Q = 0 \\ |\uparrow_{i,\tau_j}, \downarrow_{i,\tau_{j+1}}\rangle & \cdots Q = 1 \\ |\downarrow_{i,\tau_j}, \uparrow_{i,\tau_{j+1}}\rangle & \cdots Q = -1 \\ |\downarrow_{i,\tau_j}, \downarrow_{i,\tau_{j+1}}\rangle & \cdots Q = 0 \end{aligned}$$

空間座標 $i+1$ については $-S_{i+1,\tau_j}^z + S_{i+1,\tau_{j+1}}^z$ で決まる量子数 Q を

$$\begin{aligned} |\uparrow_{i+1,\tau_j}, \uparrow_{i+1,\tau_{j+1}}\rangle & \cdots Q = 0 \\ |\uparrow_{i+1,\tau_j}, \downarrow_{i+1,\tau_{j+1}}\rangle & \cdots Q = -1 \\ |\downarrow_{i+1,\tau_j}, \uparrow_{i+1,\tau_{j+1}}\rangle & \cdots Q = 1 \\ |\downarrow_{i+1,\tau_j}, \downarrow_{i+1,\tau_{j+1}}\rangle & \cdots Q = 0 \end{aligned}$$

のように与えると、 $r(\sigma_{i,\tau_j}, \sigma_{i,\tau_{j+1}}; \sigma_{i+1,\tau_j}, \sigma_{i+1,\tau_{j+1}})$ が行列要素をもつのは Q の等しい基底の間だけに限られることを示している。このことは実際に (32) で確認できる。したがって、

基底をこの量子数 Q によって分類しておけば、転送行列のブロックを量子数 Q で特徴づけられた小さなサブブロックに分解することができ、保存則によって常にゼロとなっている行列要素の参照を省くことができる。この保存則は、空間座標 i から $i+1$ への転送行列が $r(\sigma_{i,\tau_j}, \sigma_{i,\tau_{j+1}}; \sigma_{i+1,\tau_j}, \sigma_{i+1,\tau_{j+1}})$ の独立な和で与えられていることから、転送行列そのものに対しても成り立つ。すなわち、転送行列にはハミルトニアンのもつ通常の保存量

$$S_{total}^z = \sum_i S_{i,\tau_j}^z \quad (39)$$

と関係した

$$Q = \sum_j (-1)^{i+j} S_{i,\tau_j}^z \quad (40)$$

という保存量が存在する。この保存量を生かすことで、転送行列の中間状態の自由度を制限し、行列要素の計算を効率化し、さらには転送行列やそのブロックを保存するために必要となる計算機のメモリー領域を小さくすることができる。

この保存量 Q の存在は、転送行列を対角化する際に特に重要になる。いまの場合、最大固有値とその固有ベクトルのみが必要であるから、非エルミートランチョス法のような巾乗法が使える。このような巾乗法を使うときには、最大固有値を与える固有ベクトルのウェイトが用意している全ての基底で有限に存在している必要がある。もしそうでないときには初期ベクトルに依存した解が得られ、たちまち引き続く計算が困難になる。転送行列にハミルトニアンの対称性を反映した保存則があるということは、転送行列が Q で特徴づけられるいくつかのサブブロックに分割されていることを意味している。したがって、まずサブブロック分解し、その後、最大固有値を与えるブロックに対して対角化を行う必要がある。このような分解は、たとえ巾乗法以外の方法を用いる場合でも対角化にかかる計算時間を短くし固有ベクトルの精度を高めるメリットがある。

このようにして転送行列の最大固有値 λ を得れば、後はその値から自由エネルギー F を求めることができる。但し、温度 T は $\beta_0 = \Delta\tau$ と Trotter 数 M によって

$$T = 1/(\beta_0 M) \quad (41)$$

のように関係付いているので、得られる自由エネルギー

$$F = -T \ln \lambda / 2 \quad (42)$$

は DMRG の繰り込みの回数、すなわち Trotter 数 M の増加によってより低温のものへと移り変わる。

5.3 密度行列の計算と転送行列の繰り込み

さて、次に具体的な密度行列の計算の方法と転送行列の繰り込み方を示す。密度行列は、最大固有値 λ を与える左右の固有ベクトル V_L, V_R を、少ない基底の数で、より良く再現する部

