

「密度行列繰り込み群」の変分原理^{*})1) 西野友年^{*} 2) 奥西巧一^{**} 3) 引原俊哉^{***}

1) 神戸大学理学部 2) 大阪大学大学院理学研究科 3) 神戸大学大学院自然科学研究科

(1997 年 4 月 10 日受理)

密度行列繰り込み群 (DMRG) の正体は、「密度行列より導かれる精密な数値変分法」です。変分法というと、「基底波動関数の形を物理的直感に基づいて独断と偏見で定める」ような職人芸的な方法...に聞こえますが、DMRG は「計算対象に最適な変分関数を自動生成する」という点で従来の数値変分法とは一線を画しています。この解説記事では、DMRG の細かな計算手続きよりも、その基本原理に目を向けることにします。「密度行列」繰り込み群という名前の由来や、DMRG の背後にある変分原理について、一緒に考えましょう。

§1. はじめに

密度行列繰り込み群 Density Matrix Renormalization Group¹⁾ (以下略称 DMRG を用います) が登場してから既に数年が経過しました。DMRG が登場した直後は「驚くべき精度の変わった数値計算法」という印象が強かったらしく、人々が「数値計算の常套手段」として DMRG を使い始めるまでに、しばらく時間がかかりました。²⁾ やがて Lanczos 対角化に限界を感じた数値計算の専門家達 (著者たちも同じ穴のムジナ) が、雪崩を打って DMRG による数値計算に参入し、現在では実に幅広く応用されるようになりました。³⁾ 既に数多くの応用事例があるのですが、せっかくの和文解説ですので、国内の皆様の仕事をいくつか取り上げてみましょう。ボンド交代系への応用⁴⁾、ランダムスピン系への応用⁵⁾、ハバード模型への応用⁶⁾、近藤格子系への応用⁷⁾、ベージェ格子模型への応用⁸⁾、磁化過程の計算⁹⁾ などがこれまでに行われています。(他にも多数....)

もともと 1 次元量子系の基底状態に対する計算法として確立された DMRG ですが、その後応用範囲が広がり、2 次元古典系¹⁰⁾ 【手前味噌其の一】や有限温度量子系の熱平衡状態の解析¹¹⁾ なども行われています。これら 2 つの拡張は量子系のハミルトニアンに対する計算法であった DMRG を、2 次元古典系の転送行列に対する方法として表現しなおすこと

^{*} e-mail: nishino@phys560.phys.kobe-u.ac.jp^{**} e-mail: okunishi@godzilla.phys.sci.osaka-u.ac.jp^{***} e-mail: hikiyara@phys560.phys.kobe-u.ac.jp^{*}) 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。

によって得られました。昨年 White が公表した「DMRG を 100 倍速くする方法」(図 1 の DMRG++)¹²⁾ を用いると、一段と高速・高精度な DMRG 計算の実行が可能になり、2 次元量子系 (N 段梯子) などにも DMRG が応用できるようになりつつあります。¹³⁾ (当然ながら、3 次元古典系の DMRG 計算事例が現れるのは時間の問題です。だれが最初に手をつけるのか、こっそり注目しています。) なにぶん進歩の早い分野ですので、「目の前の問題を DMRG の助けを借りて解決しよう」とお考えの方は、まず最新情報を cond-mat 等のプレプリントサーバーで拾って下さい — Key-Word は Density Matrix とか DMRG でうまく探せると思います。(たぶん、この記事を印刷している間にも、いくつもの論文が出版されつつあると思います。)

ちょっと話がわき道にそれますが、DMRG には「もう一つの隠れた系譜」があります。(図 1) それは、30 年以上前に Baxter によって定式化された「角転送行列 (Corner Transfer Matrix) の方法」です。¹⁴⁾ Baxter の方法は (Baxter が厳密解の大家なので) 2 次元古典系の厳密解を求める為の解析的手法と思われがちですが、実は数値計算法としても優れていることが知られています。Baxter の計算法は DMRG に通じるものがあり、仮に Baxter の方法が量子系に応用されていれば、ごく自然に DMRG が導出されるはずであった..... のですが、歴史はそうには動きませんでした。Baxter の方法の数値計算法的側面は、忘れ去られてしまったのです。(「物事にはタイミングが重要」というのは、我々の師・菊池誠先生の御言葉。) 時は流れて 1995 年、奥西は DMRG と Baxter の方法の共通点を見い出しました。¹⁵⁾ 【手前味噌其の二】そして、両者の「いいところ取り」をして作ったのが CTMRG という古典系の繰り込み群手法です。¹⁶⁾ これについては、(本当は話したくてウズウズしているのですが) また別の機会にお話ししましょう。

さて、DMRG が幅広く応用されるにつれて、物理学以外の分野にも DMRG モドキが自然発生している事実が浮かび上がって来ました。それらは画像圧縮や、量子情報圧縮などの技法として考案された、あるいは考案されつつあるものです。¹⁷⁾ (図 1 右) こうした DMRG モドキは全て「有限の、ある限られた情報を使って、出来るだけ正確に対象を再現する」という哲学に導かれて得られたものなのです。少し言葉を置き換えて「有限の、ある限られた (relevant な) 自由度を用いて、出来るだけ正確に物理系 (の根本にあるもの) を記述する」と表現しなおすと、まさに「くりこみ群の精神」ではありませんか。どうやら DMRG という手法は、ただの数値計算技法を超えて普遍的な問題解決手段のようです。思うにこの先、繰り込み群と情報理論を包含する方向へ新しい発展があるのではないのでしょうか? まだまだ DMRG の解析的な基礎づけすら存在しない状態ですので、これから DMRG に参入される方にも「仕事のネタ」が数多く残っているのが現在の状況です。とにかく、数値計算に直接タッチしない方でも DMRG の計算原理を知っていれば何らかのご利益があると確信します。(特に、画像圧縮関係の仕事は、現世利益に直結していると思います。)¹⁸⁾

話を元に戻して、この解説の方針について。DMRG の具体的な計算方法は、White による原論文¹⁾に詳しく、詳しく — 成功の秘訣や失敗を呼ぶ落とし穴まで — 記述されていま

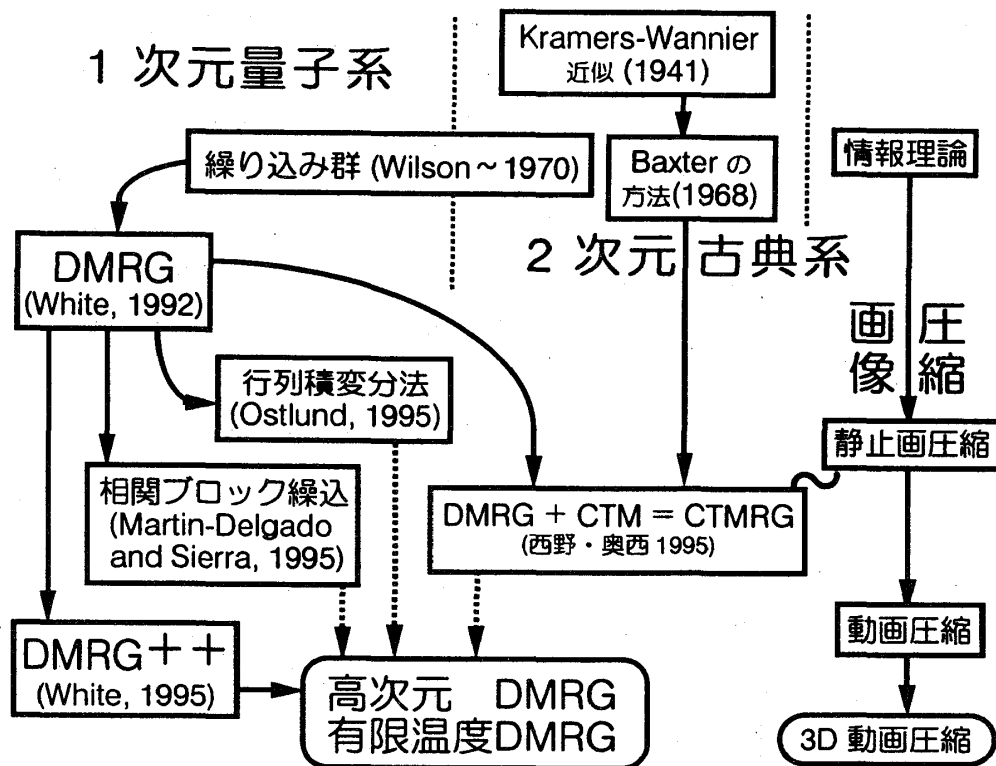


Fig. 1. DMRG の系譜: DMRG に関連した計算手法は、(1) Wilson 繰り込み群に由来するもの²⁰⁾ (2) 古典系の変分法に由来するもの¹⁴⁾ (3) 情報圧縮に由来するもの、があります。探せば、もっと他のものも出てくるかもしれません。(例えばデジタル録音媒体の音声圧縮形式など。)

すので、直ちに DMRG による数値計算を開始したい方は、先に原論文を読まれた方がよろしいでしょう。相補的に本稿では「密度行列繰り込み群の背景」、もっと直接的に言うならば「密度行列を、どのように繰り込み操作と関係づけるか」について説明します。¹⁹⁾ DMRG は、実空間繰り込み群でありながら、(70 年代に試みられた荒い — 近似的な — 実空間繰り込み群に比べて) なぜ桁外れに精密なのか、また反復計算なのに誤差が累積しないのは何故なのか、計算物理屋から見て不思議な点が多々あるのですが、通常とは少し違った角度から DMRG を眺め直す事によって疑問は氷解することでしょう。先に少しだけタネ明かしをすると、『DMRG は、“密度行列を対角化する直交行列 (の一部)” により作られる、行列積型の変分波動関数を最適化する方法だ』と言えます。この意味において、DMRG には「通常のくりこみ群」²⁰⁾ らしからぬ所も多々あるのですが、これは単に用語の問題ですので、ここでは深入りしません。“密度行列を対角化する直交行列” とは何でしょうか、また変分関数はどのような形をしているのでしょうか? 順を追ってこれから説明します。

§2. 密度行列と分配関数

「密度行列」繰り込み群 (DMRG) について考えるために、まず密度行列を定義しておきましょう。密度行列は、量子力学や量子光学などの教科書で取り上げられることが多いのですが、これから考察の対象にするのは量子統計力学で扱う密度行列です。形式的に定義を与えるならば、(カノニカル・アンサンブルを考えて) 熱平衡状態にある物理系について『トレース ($\text{Tr } \rho$) が系の分配関数 Z である行列 ρ を密度行列と呼ぶ』というのが味も素っ気も無い密度行列の定義でしょう。これでは余りにも不親切なので、もう少し具体的な系に対して密度行列を定義しましょう。例としては何でも選べるのですが、ここでは DMRG を育んだ模型である $S = 1/2$ ハイゼンベルグスピン系に着目しましょう。

