

Snapshot Observation for 2D Classical Lattice Models by Corner Transfer Matrix RG

神戸大学理学部 西野友年、上田幸治、大谷両太、西尾幸暢、A. ゲンディア
T. Nishino, K. Ueda, R. Otani, Y. Nishio, and A. Gendiar
Faculty of Science, Kobe University

カダノフに源流を発する(らしい)実空間繰り込み群は、その名の通り実空間で近隣にあるスピンを組にして、いわゆる**ブロックスピン**へと写像し、その際に重要な自由度のみを残し、ゴミのような(～臨界現象には関係のない)自由度を捨て去る解析手法として知られている。定性的に繰り込み群を理解するには**実に(?)**都合の良い手法である実空間繰り込み群は、数多くの**繰り込み群の解説文**の冒頭に登場する。が、それっきりの場合が多い。何故ならば、定量的に精密な計算には向いていないからだ。

実空間繰り込み群は使い物にならないという迷信を、ある意味で払拭したのが White による**密度行列繰り込み群** (Density Matrix Renormalization Group, DMRG) である。¹⁾ 1次元量子系を数値的に取り扱う手法として 1992 年に導入された DMRG は、従来からの実空間繰り込み群とは一風変わって、対象とする系(～一次元鎖)を左右 2 つの部分に分割して、それらの部分(ブロック)に含まれるスピンを、ひとつの m 状態ブロックスピンへと写像する。この写像は、左右のブロックが持つ相関 — 最近では**量子相互エントロピー**と表現する人も居る — を損なわないよう実行される。その際に用いる線形変換は、左右のブロックに対する密度行列を作成し、それを対角化することによって生成する。こういう事情があるので、DMRG によって保持されている重要な自由度は**系の継ぎ目での外部からの擾乱に対する応答**(と基底エネルギーへの寄与)であって、従前の実空間繰り込み群とは多少毛色が違うといえは違う。特に特徴的な点が、左右に分割した**継ぎ目**の部分に、元々モデルが持っていたスピン変数(やその他の力学変数)が生のまま残っていることで、これが以下の議論で重要なポイントとなる。

さて、この解説では 1次元量子系ではなくて、2次元古典系を取り扱う。1次元量子系と 2次元古典系は似たようなものなので — と書くと量子臨界現象屋さんに怒られそうだけれど — DMRG はイジング模型など 2次元古典系にも適用できるからだ。³⁾ もっともコレだけでは、右の物を左に移しただけで何も面白くない。古典系の場合は、系を左右に分割できるのみならず、上下にも分割可能なので、与えられた 2次元系を 4 枚の部分に分けて取り扱える特徴がある。これを DMRG に持ち込んだものが**角転送行列繰り込み群** (CTMRG) と呼ばれる実空間繰り込み群手法で、CTMRG を用いると 2次元古典系のエネルギーや磁化などの 1 点関数を、軽い計算で精度良く求めることが可能になる。⁴⁾

古典系の解析では、時として**ある瞬間のスピン配列を目で見る**ことが理解の助けになることがある。例えば、図 1 に示してあるような、イジング模型のスピン配列が一例である。図の左側は、転移温度 T_c 以下の熱平衡状態でスピンがほぼ同一方向に揃っていることを示し、右側の図は T_c よりも

少し高い温度でフラクタル状の模様を描く熱平衡状態の有様を示している。百聞は一見にしかず、直感的な定性的理解を助ける図の作成は研究に有効であるばかりでなく、広報教育啓蒙活動、ついでに予算申請書作成のポンチ絵作りにも重宝する。このような、カノニカルアンサンブルから1枚だけ抜き出して来たスピン配列を **スナップショット** と呼ぼう。図1を見ると、誰でも「ああ、モンテカルロ・シミュレーションのある瞬間か」と想像するだろう。実は、ここに示したスナップショットは CTMRG (または DMRG) を用いて作図したものだ。本稿では、その方法の概略を説明する。

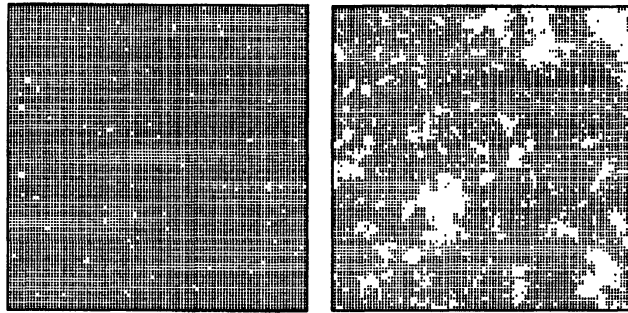


Fig. 1. 温度が $T = 1.5 < T_c$ (左) および $2.27 > T_c$ (右) である際の、イジング模型の熱平衡状態におけるスピン配列。表示領域の大きさは 100×100 で、システムサイズは無量大。