分系の基底を選び出すために必要となるものである。選び出された基底は、転送行列のブロック $\mathcal{T}_{(M)}^A$ を表現するために使い、そうすることで、転送行列の最大固有値の精度を落とさずに、 Trotter 数の増加に伴う転送行列の次元の増加を抑えるのである。転送行列の Trotter 数を増やすためには転送行列のブロック $\mathcal{T}_{(M)}^A$ を虚時間方向に拡張しなければならない。まず初めに次のような拡張

$$\mathcal{T}_{(M=2)}^A e^{-\beta_0 h_{2n, 2n+1}} \rightarrow \mathcal{T}_{(M=3)}^{A'} \quad (43)$$

を行うが、この場合はまだ基底の数が少ないので、密度行列を使って基底の数を制限することはない。実際に基底の数の制限を行うのは

$$\mathcal{T}_{(M=3)}^{A'} e^{-\beta_0 h_{2n-1, 2n}} \rightarrow \mathcal{T}_{(M=4)}^A \quad (44)$$

のときからである。このとき繰り込みの対象となる部分系の基底は、次に定義する $\mathcal{T}_{(M=3)}^{A'}$

$$\begin{aligned} & \mathcal{T}_{(M=3)}^{A'}(\sigma_{2n-1, \tau_1}, \sigma_{2n-1, \tau_2}, \sigma_{2n, \tau_3}; \sigma_{2n, \tau_1}, \sigma_{2n+1, \tau_2}, \sigma_{2n+1, \tau_3}) \\ &= \sum_{\sigma_{2n, \tau_2}} \mathcal{T}_{(M=2)}^A(\sigma_{2n-1, \tau_1}, \sigma_{2n-1, \tau_2}; \sigma_{2n, \tau_1}, \sigma_{2n, \tau_2}) \\ & \quad r(\sigma_{2n, \tau_2}, \sigma_{2n, \tau_3}; \sigma_{2n+1, \tau_2}, \sigma_{2n+1, \tau_3}) \end{aligned} \quad (45)$$

を用いて表現される $\mathcal{T}_{(M=4)}^A$

$$\begin{aligned} & \mathcal{T}_{(M=4)}^A(\sigma_{2n-1, \tau_1}, \sigma_{2n-1, \tau_2}, \sigma_{2n-1, \tau_3}, \sigma_{2n-1, \tau_4}; \sigma_{2n, \tau_1}, \sigma_{2n+1, \tau_2}, \sigma_{2n+1, \tau_3}, \sigma_{2n+1, \tau_4}) \\ &= \sum_{\sigma_{2n, \tau_3}} \mathcal{T}_{(M=3)}^{A'}(\sigma_{2n-1, \tau_1}, \sigma_{2n-1, \tau_2}, \sigma_{2n, \tau_3}; \sigma_{2n, \tau_1}, \sigma_{2n+1, \tau_2}, \sigma_{2n+1, \tau_3}) \\ & \quad r(\sigma_{2n-1, \tau_3}, \sigma_{2n-1, \tau_4}; \sigma_{2n, \tau_3}, \sigma_{2n, \tau_4}) \end{aligned} \quad (46)$$

に現れる $\sigma_{2n-1, \tau_2}, \sigma_{2n-1, \tau_3}$ と $\sigma_{2n+1, \tau_2}, \sigma_{2n+1, \tau_3}$ の自由度に関する部分基底 $\langle \sigma_{2n-1, \tau_2}, \sigma_{2n-1, \tau_3} |$ と $| \sigma_{2n+1, \tau_2}, \sigma_{2n+1, \tau_3} \rangle$ である。この基底に関する密度行列 ρ は、先に求めた転送行列 $\mathcal{T}_{(M=2)}$ の最大固有値を与える左右の固有ベクトル

$$V_L(\sigma_{2n-1, \tau_1}, \sigma_{2n-1, \tau_2}, \sigma_{2n-1, \tau_3}, \sigma_{2n-1, \tau_4}), \quad (47)$$

$$V_R(\sigma_{2n+1, \tau_1}, \sigma_{2n+1, \tau_2}, \sigma_{2n+1, \tau_3}, \sigma_{2n+1, \tau_4}) \quad (48)$$