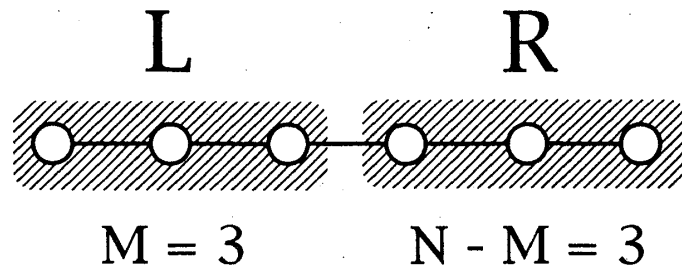


Fig. 2. N サイト 1 次元ハイゼンベルグ模型: この図ではシステムサイズ $N = 6$ で、左の部分系の大きさは $M = 3$ 。これ以後、常に Open Boundary の系を扱います。

1 次元 $S = 1/2$ ハイゼンベルグ模型のハミルトニアン $\hat{H}$ は、隣接するスピン s_i と s_{i+1} の内積 $h_{ij} = s_i \cdot s_j$ によって

$$\hat{H} = J \sum_{i=1}^{N-1} h_{i, i+1} \quad (2.1)$$

と書き表されます。 J は相互作用定数で、 $J > 0$ ならば反強磁性的、 $J < 0$ ならば強磁性的です。 N はシステムサイズ (= 系に含まれるスピンの数) です。従って $\hat{H}$ を行列表示すると 2^N 次元実対称行列になります。(注: $\hat{H}$ は全スピン $S = \sum_{i=1}^N s_i$ と、その z 成分を保存しますので、 $\hat{H}$ は 2^N 次元のブロック対角行列になります。実際の数値計算では、ブロックそれぞれを独立の行列として取り扱いますので、数値演算する行列のサイズは 2^N よりだいぶ小さくなります。) 後の便宜上、系を M サイトの左側部分系 $[L]$ と、 $N - M$ サイトの右側部分系 $[R]$ に分割して考えます — $[L]$ は $\{s_1, s_2, \dots, s_M\}$ を含み、 $[R]$ は $\{s_M, s_{M+1}, \dots, s_N\}$ を含みます。(図 2) 部分系 $[L]$ 及び $[R]$ のスピン配列を、いちいち矢印で $\{\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots\}$ と表記するのは繁雑なので、この章の最後まで $[L]$ のスピン配列を l で、また $[R]$ のそれを r で代表させ、全系のヒルベルト空間の基底を $|l, r\rangle$ と書き表すことにします。この基底でハミルトニ

アン (式 2.1) を行列表示すると

$$H_{lr, l'r'} = \langle lr | \hat{H} | l'r' \rangle \quad (2.2)$$

という実対称行列になります。

影の声: ハイゼンベルグスピン系を選んだのは、ハミルトニアンが実対称で数値的取り扱いが特に簡単だからです。以下の説明でも、ハミルトニアンの実対称性を仮定します。エルミート行列は、行列次元が 2 倍の実対称行列に“忠実に”書き直すことができますので、実対称行列と全く同様に扱えます。より一般的なケース、例えば (a) ハミルトニアンに温度 (= 虚時間) 依存性がある (b) ハミルトニアンが非対称行列になる – などの場合については、少し注意が必要なのですが、数式を繁雑にするだけで本質的な所は変わりませんので、本稿では取り扱いません。

式 2.1 で与えられた 1 次元スピン系が、温度 $\beta = 1/k_B T$ の熱浴と (限りなく) 弱く結合している場合に、系の密度演算子は $\hat{\rho} = \exp(-\beta \hat{H})$ で表わされ、その行列要素 (= 密度行列) は

$$\rho_{lr, l'r'} = \langle lr | e^{-\beta \hat{H}} | l'r' \rangle \quad (2.3)$$

と (形式的に) 与えられます。この $\rho_{lr, l'r'}$ は、虚時刻 $\tau = 0$ の量子状態 $\Psi(0)_{l'r'}$ を虚時刻 $\tau = \beta$ に推進する働き

$$\Psi(\beta)_{lr} = \sum_{l'r'} \rho_{lr, l'r'} \Psi(0)_{l'r'} \quad (2.4)$$

を持ちます。この式から浮かぶイメージは、長さ N の鎖が β だけ動く様子ですので、密度行列 $\rho_{lr, l'r'}$ は $\tau = 0$ と $\tau = \beta$ の間に張られた 2 次元面に対応していると考えるのが自然でしょう。 $H_{lr, l'r'}$ が実対称行列だったので、ここで与えられる $\rho_{lr, l'r'}$ も実対称になります。(図 3)

DMRG で扱う密度行列は、 $\rho_{lr, l'r'}$ そのものではなくて、右側部分系についてトレースを取ったもの

$$\rho_{l, l'}^L = \sum_r \rho_{lr, l'r} \quad (2.5)$$

と、同様に左側部分系についてトレースを取ったもの

$$\rho_{r, r'}^R = \sum_l \rho_{lr, l'r'} \quad (2.6)$$

で、一般には「密度行列」とは区別して、「密度副行列」 (Density Submatrix) と呼ばれているものです。 $\rho_{l, l'}^L$ は、虚時刻 $\tau = 0$ における左側部分系 $[L]$ のスピン配列 l' を虚時間発展させて、 $\tau = \beta$ の配列 l に移す行列ですが、 $[R]$ からの影響が含まれている点に注意して下さい; $[L]$ 内部のスピン揺らぎが、 $[L]$ と $[R]$ の継ぎ目を通して $[R]$ に影響を与えて、更にその反跳効果を再び $[L]$ が受けるのです。その意味において $\rho_{l, l'}^L$ は右側部分系 $[R]$ の情報を含

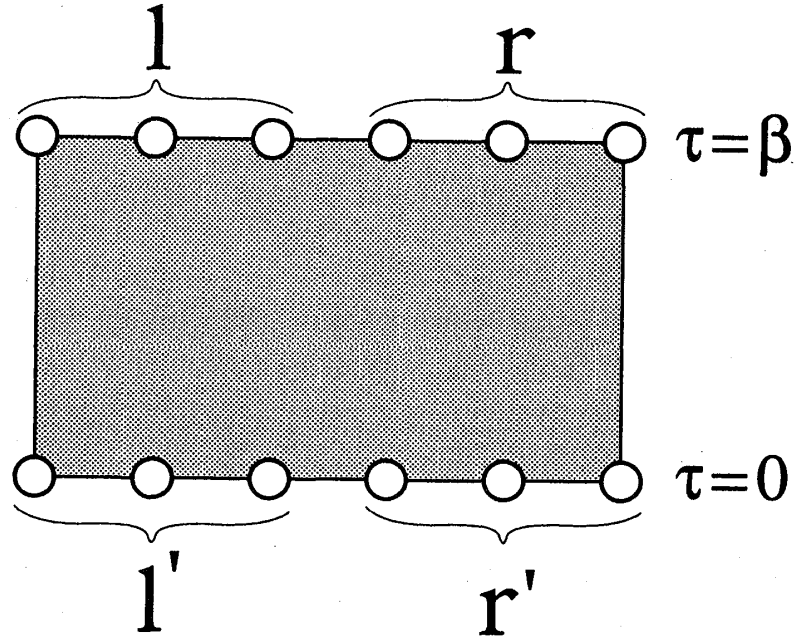


Fig. 3. 1次元量子系の密度行列が張る2次元面: 長さ N の一次元量子系 (自由端) を考えた時、密度行列 $\rho_{lr, l'r'}$ は $N \times \beta$ の長方形領域に対応していると考えられる。

んでいるのです。例えば $[L]$ が2サイト、 $[R]$ が3サイトの場合 ($N=5, M=2$) の密度副行列 $\rho_{l, l'}^L$ (4次元行列) を実際に求めてみると、それは $[L]$ が2サイト、 $[R]$ が4サイトの場合 ($N=6, M=2$) の $\rho_{l, l'}^L$ (これも4次元行列) とは一致しません。

補足: 単に用語の問題なのですが、密度行列繰り込み群の世界では、密度副行列 $\rho_{l, l'}^L$ や $\rho_{r, r'}^R$ を単に「密度行列」と呼びます。その理由は、(1) いちいち密度“副”行列と「副」の字を付けるのが繁雑 (2) 一番最初にあげた『トレース ($\text{Tr } \rho$) が系の分配関数 Z である行列 ρ を密度行列と呼ぶ』という定義を字句どおり解釈すると、関係式

$$Z = \text{Tr } \rho = \text{Tr } \rho^L = \text{Tr } \rho^R \quad (2.7)$$

より $\rho_{l, l'}^L$ や $\rho_{r, r'}^R$ を「密度行列」と呼んで差し支えないからです。この慣例に従い、これ以後とくに断わらない限り ρ^L や ρ^R も ρ と同じく密度行列と呼びます。よくよく考えてみると式2.3の $\rho_{lr, l'r'}$ も「系と弱く熱結合している外側の全宇宙の存在」を考えると、「密度副行列」であった訳です。それを思い起こすと「宇宙全体の発展を与える密度行列」以外は常に密度“副”行列と呼ばざるを得ず、ちょっと堅苦しすぎます。まあ、些細な名称にこだわらずに、『密度行列繰り込み群の記述に出てくる「密度行列」という用語は ρ^L や ρ^R をも指す』という点だけ記憶して下さい。

図3で密度行列 ρ (式2.3) が長方形領域 $L \times \beta$ に対応している事を示しました。この対応をそのまま ρ^L , ρ^R や Z に当てはめると、図4の様になります。分配関数 Z (式2.7) は

ρ のトレースを取ったもの — 即ち長方形の 2 辺を貼り合わせたもの — なので左上の円筒に相当します。 ρ^L (式 2.5) と ρ^R (式 2.6) は、長方形の 2 辺の一部を貼り合わせたもので、「横に切り口の少し入った」円筒に対応しています。トレース操作が貼り合わせに対応していることを逆の立場から見ると、先に円筒に対応する Z が与えられていて、それにハサミを入れて「切り開く」事によって順次 ρ^L , ρ^R , そして ρ などが得られると解釈する事も可能です。