ここまで (雑文を辛抱強く) 読んで **それは話が違くないか!?** と思った人はスルドイ。そう、これから説明するのは **繰り込みの逆操作** にあたっている。DMRG で得られたブロックスピン変数を使って、そこからブロックスピン変換を **巻き戻す** ような感覚で、もともとモデルを構成していた最下層のスピン変数について、そのスナップショットを計算してみようというのが、以下で述べる **悪あがきの魂胆** である。(http://xxx.lanl.gov/abs/cond-mat/0409445 の補足説明も含んでいる。)

§1. 1次元イジング模型で頭の体操

スナップショットとは何なのか、もう少し正確に述べる目的で、まずは1次元古典系の代表例、1次元イジング模型の熱平衡状態を考えよう。 N サイトの自由端境界条件を持つ1次元イジング模型は、ハミルトニアン

$$H(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) = H(\{\sigma\}) = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (1)$$

で定義される。(外部磁場は無いと仮定した。) $\{\sigma\}$ は、全てのスピン $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$ を短く略記する記号だ。この系の分配関数は、系全体に対するボルツマン重率の和

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\beta H(\{\sigma\})) \quad (2)$$

で与えられる。1次元系の特殊性(?) によって、この和は端から簡単に実行できるけれども、後で2次元系を扱う都合も考えて、転送行列 $T(\sigma', \sigma) = \exp(\beta J \sigma' \sigma)$ と自由端の境界条件を表すベクトル

$\langle \phi | = (1, 1)$ を Z の計算のために導入しよう。そうすれば、 Z は次のようにも表せる。

$$Z = \langle \phi | T^{N-1} | \phi \rangle = \langle \phi | TTT \cdots TTT | \phi \rangle \quad (3)$$

さて、系が熱平衡状態にある際に j 番目にあるスピン σ_j を観測すると、特定の値 $\bar{\sigma}_j$ ($= +1$ 又は -1) であったとしよう。こういう観測が実現される確率は、次のように表される。

$$p(\sigma_j = \bar{\sigma}_j) = \frac{1}{Z} \langle \phi | T \cdots T \delta(\sigma_j, \bar{\sigma}_j) T \cdots T | \phi \rangle \quad (4)$$

もちろん $\delta(\sigma_j, \bar{\sigma}_j)$ は左から j 番目の転送行列の手前に挿入する。いまの場合、式 (1) にある通り外部磁場がゼロかつ自由端なので $p = 1/2$ であることは明らかだ。固定端の場合は p が境界からの距離に依存するようになる。境界条件がどうあれ、 j 番目のサイトが系の両端 $i = 1$ または $i = N$ より十分に — 相関距離の何倍か以上 — 離れていれば、 $p(\sigma_j = \bar{\sigma}_j)$ は転送行列 T の最大固有値に対応する固有ベクトル $|V\rangle$ を用いて、次のように表すことができる。

$$p(\sigma = \bar{\sigma}) = \langle V | \delta(\sigma, \bar{\sigma}) | V \rangle \quad (5)$$

さて、 j 番目のスピンの $\bar{\sigma}_j$ であると **観測された後に** その隣のスピン σ_{j+1} を観測して、特定の値 $\bar{\sigma}_{j+1}$ である確率 — **条件付き確率** $p(\bar{\sigma}_j, \sigma_{j+1} = \bar{\sigma}_{j+1})$ — はどのように計算されるだろうか？ 形式的には

$$p(\bar{\sigma}_j, \sigma_{j+1} = \bar{\sigma}_{j+1}) = \frac{\langle \phi | T \cdots T \delta(\sigma_j, \bar{\sigma}_j) T \delta(\sigma_{j+1}, \bar{\sigma}_{j+1}) T \cdots T | \phi \rangle}{\langle \phi | T \cdots T \delta(\sigma_j, \bar{\sigma}_j) T \cdots T | \phi \rangle} \quad (6)$$

と書ける。 j 番目のサイトが系の両端から十分に離れていて、例えば $\bar{\sigma}_j = 1$ であれば、式 (5) と同様にもう少し簡単な形

$$\frac{(1, 0) T \delta(\sigma_{j+1}, \bar{\sigma}_{j+1}) | V \rangle}{(1, 0) T | V \rangle} \quad (7)$$

へと変形することができる。こういう具合にして、 $j+2$ 番目、 $j+3$ 番目... と考え進めると、条件付き確率を次々と **式 (7) と同じ形に** 書き下せるので、転送行列の最大固有値に対応する固有ベクトルさえ求めておけば、 j 番目 — これは系のどこでも良い — から任意の個数のスピンについて、乱数サイコロを振りながらスナップショットを得ることができる。