を使い、今注目している自由度 $\sigma_{2n-1, \tau_2}, \sigma_{2n-1, \tau_3}$ と $\sigma_{2n+1, \tau_2}, \sigma_{2n+1, \tau_3}$ 以外の自由度について次のようにトレースをとることで得ることができる。

$$\begin{aligned} & \rho(\sigma_{2n-1, \tau_2}, \sigma_{2n-1, \tau_3}; \sigma_{2n+1, \tau_2}, \sigma_{2n+1, \tau_3}) \\ &= \sum_{\sigma_{\tau_1}} \sum_{\sigma_{\tau_4}} V_L(\sigma_{\tau_1}, \sigma_{2n-1, \tau_2}, \sigma_{2n-1, \tau_3}, \sigma_{\tau_4}) V_R(\sigma_{\tau_1}, \sigma_{2n+1, \tau_2}, \sigma_{2n+1, \tau_3}, \sigma_{\tau_4}) \end{aligned} \quad (49)$$

転送行列の基底の数を減らすために用いる新しい基底は、この密度行列を対角化し、次の式

$$v_k^L(\sigma_{\tau_2}, \sigma_{\tau_3}) \rho(\sigma_{\tau_2}, \sigma_{\tau_3}; \sigma'_{\tau_2}, \sigma'_{\tau_3}) = \gamma_k v_k^L(\sigma'_{\tau_2}, \sigma'_{\tau_3}) \quad (50)$$

$$v_k^R(\sigma_{\tau_2}, \sigma_{\tau_3}) \rho(\sigma'_{\tau_2}, \sigma'_{\tau_3}; \sigma_{\tau_2}, \sigma_{\tau_3}) = \gamma_k v_k^R(\sigma'_{\tau_2}, \sigma'_{\tau_3}) \quad (51)$$

を満たす固有値 γ_k の大きなものに対応する左右の固有ベクトル $v_k^L(\sigma_{\tau_2}, \sigma_{\tau_3})$ 、 $v_k^R(\sigma_{\tau_2}, \sigma_{\tau_3})$ から次のように得ることができる。

$$\langle k_{2n-1} | = \sum_{\sigma_{2n-1}, \tau_2} \sum_{\sigma_{2n-1}, \tau_3} v_k^L(\sigma_{2n-1}, \tau_2, \sigma_{2n-1}, \tau_3) \langle \sigma_{2n-1}, \tau_2, \sigma_{2n-1}, \tau_3 | \quad (52)$$

$$|k_{2n+1}\rangle = \sum_{\sigma_{2n+1}, \tau_2} \sum_{\sigma_{2n+1}, \tau_3} v_k^R(\sigma_{2n+1}, \tau_2, \sigma_{2n+1}, \tau_3) | \sigma_{2n+1}, \tau_2, \sigma_{2n+1}, \tau_3 \rangle \quad (53)$$

また、こうして得られた左右の基底は、非エルミート行列の左右の固有ベクトルの間に成り立つ次の関係式

$$\sum_{\sigma_{\tau_2}} \sum_{\sigma_{\tau_3}} v_k^L(\sigma_{\tau_2}, \sigma_{\tau_3}) v_{k'}^R(\sigma_{\tau_2}, \sigma_{\tau_3}) = \delta_{k, k'} \quad (54)$$

を反映した、双直交関係

$$\langle k_{2n-1} | k'_{2n+1} \rangle = \delta_{k, k'} \quad (55)$$

を満たしている。

繰り込まれた転送行列のブロック $\mathcal{T}_{(M=4)}^A$ は、元々の自由度 $\sigma_{2n-1}, \tau_2, \sigma_{2n-1}, \tau_3$ と $\sigma_{2n+1}, \tau_2, \sigma_{2n+1}, \tau_3$ を、上で得られた基底 k_{2n-1} と k_{2n+1} で表現し直すことで得られる。(52)、(53) と (55) より、繰り込まれた転送行列のブロック $\mathcal{T}_{(M=4)}^A$ は

$$\begin{aligned} & \mathcal{T}_{(M=4)}^A(\sigma_{2n-1}, \tau_1, k_{2n-1}, \tau_2, \tau_3, \sigma_{2n-1}, \tau_4; \sigma_{2n}, \tau_1, k'_{2n+1}, \tau_2, \tau_3, \sigma_{2n}, \tau_4) \\ &= \sum_{\sigma_{2n-1}, \tau_2} \sum_{\sigma_{2n-1}, \tau_3} \sum_{\sigma_{2n+1}, \tau_2} \sum_{\sigma_{2n+1}, \tau_3} \sum_{\sigma_{2n}, \tau_3} v_k^R(\sigma_{2n-1}, \tau_2, \sigma_{2n-1}, \tau_3) v_{k'}^L(\sigma_{2n+1}, \tau_2, \sigma_{2n+1}, \tau_3) \\ & \quad \mathcal{T}_{(M=3)}^{A'}(\sigma_{2n-1}, \tau_1, \sigma_{2n-1}, \tau_2, \sigma_{2n}, \tau_3; \sigma_{2n}, \tau_1, \sigma_{2n+1}, \tau_2, \sigma_{2n+1}, \tau_3) \\ & \quad r(\sigma_{2n-1}, \tau_3, \sigma_{2n-1}, \tau_4; \sigma_{2n}, \tau_3, \sigma_{2n}, \tau_4) \end{aligned} \quad (56)$$