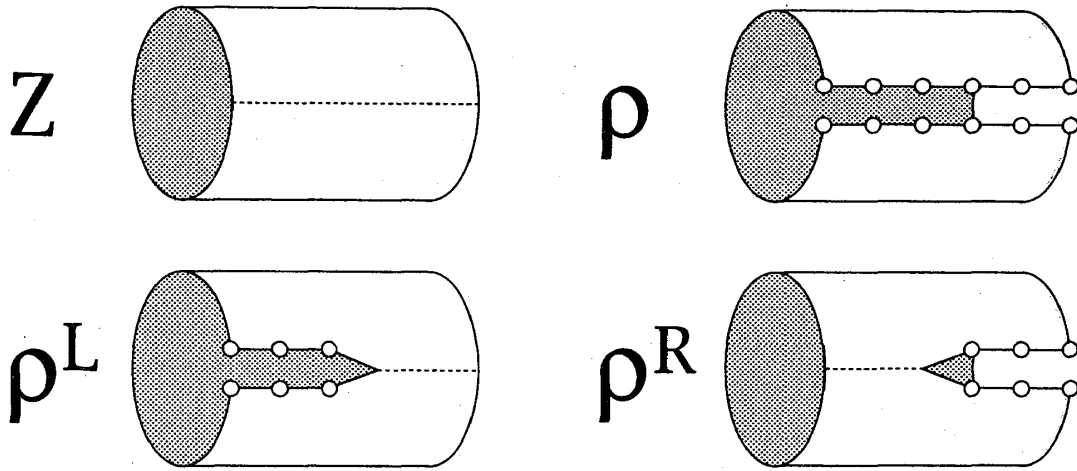


Fig. 4. 密度行列と分配関数の図形イメージ: 分配関数 Z は円筒に対応していて、それを「切り開く」操作によって密度行列 ρ^L (式 2.5), ρ^R (式 2.6), ρ (式 2.3) が順次得られる。

§3. 密度行列の圧縮

密度行列繰り込み群は、(絶対零度 $\beta \rightarrow \infty$ における) 密度行列 ρ^L (と ρ^R) に関連した行列を数値的に扱います。「数値的に扱う」とは、コンピューターのメモリーに行列要素を格納して、行列同士の四則演算を行うことを指すのですが、(1996 年の時点で) 現存するコンピューターでは約 3000 次元、大きくてもせいぜい 30000 次元までの行列しか取り扱えません。 N サイトの $S = 1/2$ ハイゼンベルグ模型を念頭におくと、左側部分系 $[L]$ のサイズが M の場合 ρ^L は 2^M 次元行列ですから、密度行列のサイズ (= 行列次元) は M が増加するとともに急激に大きくなります。このままでは $M = 12$ あたりが数値計算で取り扱える限度です。従って、これより大きな系を数値的に扱おうとすれば、何か工夫をして密度行列の次元を大幅に落とさなければなりません。

密度行列とは、系の情報を余さず持つ行列です。その「次元を落とす」となると、当然ながら幾つか系の情報を捨てなければなりません。出来れば「さして重要ではない情報」を落

としたいものです。系の最も重要な情報は何でしょうか？ 我々の拠り所である『トレース ($\text{Tr } \rho$) が系の分配関数 Z である行列 ρ を密度行列と呼ぶ』という言葉に照らすと、まず一番大切なもの (の一つ) は分配関数 Z であると言えるでしょう。事実 Z がわかれば熱力学量や、 $\beta \rightarrow \infty$ の極限を取って基底エネルギーを求める事ができます。そこで、これから『 ρ^L よりも行列次元の小さな行列で、そのトレースが分配関数 Z の良い近似を与えるものを探すことによって、本来 2^M 次元である密度行列 ρ^L の情報を、よりコンパクトな m 次元行列 $\tilde{\rho}^L$ の中に圧縮する』ことを目指しましょう。ここに出てきた m は 2^M よりも小さな自然数です。圧縮された密度行列 $\tilde{\rho}^L$ は一体どんな行列なのでしょう。もちろん、『行列要素が分配関数 Z である 1 次元行列』は、上記の要件を満たすのですが、それは「わざとらしい」ですし、しかも少々情報を落とすすぎています。 m 次元実対称行列は、その固有値として m 個の主要な自由度 ($\sim$ 情報) を持っていますから、数値計算で取り扱える限り大きな m を取るのが望ましいのです。 (m として数十から数千の間の値を考えるのが实际的です。)

上の目的意識に基づいた ρ^L の行列次元圧縮は ρ^L の対角化を通じて実現できます。 ρ^L は 2^M 次元実対称行列でしたので、適当な直交行列 $Q = (q_1, q_2, \dots)$ を用いて

$$Q^T \rho^L Q = \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots) \quad (3.1)$$

と対角化する事ができます。ここで $Q^T = Q^{-1}$ は Q の転置行列、 λ_i は Q の列ベクトル q_i に対応する ρ^L の固有値です。 (q_i 同士は直交しています。) 記号 $\text{diag}(\dots)$ は、対角要素がカッコの中味で与えられる対角行列を表わします。これ以後、固有値は大きい順 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots$ に並んでいると仮定しましょう。式 3.1 の両辺のトレースを取ると、 $QQ^T = 1$ より固有値全体の和 $\sum_{i=1}^{2^M} \lambda_i$ が分配関数 Z に一致することがわかります。通常の物理系において、密度 (副) 行列の固有値 λ_i は全て正 (又はゼロ) なので、 λ_i を大きい方から $m (< 2^M)$ 個足し合わせたもの

$$\tilde{Z} = \sum_{i=1}^m \lambda_i \quad (3.2)$$

は常に Z よりも (少しだけ) 小さいことが分かります: $Z \geq \tilde{Z}$ (これは自明)。実は m が充分大きければ、真の分配関数 Z と上で与えた $\tilde{Z}$ の差

$$Z - \tilde{Z} = \sum_{i=m+1}^{2^M} \lambda_i \quad (3.3)$$

は、 Z に比べて非常に小さくなることが経験的に知られています: $Z \gg Z - \tilde{Z}$ 。これは、 λ_i が i に対して指数関数的に (又はベキ乗的に) 減衰するからです。ですから $\tilde{Z}$ は分配関数 Z の良い近似値なのです。 (この事実は、massive な系に対しては証明することが可能です。) 従って最初に挙げた $\tilde{\rho}^L$ として単純に

$$\tilde{\rho}^L = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m) \quad (3.4)$$

を選べば、ひとまず ρ^L を m 次元に圧縮するという目的を達成できます。密度行列 ρ^L の固有値 λ_i は「外界 ($=[R]$) との相関による系 ($=[L]$) の揺らぎの重率」を記述していると考え

られますから、このように ρ^L を定めることは、「左右のブロック $[L]$ - $[R]$ 間に引き起こされる (Virtual な) スピン揺らぎの大切なモードを拾っている」という意味合いがあります。(実は、DMRG の開祖 White は DMRG 発明以前に Wilson と共同で「2 つの部分系の滑らかな接合」の研究をしています。²¹⁾ その仕事が、やがて DMRG として実を結んだようです。)

もう少しエレガント (?) に $\tilde{Z}$ を表現しようと考えれば、まず $2^M \times m$ 次元行列 $\tilde{Q} = (q_1, q_2, \dots, q_m)$ (つまり行列 Q の一部分) を導入し、 $\tilde{\rho}^L$ を

$$\tilde{\rho}^L = \tilde{Q}^T \rho^L \tilde{Q} \quad (3.5)$$

と書いておいて、そのトレースを取ることによって $\tilde{Z}$ を

$$\tilde{Z} = \text{Tr} \tilde{\rho}^L = \text{Tr} (\tilde{Q} \tilde{Q}^T \rho^L) \quad (3.6)$$

と表わせば OK です。右辺に出てくる $P = \tilde{Q} \tilde{Q}^T$ は、

$$P^2 = P, \text{Tr} P = m \quad (3.7)$$

を満たす「自由度を 2^M から m へ落とす」射影行列です。ここで定義される P に限らず、一般に『任意の射影行列 $P = P^2$ について、

$$Z = \text{Tr} \rho^L \geq \text{Tr} (P \rho^L) \quad (3.8)$$

が成立する』と言えます。これは、不可逆な射影変換 (繰り込み群変換) で密度行列の自由度を制限すると、得られる近似分配関数 (右辺) が真の分配関数 (左辺) よりも必ず小さくなるという事実を示します。自明な事実かもしれませんが、

これが密度行列繰り込み群の基礎をなす変分関係式です。

式 3.8 を図形で表わすと、図 5 の様になります。三角形が行列 Q に対応していて、その頂点上にある黒い四角形は m 状態の変数を表わします。行列 Q が ρ^L 上の 3 つの $S = 1/2$ スピン (白丸) が持つ自由度 ($2^3 = 8$) をまとめて、一つの m 状態変数 (黒四角) に射影することが直感できるでしょう。この射影操作は、(伝統的な) 実空間繰り込み²⁰⁾と全く同じですので、得られる m 状態変数は「 m 状態のブロック・スピンである」と見なせます。ここで注意すべき点は、ブロック・スピンの元々のスピン (図 5 中の白丸) の自由度を均等に持っているのではないことです。非常に長い (massive な) 系を考えていただければ自明なのですが、 ρ^L の行列要素は左側の方 (円筒の端の方) のスピン変数 (白丸) には余り影響されません。(遠く離れたスピン同士は、ほぼ無相関だからです。) 従って、「DMRG に登場する m 状態ブロックスピンは、 $[L]$ と $[R]$ の継ぎ目あたりの動的な自由度を主に記述する」ということがわかります。こういう意味で DMRG に出てくるブロック・スピンは (計算尺の対数目盛みたいな物で) 左右の系の継ぎ目付近のスピン自由度を「ほぼそのまま」持っていて、系の両端に向かっていくと段々と個々のスピン自由度が「ばやけて」行きます。

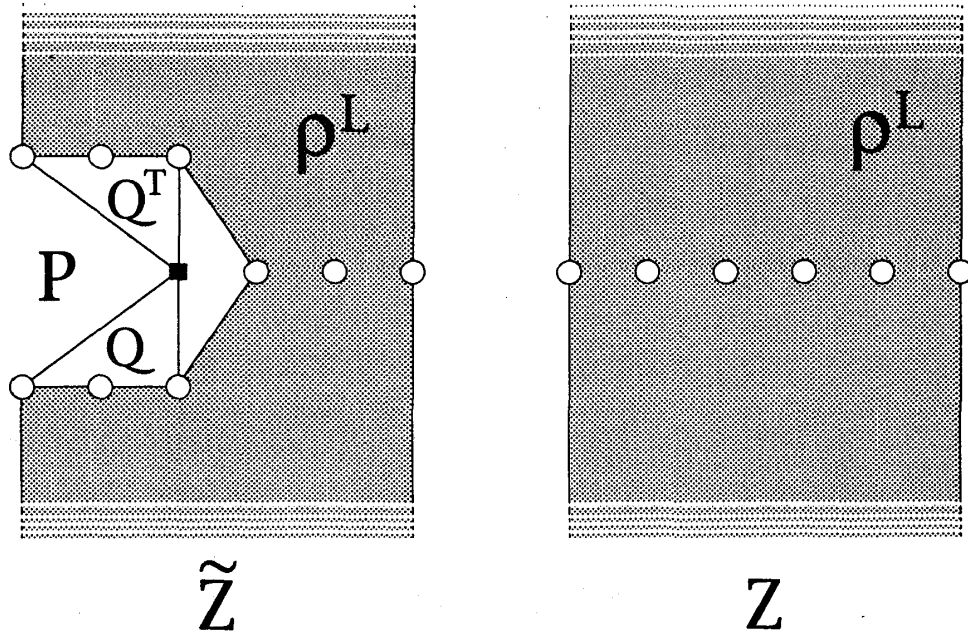


Fig. 5. 密度行列への射影演算子の挿入: $N = 6, M = 3$ の場合の $\text{Tr} \rho^L$ と $\text{Tr} \tilde{\rho}^L$. 左右両図ともに、下端は上端につながっている。(周期境界条件)