サイコロを振りながら — その方法は次節で説明 — とは言っても、いわゆる熱平衡状態のモンテカルロ・シミュレーションではない点には注意しよう。既に、熱平衡状態を表すベクトル $|V\rangle$ が手中にあり、それが生成するスピン配列のスナップショットなので、こうやって作られた配列はカノニカルアンサンブルで分配関数に主要な寄与をする **代表的な状態** の一つになっている。

§2. 本番は 2 次元イジング模型

1 次元系で考えたスナップショット生成法は 2 次元系に拡張できるだろうか？ 2 次元古典系の代表例として、正方格子イジング模型を考えよう。その分配関数は次のように表される。

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp(-\beta H(\{\sigma\})) \quad (8)$$

但し $\{\sigma\}$ は各格子点上で 1 または -1 の値を取るイジングスピン全体の配列を表し、 $H(\{\sigma\})$ はそれらの間の相互作用—いわゆるイジングハミルトニアン—である。全系は十分に大きな正方形のクラスターであり、自由端境界条件が課せられているとしよう。これに対して、転送行列形式を導入して 一歩進んで (?) **角転送行列** (corner transfer matrix, CTM) を導入して、分配関数の計算を行う のだけれど、丁寧に review すると紙面が尽きてしまうので「それは参考文献に書いてある」⁴⁾ ことにして、以下では考え方を中心に概説しよう。

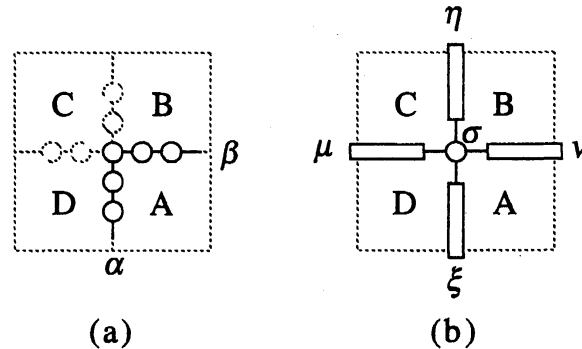


Fig. 2. 角転送行による古典系の取り扱い。(a) 角転送行列 A が行列変数に持つスピン。(b) 「繰り込まれた」角転送行列。

正方形である全系を、中央で十文字に 4 分割することを考えよう。それぞれの切片は (中央で) 直角の角を持っているので、4 枚の切片を **角** (かど、corner) と呼ぶ慣習がある。(日常的にも「角に建ってる家」などという言葉遣いをする。) それぞれを図のように A, B, C, D とラベル付けしよう。分割に従って、全ハミルトニアン $H(\{\sigma\})$ も 4 分割される。

$$H_A(\{\sigma_A\}) + H_B(\{\sigma_B\}) + H_C(\{\sigma_C\}) + H_D(\{\sigma_D\}) \quad (9)$$

ここで $\{\sigma_A\}, \{\sigma_B\}, \{\sigma_C\}, \{\sigma_D\}$ は、それぞれの **角** の内部にあるスピン配列を表す。これらを用いると、あるスピン配列 $\{\sigma\}$ が出現する確率は、カノニカルアンサンブルの全系に対するボルツマン重率で表現できる。

$$\exp(-\beta H(\{\sigma\})) = \exp(-\beta H_A(\{\sigma_A\})) \exp(-\beta H_B(\{\sigma_B\})) \exp(-\beta H_C(\{\sigma_C\})) \exp(-\beta H_D(\{\sigma_D\})) \quad (10)$$

分割した形式の上で、あらためて全系の分配関数 Z を計算してみよう。ボルツマン重率 $\exp(H(\{\sigma\}))$ を全てのスピン配列について足し合わせると Z になるのであった。この和も、それぞれの **角** について独立に実行出来る 二つの **角** が共有する、角の継ぎ目の上にあるスピンを除いて。こういう事情なので、それぞれの **角** に対するボルツマン重率 (上式右辺の各因子) についての部分和を先に求

めてみようか。角の内部 — 表面を除く — に存在するスピンについて部分和をとったもの

$$A(\alpha\sigma\beta) = \sum_{\{\sigma_A\}} \exp(-\beta H_A(\{\sigma_A\})) \quad (11)$$

を角転送行列 (既出, CTM) と呼ぶ。但し、記号 \sum' は、角の内部のスピンについての部分和を表し、 α と β は境界上にあつて和が取られないスピン列を示している。(図 2 参照) また、 σ は系の中央 — 4 枚の角転送行列が会う所 — に位置しているスピンの、これも和を取らずに残してある。