のようにして求めることができる。

同様に $\mathcal{T}_{(M=4)}^B$ の繰り込みについて考えると、今度は、

$$e^{-\beta_0 \hbar_{2n-1, 2n}} \mathcal{T}_{(M=2)}^B \rightarrow \mathcal{T}_{(M=3)}^{B'} \quad (57)$$

$$e^{-\beta_0 \hbar_{2n, 2n+1}} \mathcal{T}_{(M=3)}^{B'} \rightarrow \mathcal{T}_{(M=4)}^B \quad (58)$$

のように拡張されるので、まず、 $\mathcal{T}_{(M=3)}^{B'}$ を

$$\begin{aligned} & \mathcal{T}_{(M=3)}^{B'}(\sigma_{2n-1}, \tau_3, \sigma_{2n-1}, \tau_4, \sigma_{2n}, \tau_1; \sigma_{2n}, \tau_3, \sigma_{2n+1}, \tau_4, \sigma_{2n+1}, \tau_1) \\ &= \sum_{\sigma_{2n}, \tau_4} r(\sigma_{2n-1}, \tau_3, \sigma_{2n-1}, \tau_4; \sigma_{2n}, \tau_3, \sigma_{2n}, \tau_4) \\ & \quad \mathcal{T}_{(M=2)}^B(\sigma_{2n}, \tau_4, \sigma_{2n}, \tau_1; \sigma_{2n+1}, \tau_4, \sigma_{2n+1}, \tau_1) \end{aligned} \quad (59)$$

とにおいて得られる $\mathcal{T}_{(M=4)}^B$ の転送行列のブロック

$$\begin{aligned} & \mathcal{T}_{(M=4)}^B(\sigma_{2n,\tau_2}, \sigma_{2n-1,\tau_3}, \sigma_{2n-1,\tau_4}, \sigma_{2n,\tau_1}; \sigma_{2n+1,\tau_2}, \sigma_{2n+1,\tau_3}, \sigma_{2n+1,\tau_4}, \sigma_{2n+1,\tau_1}) \\ &= \sum_{\sigma_{2n,\tau_3}} r(\sigma_{2n,\tau_2}, \sigma_{2n,\tau_3}; \sigma_{2n+1,\tau_2}, \sigma_{2n+1,\tau_3}) \\ & \quad \mathcal{T}_{(M=3)}^{B'}(\sigma_{2n-1,\tau_3}, \sigma_{2n-1,\tau_4}, \sigma_{2n,\tau_1}; \sigma_{2n,\tau_3}, \sigma_{2n+1,\tau_4}, \sigma_{2n+1,\tau_1}) \end{aligned} \quad (60)$$

を表現したときに現れる自由度 $\sigma_{2n-1,\tau_3}, \sigma_{2n-1,\tau_4}$ と $\sigma_{2n+1,\tau_3}, \sigma_{2n+1,\tau_4}$ に関する密度行列を求めなければならない。そのために転送行列 $\mathcal{T}_{(M=2)}$ の最大固有値を与える左右の固有ベクトルを用いて

$$\begin{aligned} & \rho(\sigma_{2n-1,\tau_3}, \sigma_{2n-1,\tau_4}; \sigma_{2n+1,\tau_3}, \sigma_{2n+1,\tau_4}) \\ &= \sum_{\sigma_{\tau_1}} \sum_{\sigma_{\tau_2}} V_L(\sigma_{\tau_1}, \sigma_{\tau_2}, \sigma_{2n-1,\tau_3}, \sigma_{2n-1,\tau_4}) V_R(\sigma_{\tau_1}, \sigma_{\tau_2}, \sigma_{2n+1,\tau_3}, \sigma_{2n+1,\tau_4}) \end{aligned} \quad (61)$$