§4. 波動関数の行列積表示とゼロ温度極限

先の章では、密度副行列 ρ^L を対角化する事によって、射影行列 $P = \tilde{Q}\tilde{Q}^T$ を得ました。行列 $\tilde{Q}$ は DMRG でブロック・スピン変換を行う行列なのですが、実はこれ以外にも重要な働きを持っています。この章では $\tilde{Q}$ (とその仲間たち) が ハミルトニアン H の固有波動関数と関係している事実を明らかにします。

数式を簡素にするために、今後 6 サイトの系 ($N = 6$) を取り扱うことにします。各サイトのスピン変数を左から $a, b, c, d, e, f (= \pm 1/2)$ と呼ぶことにしましょう。6 サイトの系など、DMRG を使うまでもなく数値計算に乗せることができるのですが、ここでは学習的な意味をこめて、あえて単純な場合を観察します。(実際の計算では、 N は 100 を超える数です。)

これから見て行くのは、左側部分系 $[L]$ のサイズが $M = 2$ から $M = 6$ の場合 ($M = 6$ の場合というのは $[L]$ が全系の場合です) について、密度行列 ρ^L を対角化して、「波動関数を行列積で表現する」手順です。まず最初に $M = 2$ の場合、即ち左側部分系 $[L]$ のサイズが 2 の場合を考えます。この時、全系の密度行列 ρ に対して右側部分系 $[R]$ のスピン自由度を縮

約することによって

$$\rho_{ab, a'b'}^L = \sum_{cdef} \rho_{abcdef, a'b'cdef} \quad (4.1)$$

2 サイトの $[L]$ に対する ρ^L が与えられます。 ρ^L を対角化 (式 3.1) すると $Q^T \rho^L Q = \Lambda$ — 要素で書き表すと

$$\sum_{aa'bb'} Q_{ab, \xi} \rho_{ab, a'b'}^L Q_{a'b', \xi'} = \delta_{\xi\xi'} \lambda_{\xi} \quad (4.2)$$

— により直交行列 $Q = (q_1, q_2, q_3, q_4)$ を得ます。ここで、 ξ は 1 から 4 までの値を取る 4 状態の変数です。 Q は、二つのスピン変数 $\{a, b\}$ から一つの 4 状態変数 ξ への変換行列とみなせます。

次に $M = 3$ の場合について。今度は $[R]$ のスピン変数 d, e, f について和をとること

$$\rho_{abc, a'b'c'}^L = \sum_{def} \rho_{abcdef, a'b'c'def} \quad (4.3)$$

により 3 サイトの $[L]$ に対する ρ^L が与えられます。ここで先ほどの直交行列 $Q_{ab, \xi}$ を、この ρ^L に作用させてみましょう:

$$\rho_{\xi c, \xi' c'}^L = \sum_{aa'bb'} Q_{ab, \xi} \rho_{abc, a'b'c'}^L Q_{a'b', \xi'} \quad (4.4)$$

すると、生のスピン変数 $\{a, b\}$ ではなくて、4 状態変数 ξ を行列の足に持つ密度行列 $\rho_{\xi c, \xi' c'}^L$ が得られます。この段階で密度行列を対角化すると $R^T \rho^L R = \Lambda'$ すなわち

$$\sum_{\xi\xi'cc'} R_{\xi c, \zeta} \rho_{\xi c, \xi' c'}^L R_{\xi' c', \zeta'} = \delta_{\zeta\zeta'} \lambda'_{\zeta} \quad (4.5)$$

となって、生のスピン変数 c と 4 状態変数 ξ の組 $\{c, \xi\}$ を一つの 8 状態変数 ζ に置き換える直交行列 R を得ます。

次に $M = 4$ の場合について。式 4.1, 4.3 などと同様に、4 サイトの $[L]$ に対する密度行列は

$$\rho_{abcd, a'b'c'd'}^L = \sum_{ef} \rho_{abcdef, a'b'c'd'ef} \quad (4.6)$$

で与えられます。 $M = 3$ の場合に習って、 $Q_{ab, \xi}$ と $R_{\xi c, \zeta}$ をのセットを用いて 3 つのスピン変数 $\{a, b, c\}$ を $\{\xi, c\} \rightarrow \zeta$ の経路で一つの 8 状態変数 ζ に置き換えます:

$$\rho_{\zeta d, \zeta' d'}^L = \sum_{aa'bb'cc'\xi\xi'} R_{\xi c, \zeta} Q_{ab, \xi} \rho_{abcd, a'b'c'd'}^L Q_{a'b', \xi'} R_{\xi' c', \zeta'} \quad (4.7)$$

この $\rho_{\zeta d, \zeta' d'}^L$ を対角化すると、先ほどと同様に $\{\zeta, d\}$ の組から一つの 16 状態変数 η への変換行列 $S_{\zeta d, \eta}$ を得ます。後は推して知るべし、 $M = 5$ の場合を考えると同様に $\{\eta, e\}$ の組からひとつの 32 状態変数 μ への変換を表す直交行列 $T_{\eta e, \mu}$ を得ます。(図 6)

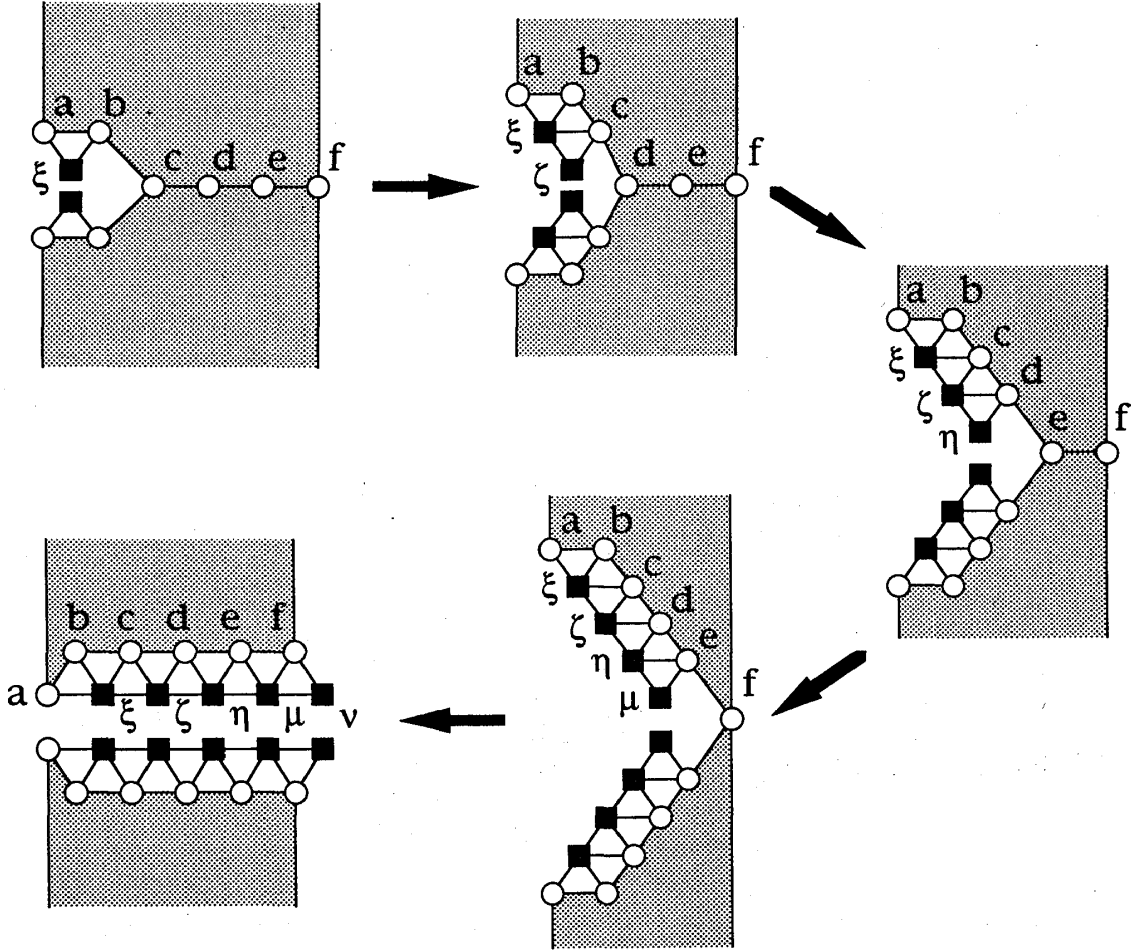


Fig. 6. 密度行列の逐次対角化: ジッパーを開く要領で、密度行列の接合部を順次開いて、そこに直交行列をはさんで行くことができる。(ある人いわく、「社会の窓」) 行列は、 $Q_{ab,\xi}$ $R_{\xi c,\zeta}$ $S_{\zeta d,\eta}$ $T_{\eta e,\mu}$ $U_{\mu f,\nu}$ の順に付加して行く。

この様にして、 $M=6$ にたどりつくと、 $M=N$ になりますので、左側部分系 $[L]$ が系全体になり、右側部分系 $[R]$ が空っぽになります: $\rho^L = \rho$ 。ですから、対角化

$$\sum_{\mu\mu'ff'} U_{\mu f,\nu} \rho_{\mu f,\mu' f'}^L U_{\mu' f',\nu'} = \delta_{\nu\nu'} \lambda_\nu'' \quad (4.8)$$

により最後の直交行列 $U_{\mu f,\nu}$ を得た時点で、右辺の λ_ν'' は $\exp(-\beta E_\nu)$ に一致します。(図 6 の最終的な状態) ここで E_ν はハミルトニアン H の ν 番目の固有値です。

これまでの操作をまとめると、直交行列の積 — というよりは縮約 — $QRSTU$ (添字は省略) を用いて密度行列 ρ を対角化できることがわかります。(式 4.2, 4.4, 4.7, 4.8 の拡張)

$$(QRSTU)^T \rho QRSTU = \text{diag}(e^{-\beta E_0}, e^{-\beta E_1}, \dots) \quad (4.9)$$

これより、 $\Psi = QRSTU$ — 要素で表わせば

$$\Psi_{abcdef}^{\nu} = \sum_{\xi\zeta\eta\mu} Q_{ab,\xi} R_{\xi c,\zeta} S_{\zeta d,\eta} T_{\eta e,\mu} U_{\mu f,\nu} \quad (4.10)$$

が、固有エネルギー E_{ν} を持つ H の固有状態であることは明らかでしょう: $H\Psi^{\nu} = E_{\nu}\Psi^{\nu}$ 。(添字 ν についての和は取りません。) これが「直交行列の意味は何か?」という問に対する最初の回答です

— 固有波動関数を直交行列の積の形で書き表せるのです。

さて、式 4.9 において、ゼロ温度極限 $\beta \rightarrow \infty$ を取ってみましょう。すると、基底エネルギーに関する対角項 $e^{-\beta E_0}$ のみが残ります。(基底状態に縮退のある場合の取扱いは重箱の隅を突つくようなものですので、省略します。) この時、式 4.10 より基底波動関数は

$$\Psi_{abcdef}^0 = \sum_{\xi\zeta\eta\mu} Q_{ab,\xi} R_{\xi c,\zeta} S_{\zeta d,\eta} T_{\eta e,\mu} U_{\mu f,0} \quad (4.11)$$

と書き表わされます。右辺の右端に「ゼロに固定された足を持つ行列 U 」が残っているのはやや目障りなので、

$$T'_{\eta e,f} = \sum_{\mu} T_{\eta e,\mu} U_{\mu f,0} \quad (4.12)$$

により (非直交な) 行列 T' を定義して、 Ψ_0 をよりスッキリとした形

$$\Psi_{abcdef}^0 = \sum_{\xi\zeta\eta} Q_{ab,\xi} R_{\xi c,\zeta} S_{\zeta d,\eta} T'_{\eta e,f} \quad (4.13)$$

と表記しておきましょう。行列 Q, R, S, T を得る手順 (式 4.2 ~ 4.8) に従えば、 ξ は 4 自由度、 ζ は 8 自由度、 η は 16 自由度なのですが、 Ψ_{abcdef}^0 を厳密に表わす事だけが目的ならば、 η は 4 自由度で充分なことが簡単にわかります。(系の左右反転対称性を考え下さい) もっと一般的に N サイトの系の基底波動関数を行列の積に分解すると、ギリシア文字で書かれる変数 — 図中で黒四角の変数 — は最大で $2^{N/2}$ の自由度を必要とします。

1 次元量子系の波動関数を式 4.13 の様に行列積で書き表す試みは、DMRG 以前より繰り返し試みられていて、例えば $S=1$ Heisenberg 模型に対する AKLT 状態や、²²⁾ その拡張である Zittartz の行列積変分関数²³⁾ を挙げる事が出来ます。DMRG は『“密度行列を対角化する直交行列”により作られる変分波動関数を扱う方法』なので、従来の行列積を用いる変分法の拡張とみなすことができます。但し、波動関数の形を予測しておくのではなくて、§ 6 で述べるように「模型に応じて最良の変分波動関数が自動的に生成される」点で、従来の行列積型の変分法から大きく進展しています。

§5. 波動関数の圧縮

式 4.13 に登場する行列 Q, R, S, T' を数値計算で取り扱うことを目的として、行列要素全てをメモリーに格納すると 2^N のオーダーの数値格納領域が必要となります。これはシステ

ムサイズ N がある大きさを超えると実現不可能ですので、§ 3 で密度行列 ρ^L を $\tilde{\rho}^L$ という m 次元行列に圧縮したように、行列の積に分解された基底波動関数 Ψ^0 を“圧縮する”手続きを考えましょう。(DMRG の計算に登場するのは、全て圧縮された量だと言って過言ではありません。) 式 4.2 ~ 4.8 で、 Q, R, S, T を得る過程を見返すと、それぞれの行列のギリシア文字の足 ξ, ζ, η の自由度を高々 m に制限しても「重要 (relevant) な情報は失われていない」ことが分かります。何故ならば ξ, ζ, η などギリシア文字で表わされる添え字は、「値が小さいほど重要 (relevant) で、値が大きければ重要ではない (irrelevant) 状態に対応している」からです。(その理由は、以下を読んでいただければ明らかになります。) これ以後、 Q, R, S, T (又は T') が持つ ξ, ζ, η の自由度を高々 m に制限したものを $\tilde{Q}, \tilde{R}, \tilde{S}, \tilde{T}$ (又は $\tilde{T}'$) と表記します。

制限された行列 $\tilde{Q}, \tilde{R}, \tilde{S}, \tilde{T}'$ から作られる近似波動関数

$$\tilde{\Psi}_{abcdef}^0 = \sum_{\xi\zeta\eta=1}^m Q_{ab,\xi} R_{\xi c,\zeta} S_{\zeta d,\eta} T'_{\eta e,f} \quad (5.1)$$

は Ψ^0 の良い近似になります。略記するならば、式 4.3 は $\Psi^0 = QRST'$ 、そして式 5.1 は $\tilde{\Psi}^0 = \tilde{Q}\tilde{R}\tilde{S}\tilde{T}'$ と表わせるでしょう。(図 7)

注意点: (1) ξ, ζ, η の自由度は m 以下に制限されているのですが、そもそも ξ 等の自由度は 4 という非常に小さい数ですから、 $m > 4$ の場合は ξ には何ら制限が掛かりません。そういう意味において、 ξ の自由度は「高々 m に制限されている」と表現したのです。(2) 式中で $\tilde{Q}, \tilde{R}, \tilde{S}$ は、それぞれ列ベクトルに直交性がある行列ですが T' は例外で直交性を持ちません。また $\tilde{Q}$ の行列要素は Q の行列要素の一部ですから、 $\tilde{Q}$ の行列要素は $\tilde{Q}_{ab,\xi}$ ではなくて $Q_{ab,\xi}$ と書きあらわしました。(ミスプリではありません。)(3) これから図を多用しますので図と式の対応について、まとめておきます。 Q (又は $\tilde{Q}$) や R (又は $\tilde{R}$) のような列ベクトルの直交性を持つ行列は、直角三角形で表わしましょう。また、図中の黒四角マークは全て高々 m 状態の変数に対応するとお考え下さい。二つ以上の多角形 (三角形又は四角形) に共有されている変数 (頂点) — 例えば図 7 上の黒四角 — については、対応する式 — ここでは式 5.1 — の中で和を取ります。図形上での Einstein Rule と解釈すれば良いでしょうか?

式 5.1 の $\tilde{\Psi}^0$ を用いると、様々な物理量の期待値を、小規模な数値計算で求められます。例えば $\tilde{\Psi}^0$ のノルムを計算するには、図 7 下側右に示される様に $\tilde{\Psi}^0$ を上下から張り合わせれば良いのですが、これをいきなり計算せずに、まず $\tilde{Q}$ 同士の積

$$V_{\xi\xi'} = \sum_{ab} Q_{ab,\xi} Q_{ab,\xi'} \quad (5.2)$$

より高々 m^2 次元のベクトル V を求め、それに

$$W_{\zeta\zeta',\xi\xi'} = \sum_c R_{\xi c,\zeta} R_{\xi' c,\zeta'} \quad (5.3)$$

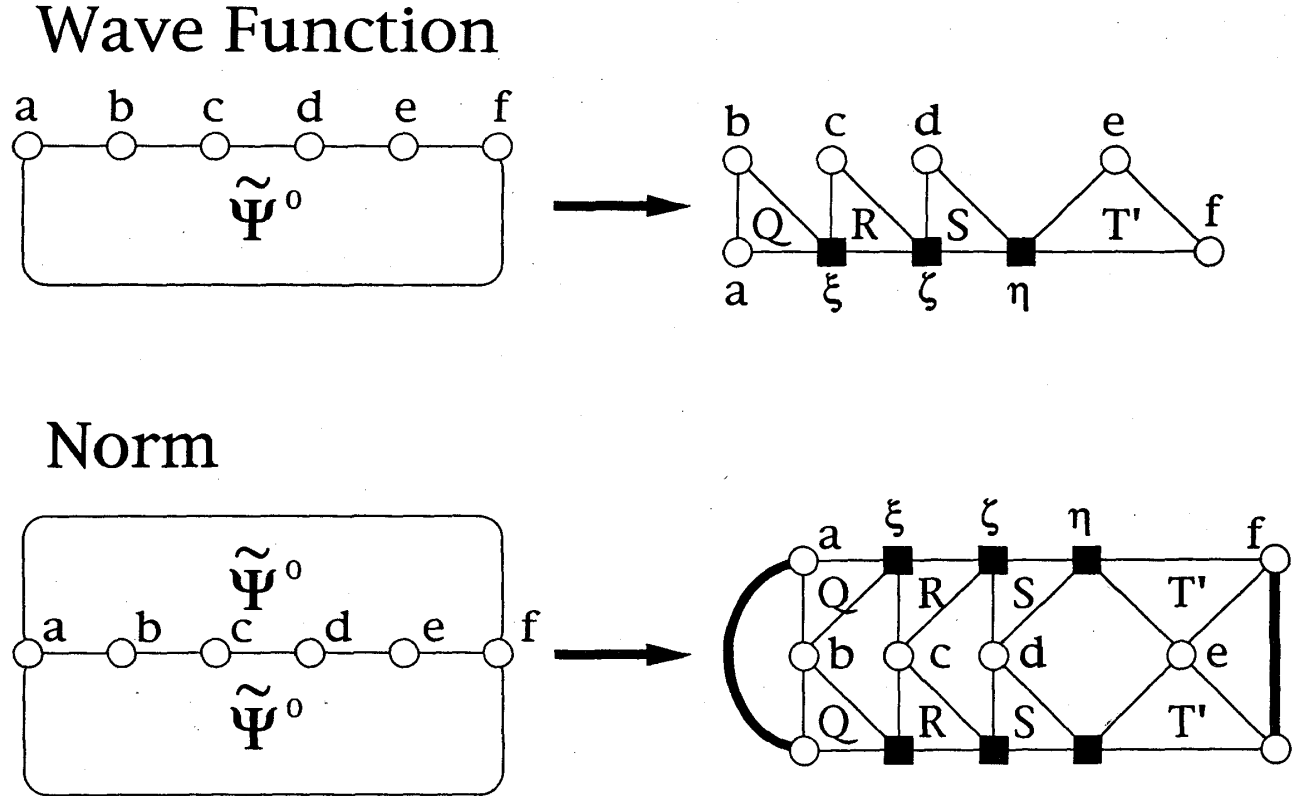


Fig. 7. 変分波動関数の行列積表示: (上) 密度行列繰り込み群は、行列 (= 三角形) の積で与えられる変分波動関数を取り扱う。白丸は 2 状態の $S = 1/2$ スピン変数を表わし、黒四角は高々 m 状態の「ブロックスピン」変数に対応する。(下) 変分波動関数のノルムを、行列積の形で示したもの。太い線で結ばれている白丸同士は、同一のものとする。