のように密度行列を求める。後は、この密度行列を対角化し、左右の固有ベクトル $v_k^L(\sigma_{\tau_3}, \sigma_{\tau_4})$ 、 $v_k^R(\sigma_{\tau_3}, \sigma_{\tau_4})$ を得て、転送行列のブロック $\mathcal{T}_{(M=4)}^B$ の繰り込みを

$$\begin{aligned} & \mathcal{T}_{(M=4)}^B(\sigma_{2n,\tau_2}, k_{2n-1,\tau_3,4}, \sigma_{2n,\tau_1}; \sigma_{2n+1,\tau_2}, k'_{2n+1,\tau_3,4}, \sigma_{2n+1,\tau_1}) \\ &= \sum_{\sigma_{2n-1,\tau_3}} \sum_{\sigma_{2n-1,\tau_4}} \sum_{\sigma_{2n+1,\tau_3}} \sum_{\sigma_{2n+1,\tau_4}} \sum_{\sigma_{2n,\tau_3}} v_k^R(\sigma_{2n-1,\tau_3}, \sigma_{2n-1,\tau_4}) v_{k'}^L(\sigma_{2n+1,\tau_3}, \sigma_{2n+1,\tau_4}) \\ & \quad \mathcal{T}_{(M=3)}^{B'}(\sigma_{2n-1,\tau_3}, \sigma_{2n-1,\tau_4}, \sigma_{2n,\tau_1}; \sigma_{2n,\tau_3}, \sigma_{2n+1,\tau_4}, \sigma_{2n+1,\tau_1}) \\ & \quad r(\sigma_{2n,\tau_2}, \sigma_{2n,\tau_3}; \sigma_{2n+1,\tau_2}, \sigma_{2n+1,\tau_3}) \end{aligned} \quad (62)$$

のように行う。

この後、 $\mathcal{T}_{(M=5)}^A$ を得るには、ここで得られた $\mathcal{T}_{(M=4)}^A, \mathcal{T}_{(M=4)}^B$ を $\mathcal{T}_{(M=3)}^a, \mathcal{T}_{(M=3)}^b$ と見なし $M=3$ の転送行列

$$\begin{aligned} & \mathcal{T}_{(M=3)}(\sigma_{2n-1,\tau_1}, k_{2n-1,\tau_2,3}, \sigma_{2n-1,\tau_4}, k_{2n-1,\tau_5,6}; \sigma_{2n+1,\tau_1}, k_{2n+1,\tau_2,3}, \sigma_{2n+1,\tau_4}, k_{2n+1,\tau_5,6}) \\ &= \sum_{\sigma_{2n,\tau_1}} \sum_{\sigma_{2n,\tau_4}} \mathcal{T}_{(M=3)}^a(\sigma_{2n-1,\tau_1}, k_{2n-1,\tau_2,3}, \sigma_{2n-1,\tau_4}; \sigma_{2n,\tau_1}, k_{2n+1,\tau_2,3}, \sigma_{2n,\tau_4}) \\ & \quad \mathcal{T}_{(M=3)}^b(\sigma_{2n,\tau_4}, k_{2n-1,\tau_5,6}, \sigma_{2n,\tau_1}; \sigma_{2n+1,\tau_4}, k_{2n+1,\tau_5,6}, \sigma_{2n+1,\tau_1}) \end{aligned} \quad (63)$$

をつくり、その最大固有値を与える固有ベクトルを求めた後、それを用いて密度行列をつくり、さらにそれを対角化することで固有ベクトルを求め、その固有ベクトルを使って $k_{\tau_2,3}, \sigma_{\tau_4}$ から $k_{\tau_2,3,4}$ への繰り込みを行うことになる。以下、これを繰り返すことで転送行列の基底の数を増やすことなく Trotter 数 M を一つずつ増やしていくのである。

5.4 複素固有値の問題と対策

ここで、有限温度 DMRG の方法の最も難しい問題点である複素固有値の出現についてに触れたい。有限温度 DMRG の数値計算上の特徴は非エルミート行列を取り扱わなければならない

いところにある。この非エルミート性は、分配関数を鈴木 Trotter 分解するところで自然に生じてしまうものであるが、非エルミート行列の固有値は一般に実数になることが保証されていない。したがって、対角化を精度よく行わなければ転送行列の持つ本来の対称性が数値誤差の累積により次第にずれ、密度行列の固有値が複素数になったり負になったりしてしまう可能性がある。密度行列の固有値が複素数や負になってしまうと、固有値の大きなものを優先的に残すという固有値が正の実数であることを前提とした基底選択の基準が適用できなくなり、以後の繰り込みが困難となる。