で与えられる高々 m^2 次元対称行列を作用させて、更に

$$X_{\eta\eta', \zeta\zeta'} = \sum_d S_{\zeta d, \eta} S_{\zeta' d, \eta'} \quad (5.4)$$

を作用させ、最後に高々 m^2 次元のベクトル

$$Y_{\eta\eta'} = \sum_{ef} T'_{\eta e, f} T'_{\eta' e, f} \quad (5.5)$$

との内積を取る手順を踏みます。こうすると $\tilde{\Psi}^0$ の内積計算の計算過程において m^2 次元以上の行列が登場しません。実は、もっともっと小規模な計算で内積を求めることができます。 $\tilde{Q}$ が直交性を持っていた事を思い出して下さい。すると、式 5.2 の左辺は $V_{\xi\xi'} = \delta_{\xi\xi'}$ となります。従って、式 5.3 の W を V に作用させたもの WV も、再び対角 ($= \delta_{\zeta\zeta'}$) になります。以下同様で、結局の所は式 5.5 の $Y_{\eta\eta'}$ の縮約 $\sum_{\eta} Y_{\eta\eta}$ のみ計算すれば、 $\tilde{\Psi}^0$ のノルムを

求められます。この簡便さも、波動関数を直交行列の積に書き直す理由の一つです。²⁴⁾ (サイズ N が大きな系では、 W や X のような m^2 次元行列は、系の Static な相関の情報を持っていることが知られています。)

さて、 Ψ^0 を式 5.1 の様に自由度が制限された行列の積で書き表すのは、妥当なのでしょううか? 答えは、「基底エネルギーに関する限り、自由度の制限 m を持ち込んでも大丈夫」です。その理由ですが、大ざっぱに言って、 ξ や ζ などの変数を m 状態に制限した時の「ゼロ温度の近似分配関数」

$$\langle \tilde{\Psi}^0 | \rho(\beta=0) | \tilde{\Psi}^0 \rangle = \sum_{abcdefa'b'c'd'e'f'} \tilde{\Psi}_{abcdef}^0 \rho_{abcdef,a'b'c'd'e'f'} \tilde{\Psi}_{a'b'c'd'e'f'}^0 \quad (5.6)$$

の誤差は、 $\rho_{ab,\xi}^L$ (式 2.5) や $\rho_{\xi c,d}^L$ (式 2.6) の「小さな、ゴミの様な固有値」を捨てた時の誤差 (式 3.3) のオーダーだからです。(Ψ^0 は規格化されていると仮定しました。) 分配関数を取り上げましたが、どうせゼロ温度なので $\tilde{\Psi}_{abcdef}^0$ のエネルギー期待値

$$\langle \tilde{\Psi}^0 | H | \tilde{\Psi}^0 \rangle = \sum_{abcdefa'b'c'd'e'f'} \tilde{\Psi}_{abcdef}^0 H_{abcdef,a'b'c'd'e'f'} \tilde{\Psi}_{a'b'c'd'e'f'}^0 \quad (5.7)$$

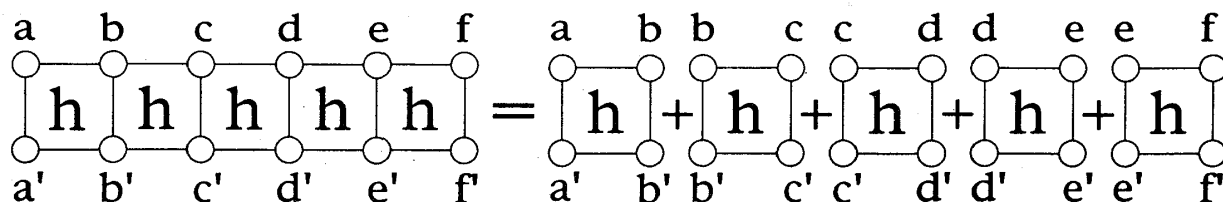
の近似精度についても同様の事が言えます。(精密な事を言い始めると厄介な問題が山積してきますので、とりあえずこの程度の説明にとどめておきます。) なお、基底エネルギーの近似は、これで OK なのですが、相関関数になると話は別で — 相関関数には励起が絡んできますので — より注意深く取り扱う必要があります。

§6. 密度行列繰り込み群のアルゴリズム

以上が DMRG の説明の「下準備」です。(長い道のりでした。) これまでに述べた手順で行列積型の $\tilde{\Psi}^0$ を得るには、最初から厳密な密度行列 $\rho_{abcdef,a'b'c'd'e'f'}$ (式 2.3) を天下りの的に知っている必要がありました。しかし ρ が与えられているくらいなら苦労しないのです — それは問題が既に解かれている事を意味するのですから。そこで、DMRG では発想を転換します。「始めにいい加減な — いや適当な任意の — 行列を $\tilde{Q}, \tilde{R}, \tilde{S}, \tilde{T}'$ (式 5.1 参照) として選んでおいて、後からそれぞれの行列を少しずつ改良する事によって $\tilde{\Psi}^0 = \tilde{Q}\tilde{R}\tilde{S}\tilde{T}'$ (式 5.1) の近似精度を上げて行こう」これが DMRG の主要なアイデアです。ではこれから DMRG の計算手順を追って行きましょう。

まず最初に適当な直交行列 $\tilde{Q}, \tilde{R}, \tilde{S}$ と、同じく適当な (非直交) 行列 $\tilde{T}'$ が与えられているとしましょう。これらの行列は、式 5.1 を通じて $\tilde{\Psi}^0$ の初期値を与えます。もちろん、この段階で $\tilde{\Psi}^0$ は真の基底波動関数 Ψ^0 とはかけ離れたものです。初期値として入れる行列は (ゼロ行列みたいに数値的不安定性をまねかない限りにおいて) 本当に何でも良く、例えば単位行列でも結構です。これらの初期行列により与えられる $\tilde{\Psi}^0$ は、どのようなエネルギー期待値を持つのでしょうか? これから、系のハミルトニアン (式 2.1) を 図 8 上 のように図示することに

Hamiltonian



Variational Energy

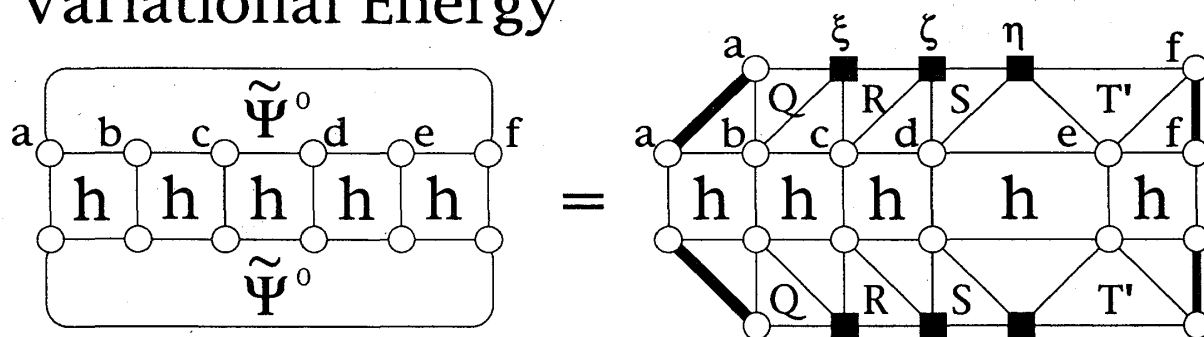


Fig. 8. $\tilde{\Psi}^0$ による変分エネルギーの計算: 変分波動関数 $\tilde{\Psi}^0$ が行列の積で書かれていることを利用すると、エネルギー期待値 $\langle E \rangle$ (式 6.1) を小規模計算で求められる。

しましょう。すると、 $\tilde{\Psi}^0$ による変分エネルギー

$$\langle E \rangle = \langle \tilde{\Psi}^0 | H | \tilde{\Psi}^0 \rangle / \langle \tilde{\Psi}^0 | \tilde{\Psi}^0 \rangle \quad (6.1)$$

の分子は、図 8 の様に図形表示されます。分母が式 5.2 ~ 式 5.5 の計算手順に従って小規模な数値計算で求められたのと同様に、分子も素早く計算することができます。(皆さん、自分でその方法を考えてみて下さい。) つまり $\tilde{\Psi}^0$ による変分エネルギーは、たちどころに計算できるのです。 $\langle E \rangle$ ができるべく小さくなる様に $\tilde{Q}, \tilde{R}, \tilde{S}, \tilde{T}'$ をそれぞれ最適化すれば、自動的により良い基底波動関数 $\tilde{\Psi}^0$ が得られる事は、もう明らかです。くどいようですが

式 6.1 で与えられる変分エネルギーを最小にすることが (ゼロ温度量子系に対する) DMRG の最終目標です。

(ここから先の部分については、White の論文に詳しく計算手順が述べられていますので、数式の細かい部分については幾分省略します。また、【手前味噌その三】で悪いのですが、某所²⁵⁾にもう少

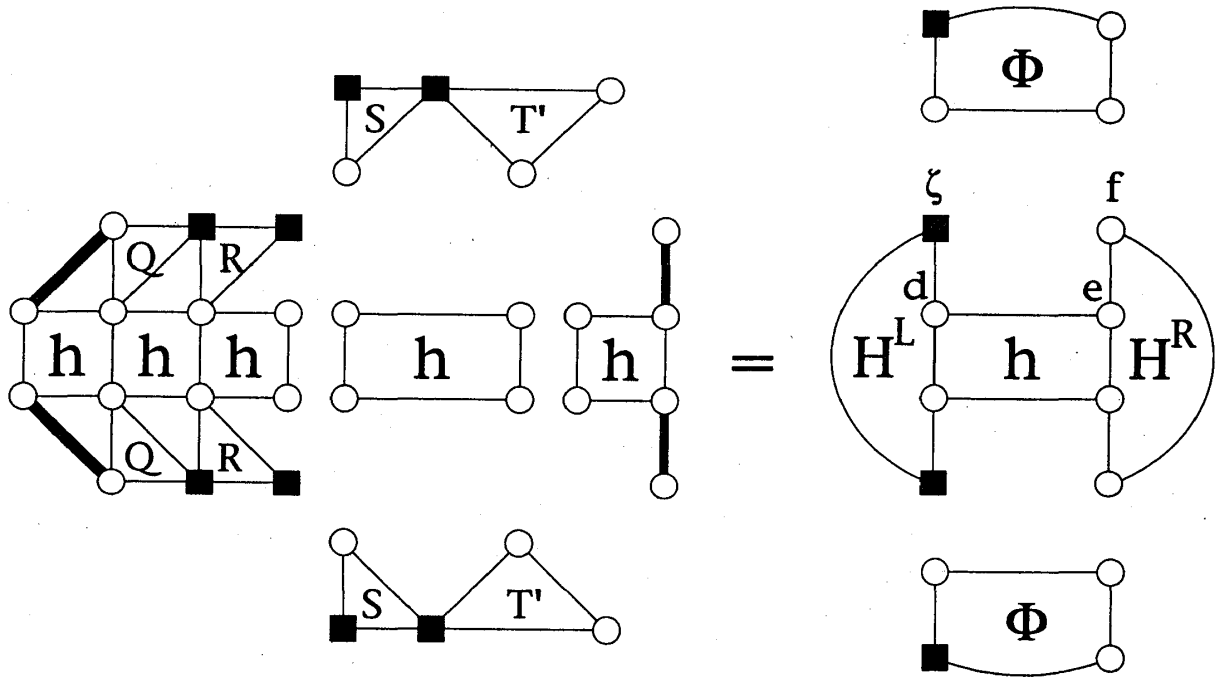


Fig. 9. エネルギー期待値 $\langle E \rangle$ の再分割: エネルギー期待値の図形表示 (図 8) から、行列 $\tilde{S}\tilde{T}'$ の組を抜き取り、残った部分を有効ハミルトニアン H^{eff} とみなす。

しだけ詳しい計算手順を掲載しましたので、そちらもあわせてお読み下さい。)

$\tilde{\Psi}^0$ を形成する各々の行列は、左右どちらかの端から改良して行きます。手始めに $\tilde{S}\tilde{T}'$ のセット

$$\Phi_{\zeta def} = \sum_{\eta=1}^m S_{\zeta d, \eta} T'_{\eta e, f} \quad (6.2)$$

を改良することにしましょう。行列 $\tilde{S}$ と $\tilde{T}'$ を少しずつ変化させて、 $\langle E \rangle$ (式 6.1) が最小になる停留点を求めても良いのですが、それでは計算時間がかかりすぎますので、DMRG ではもっと効率の良い方法を用います。図 9 をごらん下さい。エネルギー期待値 $\langle E \rangle$ の図形表示 (図 8) から、行列 $\tilde{S}\tilde{T}'$ に対応する三角形の 2 枚組を取り去ると、残った部分は高々 $8m$ 次元の行列になります。(図 9 右) 何故ならば、図 9 左において、和を取られずに残っている変数は、2 つ以上の図形に乗っていない白丸か黒四角のみだからです。(この図の書き方は、少し曖昧かもしれませんが...) 取り去った部分 ($= \tilde{S}\tilde{T}'$) を有効波動関数 Φ 、残った部分を有効ハミルトニアン H^{eff} と考える事が出来ます。 $\langle E \rangle = \langle \Phi | H^{eff} | \Phi \rangle / \langle \Phi | \Phi \rangle$ を最小にするような $\tilde{S}$ と $\tilde{T}'$ の積 Φ (式 6.2) とは、要するに H^{eff} の基底固有ベクトル Φ^0 のことです。ですから、 H^{eff} を対角化して基底固有ベクトル Φ^0 を求め、それを図 10 の手続き —

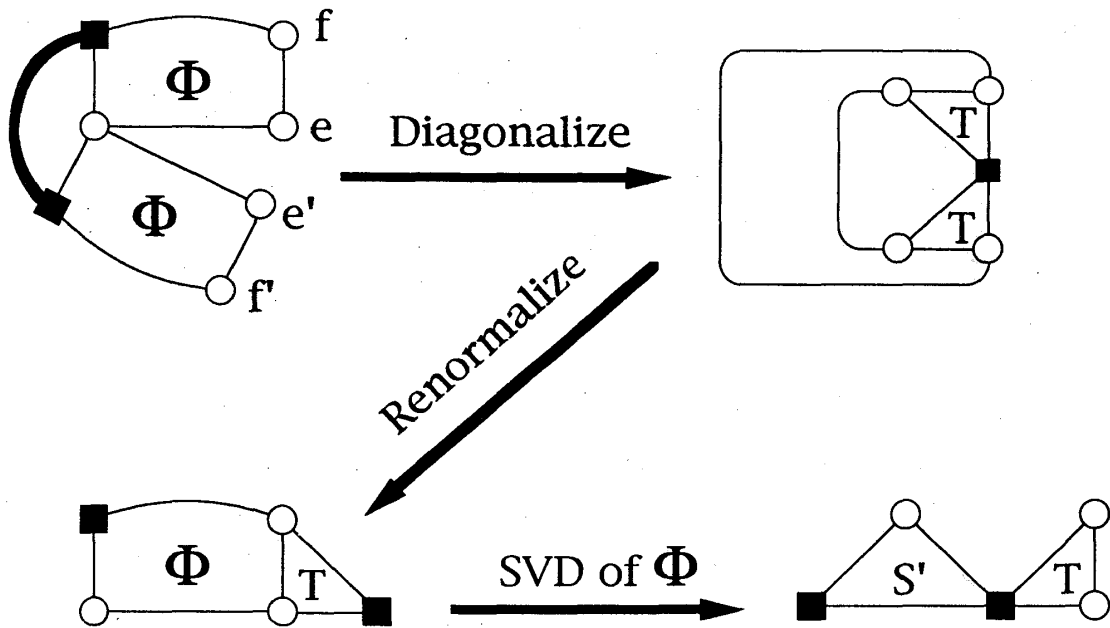


Fig. 10. 有効波動関数の特異値分解: H^{eff} を Lanczos 対角化して有効波動関数 Φ^0 を得たら、それを特異値分解する事によって直交行列 $\tilde{T}$ と、それ以外の「おつり」の部分 $\tilde{S}'$ に分解する。

Φ^0 の特異値分解 — によって再び行列の積に分解すれば、行列 $\tilde{S}$ と $\tilde{T}'$ を改良するという最初の目的が達成されます。(特異値分解は、少し詳しい線形代数の教科書に必ず説明されています。)²⁶⁾

Φ^0 を分解するときに、少し工夫して ($\tilde{S}'$ と名付ける) 直交性の無い行列と ($\tilde{T}$ と名付ける) 直交性のある行列を得るのが、うまい方法です。こうしておけば、エネルギー期待値の図形表示が図 8 から 図 11 のよう変化して、先程と同じ手続きを用いて今度は $\tilde{R}\tilde{S}'$ の組

$$\Phi_{\xi c d \eta} = \sum_{\zeta=1}^m R_{\xi c, \zeta} S'_{\zeta d, \eta} \quad (6.3)$$

を最適化することができます; 今度も、式 6.3 により与えられる試行波動関数を、有効ハミルトニアン H^{eff} に対するランチョス法により改良すれば良いのです。この様に、右端から左端まで行列を改良して行き、今度は逆に左端から右端へ向かって行列を改良して行く、この往復を何度か繰り返して、行列要素が収束したら計算の終わりです。これが DMRG の計算過程です。

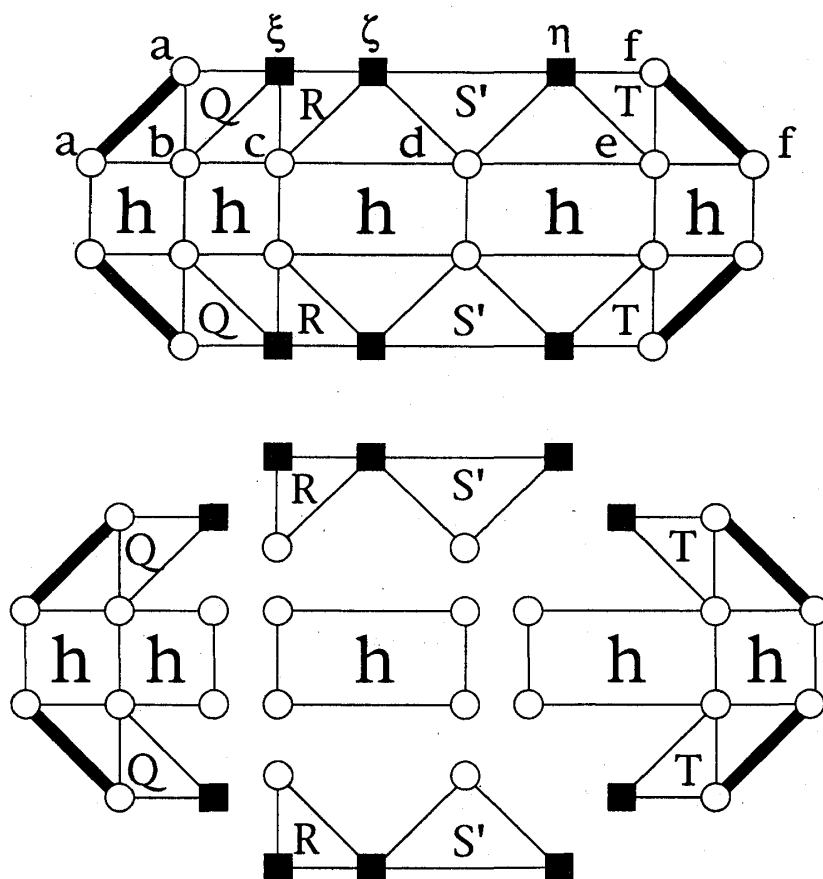


Fig. 11. 波動関数の改良 (その 2): エネルギー期待値の図形表示 (図 8) から、行列 $\tilde{R}\tilde{S}'$ の組を抜き取り、残った部分を有効ハミルトニアン H^{eff} とみなす。

§7. まとめと禪問答

この解説では DMRG がどう密度行列に関係しているのか、その概念的な所を中心に説明して、DMRG が行列積で書かれる近似波動関数を逐次改良するようにデザインされた数値変分法であるという事実までたどり着きました。ここから先は、数値計算の世界になります。細かい数値計算のテクニックは、非常に多岐に及ぶのですが、全てを紙上で説明するには無理がありますので、今回は数値計算のテクニックについては、全く述べませんでした。また機会があれば、具体的な模型 — 例えばイジング模型²⁷⁾など — について DMRG の応用例を公表して行きたいと思います。(またのお呼びがあれば、の、話ですが....)