この問題に対する対策として考えられることが“密度行列のサブブロック化”と“一貫した繰り込み”である。まず、密度行列の保存量 Q を用いたサブブロック化であるが、転送行列に保存量 Q がある場合、それぞれ異なる量子数を持つ基底 $|\sigma_i, \tau_j, \sigma_i, \tau_{j+1}\rangle$ は基底変換によって混ざることはいない。すなわち、変換後の基底 $|k\rangle$ もある決まった量子数 Q_k をもつ。このことは密度行列も転送行列と同様に量子数 Q によっていくつかのブロックに分割されていることを意味する。したがって、密度行列をサブブロックに分割し、それぞれを別々に対角化することで計算時間の短縮と精度の向上が図れる。さらに、密度行列のサブブロック化によって、転送行列の対称性に伴う密度行列の固有値の縮退が、対角化時において取り除かれるため、非エルミート行列を数値的に対角化する際の数値的不安定性が除かれ、数値誤差の累積が抑えられる。

次に一貫性した繰り込みであるが、転送行列にはハミルトニアンを反映した対称性があるので、この対称性を崩さないために縮退する固有値をもつ基底は全て採用するか捨てる必要がある。また、数ステップ繰り込んだ後で、基底の変換行列が一定の構造を持つようになったら、その構造を崩さないように同じ量子数 Q をもつ基底の総数を固定し、繰り込みの途中で転送行列の持つ構造を壊さないようにする工夫が考えられる。

6 動的相関関数、一粒子状態密度の計算

最後に、この有限温度 DMRG の方法により計算できる物理量として、帯磁率や比熱のような静的熱力学量の他に相関関数の相関長、局所的動的帯磁率、温度グリーン関数、一粒子状態密度があることを付け加えておきたい。帯磁率や比熱は転送行列の最大固有値を数値的に微分することで、あるいは磁化やエネルギーを転送行列の最大固有値に対する固有ベクトルから得ることで求めることができるが、相関関数の相関長は最大固有値と励起の種類に応じて量子数を制限したときの最大固有値との比から得ることができ、動的相関関数や一粒子状態密度は虚時間方向の相関関数を最大固有値を与える固有ベクトルから求め、それを実時間軸へ Padé 近似を用いて解析接続することで、あるいは虚時間方向の相関関数から最大エントロピー法を用いることで得ることができる。

謝辞

有限温度 DMRG を用いた研究を進めるに当たって様々な助言を下さった神戸大の西野友年先生、東大物性研の上田和夫教授、また、計算上のアイデアについて有益な議論を交わした ETH の Beat Ammon 氏、動的相関関数の計算の可能性について議論をして下さった京大基研の Manfred Sigrist 教授に深く感謝いたします。

参考文献

- [1] S. R. White: Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2863.
- [2] S. R. White: Phys. Rev. B **48** (1993) 10345.
- [3] S. R. White: Phys. Rev. B **48** (1993) 3844.
- [4] S. R. White and D. J. Scalapino: Phys. Rev. B **55** (1997) 14701; Phys. Rev. B **57** (1998) 3031.
- [5] N. Shibata, K. Ueda, T. Nishino, and C. Ishii: Phys. Rev. B **54** (1996) 13495.
- [6] S. R. White and I. Affleck: Phys. Rev. B **54** (1996) 9862.
- [7] T. Nishino: J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995) 3598.
- [8] T. Nishino and K. Okunishi: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 891.
- [9] K. Hida: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 895.
- [10] S. Moukouri and L. G. Caron: Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 4640.
- [11] R. J. Bursill, T. Xiang and G. A. Gehring: J. Phys.: Condns. Matter **8** (1996) L583.
- [12] X. Wang and T. Xiang: Phys. Rev B **56** (1997) 5061.
- [13] N. Shibata: J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997) 2221.
- [14] N. Shibata, B. Ammon, M. Troyer, M. Sigrist and K. Ueda: J. Phys. Soc. Jpn. **67** No.4 (1998) .
- [15] H. Betsuyaku: Phys. Rev. Lett. **53** (1984) 629; Prog. Theor. Phys. **73** (1985) 319.
- [16] T. Koma: Prog. Theor. Phys. **81** (1989) 783.