以下は余談というか、禪問答的な幾つかの疑問です。(暇なら読んで下さい。) これまでの説明では、教科書的にまずハミルトニアンが与えられていると仮定して、それから密度行列 ρ と分配関数 Z を導き出しました。これは「始めにハミルトニアンがある」という“信仰”に基づいた議論です。世の中には、全く逆の考え方もあって、例えばランダウ教程の冒頭のように「はじめに作用というもの

がある」という所からでも出発できます。まず分配関数 Z が与えられていて、それが何らかの意味で一つのパラメータ τ の汎関数であると仮定して周期 β の虚時刻 τ とラグランジアンを“発見”し、そして Z の中に何らかの空間構造も埋め込まれていると信じて「時空上の伝播関数としての密度行列」を導出する道のりです。(時間とは何か、空間とは何か、代数的に導けるならば誰も苦労しない。)なぜこのような注釈をしておいたかという、形而上の理由とはともかく、もっと形而下の理由もあって、イジング模型に代表される古典系や、(可微分)多様体上の統計力学 — 主に重力理論 — では先に作用から与えられていて、ハミルトニアンが“あらわ”に現れなかったり、そもそも定義不可能な場合が多いからです。密度行列の定義可能な系ならば、ハミルトニアンが定義不可能でも「密度行列繰り込み群の概念」を応用する事ができます。要は、密度行列が定義されているかどうかの問題なのです。

密度行列が定義されているとしても、もう一つ「危ない橋」を渡らなければなりません。我々はハイゼンベルグ模型という「ホトケの様な有難い模型」を扱うことによって、危うい点を幾つも回避しているのです。それは、(a) 密度行列 ρ^L は実対称か? (b) 密度行列 ρ^L は対角化可能か? (c) 密度行列に負の固有値は無い? — といった問題です。ケース (a) は、有限温度量子系を量子転送行列法により取り扱い、空間方向への転送行列を DMRG で取り扱おうとした時に直面します。ケース (b) は密度行列が「べきゼロ」の部分空間を持つ場合です。(a) と (b) は似た様な問題ですが、「密度行列繰り込み群」に関する限り、密度行列が対角化可能である必要はありません。要は「密度行列の主要なスペクトルを拾う」ことです。対角ではない m 次元行列の中に密度行列 ρ^L の情報を詰め込んでしまえば良いのです。これは可能な手続きです。(実際、情報理論において 2 次元画像圧縮のアルゴリズムとして、この様な手続きが実用化されています。)もちろん、どうしようもない「全てのスペクトルがほぼ同じ重率を持つ」模型もあるのですが、この場合は模型自体が「ほぼ無相関な状態」なので、物理的には全く無意味です。(こういうクラスの模型を「不可解模型」と呼ぶ。解こうとするだけ、不毛なのである。)最後の (c) の問題は、もう少し微妙です。まあ言うておこなう「統計物理学に出てくる諸模型は通常『負計量』又は『ゴースト』と呼ばれる負の固有値を持たない」という(一応の)慣例があります。(まあ、信じましょう。)ランダム系では、この限りではないのですが、ランダム系自身が未解決の問題ですから、敢えて深入りしない事にします。そもそも、DMRG でさえ「計算出来れば Happy」という「勝てば官軍」式の計算処方だったのですから。

ついでに「朝永の危ない橋」について。1 次元量子系を 2 次元古典系とみなして、その「切り口」に現われる自由度を観察して密度“副”行列 ρ^L を定義したのですが、その時の「切り口」は直線的でした。なにも切り口が直線である必要はサラサラなく、もしお好みとあらば、「ジグザクに」切っていただいても結構です — 大昔に流行した「多時間理論」の様に。(現在では、経路積分表示で「多時間理論」も包含した形式で学習するのが一般的です。)但し、ローレンツ不変性のある模型では、もう少し条件を厳しくして「超多時間的に」切る方が無難です。色々工夫できるのですが、結局のところ「切り口がジグザクしていない方が数値計算に都合が良い」という理由で、まっすぐな切り口のみについて解説しました — 数値計算においても、不毛な計算を回避して、計算効率を高める事が重要なのです。また、2 次元古典系を上下二つの部分に切り離して密度行列を定義しましたが、三つの部分に分けても、四つの部分に分けても結構です。実際、Baxter は四つの部分に平面を分割して、(30 年も前に) DMRG とほぼ同じ考えに到達しました。

更にもうひと言。なぜ高次元系に対する DMRG が無いのか? いや、有るといえば有ります。Xiang は運動量空間での DMRG にトライしました。²⁸⁾これは、近藤問題の運動量空間での解法に通じるものがあるのですが、ひとたび運動量空間で物理系を表わしてしまえば、何次元でも同じ事です。いま一つ、書き記しておくべきなのは、高次元版の行列積波動関数です。²⁹⁾これらは、まだ「勝手に与えられたハミルトニアンに対する変分法」にはなっていないのですが、DMRG の考え方の拡張そのものですので、そのうち DMRG の枠組みで数値表現される事でしょう。

そろそろ沈没...(執筆デスクの上に、空のワインボトルが一つ。)

謝辞

思い起こせば n 年前、ポーランドで開催された ICM '94 期間中のこと。(西野の感想) 昼食の後、ワルシャワ市内の公園で (美しい噴水を見つつ) 利根川教授 (神戸大) と雑談をしているうちに、「DMRG やりましょか?」という話が持ち上がったのが、全ての始まりです。その後、実際に数値計算を始めるにあたって色々と DMRG の応用分野についての議論を下さった 柴田氏 (東京理科大/物性研)・上田教授 (物性研) に大変感謝いたします。古典系への応用について、e-mail で頻繁に交信して下さいました 日永田・菊地・阿久津 (阪大) の皆様方とは現在も (緩やかな) 共同研究を行っています。大塚氏 (都立大) には、思いもよらないフラクタル系への DMRG の応用法⁸⁾を聞かせてもらい、大変楽しませていただきました。DMRG の原理原則については Sierra 氏 (CSIC) と深い議論をしました。大規模な数値計算は、その殆どを大阪大学大型計算機センターの SX-3/14R と、設備更新後の SX-4 で行いました。日々計算機の管理をして下さいまして、誠にありがとうございます。また、本稿の執筆を勧めていただきました加藤氏 (東大物工) に厚くお礼申し上げます。

-
- 1) S. R. White: Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2863; Phys. Rev. **B 48** (1993) 10345 / White らの論文を簡素にまとめた和文の文献として、成島 毅: 修士論文 (筑波大学) もお勧めします。
 - 2) 「人々は非常にゆっくりと (DMRG に) 飛びついた」との、White 氏の感想。(私達も指をくわえて見ていました。)
 - 3) 広く網羅された Review として、インターネット経由で入手可能な G. A. Gehring, R. J. Bursill and T. Xiang: cond-mat/9608127 を挙げておきます。
 - 4) Y. Kato and A. Tanaka: J. Phys. Soc. Jpn. **63** (1994) 1277. ← 恐らく日本で初めての応用事例。
 - 5) K. Hida: J. Phys. Soc. **65** (1996) 895 / J. Phys. Soc. **64** (1995) 4896.
 - 6) H. Otsuka: preprint.
 - 7) N. Shibata, T. Nishino, K. Ueda and C. Ishii: Phys. Rev. **B53** (1996) R8828 / N. Shibata, T. Nishino, K. Ueda and C. Ishii: Phys. Rev. **B54** (1996) 13495 / N. Shibata, A. Tsvelik and K. Ueda: preprint.
 - 8) H. Otsuka: Phys. Rev. **B53** (1996) 14004. ← 図もデータも美しい論文なので必見。
 - 9) Y. Hieida, K. Okunishi and Y. Akutsu: Preprint.
 - 10) T. Nishino: J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995) 3598 / Y. Honda and T. Horiguchi, cond-mat/9704002
 - 11) R. J. Bursill, T. Xiang, G. A. Gehring: J. Phys. Condensed Matter (1996) L583-L590; この論文における非対称密度行列の取扱いには、やや不十分な所があって、DMRG が変分法になっていません。
 - 12) S. R. White and I. Affleck: Phys. Rev. **B54** (1996) 9862 / Infinite DMRG Method の加速法については、T. Nishino and K. Okunishi: J. Phys. Soc. **64** (1995) 4084 を参照して下さい。
 - 13) S. R. White: Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 3633, cond-mat/9604129 / S. R. White and D. J. Scalapino, condmat-9608138.
 - 14) R. J. Baxter: J. Math. Phys. **9** (1968) 650 / J. Stat. Phys. **19** (1978) 461 / *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, London, 1982) p.363.

- 15) 奥西巧一: 修士論文 (1996 大阪大学)
- 16) T. Nishino and K. Okunishi: J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 891-894 / T. Nishino, K. Okunishi and M. Kikuchi: Phys. Lett. **A213** (1996) 69-72 / 入江崇: 修士論文 (1997 東北大学)
- 17) 画像圧縮については、鎗木誠氏 (神戸大)、量子圧縮については G. Sierra 氏 (CISI Madrid) から伺いました。
- 18) MPEG, CD 11172: *Coding of Moving Pictures and Associated Audio for Digital Storage Media at Up To About 1.5 Mbps*, (1991) / CCITT Rec. H.261, *Video Codec for Audiovisual Services at p*64 kbit/s*, CCITT COM XV-R 37-E (1990). ← 少し古い文献ですみません。
- 19) 著者達は、「DMRG の全て!」を3部くらいに分けて和文解説する予定にしています。この解説記事が「原理編」、文献 25 は「計算手順編」、そして最後の「数値計算編」はまだ影も形もありません。(すみません....)
- 20) L. P. Kadanoff: Physics 2 (1965) 263 / K. G. Wilson and J. Kogut: Phys. Rep. **12 C** (1974) 75 / T. W. Burkhardt and J. M. J. van Leeuwen: *Real-Space Renormalization*, Topics in Current Physics vol.30, (Springer, Berlin, 1982) と、その中で取り上げられている文献。
- 21) S. R. White, J. W. Wilkins and K. G. Wilson: Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 412 / S. R. White in *Computational Approaches in Condensed Matter Physics* (Springer, Berlin, 1992) p.97.
- 22) I. Affleck, T. Kennedy, E. Lieb, H. Tasaki: Phys. Rev. Lett. **59** (1987) 799; Commun. Math. Phys. **115** (1988) 477.
- 23) A. Klümper, A. Schadschneider and J. Zittartz: Z. Phys. **B87** (1992) 281; Europhys. Lett. **24** (1993) 293 / A. Schadschneider and J. Zittartz: Ann. Physik **4** (1995) 157 / H. Niggemann and J. Zittartz: Z. Phys. **B 101-2** (1996) 289.
- 24) S. Östlund and S. Rommer: Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 3537.
- 25) 西野友年、柴田尚和: 「密度行列繰り込み群の方法」固体物理 Vol.32, No. 1 (1997).
- 26) 特異値分解について、様々な文献がありますが、インターネット経由で Numerical-Recipies <http://cfata2.harvard.edu/numerical-recipes/> などから検索を始めることを御勧めします。
- 27) イジングについての興味深い文献が cond-mat/9605174 にあります。
- 28) T. Xiang: Phys. Rev. **53** (1996) R10445, cond-mat/9603020.
- 29) H. Niggemann, A. Klümper and J. Zittartz: cond-mat/9702178