他の角 B, C, D についても同様に、対応する角転送行列を求めることができる。角転送行列は、もともとボルツマン重率の部分和なので、4 枚合わせて — つまり積を取って — 残っているスピンについて和を取ると、原理的には全系の分配関数 Z が求められる。実際上は — 数値計算上は — という、系が大きくなると角転送行列の行列次元が指数関数的に増加して行き、どんな強力なコンピュータを用いても求めきれなくなる。この問題の解決には Baxter および White によって用いられた

● 密度行列 (density matrix, DM) $\rho = ABCD$ の対角化による繰り込み群変換の生成

が有効だ。¹⁻³⁾ ρ の固有値を大きな方から並べ、 ν 番目の固有値に対応する固有ベクトルを U_ν としよう。この U_ν を、系の中央から 1 列に並んだスピン列から一つのブロックスピンへの変換として使う点が重要だ。角転送行列 A を次のように変換してみよう。

$$A(\xi\sigma\nu) = \sum_{\alpha\beta} U_\xi(\alpha) U_\nu(\beta) A(\alpha\sigma\beta) \quad (12)$$

これは直交変換にすぎないので、元々の $A(\alpha\sigma\beta)$ と $A(\xi\sigma\nu)$ は系の熱平衡状態について、同じ情報を共有している。こうして求めた $A(\xi\sigma\nu)$ の行列要素をよく見ると、ブロックスピン変数 ξ や ν の値が小さな所に主要な情報が詰まっていて、大きな所にはゴミのような微少な因子しか残っていないことが検証できる。そういう訳で、ブロックスピン変数 ξ や ν については、それらが m 以下の場合だけを残し、それ以外を捨て去っても、定量的に何ら問題はない。言い換えると、式 (12) は角転送行列 A から A' への情報圧縮とも表現できるだろう。

同様にして、角転送行列 B や C や D についても自由度を落とした $B(\nu\sigma\eta)$ や $C(\eta\sigma\mu)$ や $D(\mu\sigma\xi)$ へと情報圧縮する。(図 2 参照) これらの圧縮操作を終えると、分配関数の近似式に到達する。

$$Z' = \sum_{\sigma \xi \nu \eta \mu} A(\xi\sigma\nu) B(\nu\sigma\eta) C(\eta\sigma\mu) D(\mu\sigma\xi) \quad (13)$$

近似の過程で残す自由度 m が十分に大きければ — 通常は $m = 10$ から $m = 1000$ — Z' は Z のじゅうぶん良い近似になっている。

1 次元イジング模型の場合と同様に、ここで境界条件の影響について考えておこう。圧縮された角転送行列 A', B', C', D' をよく観察すると、系のサイズが相関距離よりも大きければ — 臨界温度 T_c のごく近傍以外ではこれが満たされている — A', B', C', D' のサイズ依存性は全体にかかる係数のみに現れ、行列要素の比は一定に保たれることがわかる。上で導入した圧縮操作 (式 (12)) は、系の

中心にあるスピン σ から相関距離付近までの主要な情報を選択的に取り込み、十分に遠方の情報は分配関数を与える係数として **繰り込んで** しまっているのだ。こういった意味で、圧縮された角転送行列は **無限系を代表している** と考えることもできる。(繰り返し注意するけれども、系が臨界でなければ、という条件付きで。)

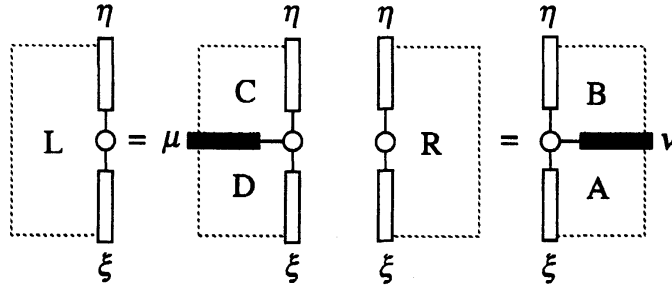


Fig. 3. 列転送行列 T に対する左 (固有) ベクトルの近似 $\langle L|$ 、右 (固有) ベクトルの近似 $|R\rangle$ 。

さて、系の中央にある σ が上向きか下向きかを確率的に決定しよう。後々の計算の都合上、まずは 4 枚の角転送行列を 2 枚ずつかけ合わせて、二つの $2m^2$ 次元ベクトル $\langle L|$ と $|R\rangle$ を作る。(図 3 参照)

$$L(\eta\sigma\xi) = \sum_{\mu} C(\eta\sigma\mu) D(\mu\sigma\xi), \quad R(\xi\sigma\eta) = \sum_{\nu} A(\xi\sigma\nu) B(\nu\sigma\eta) \quad (14)$$

これらは、前節の式 (5), (7) で導入した一次元イジングモデルの $|V\rangle$ (の定数倍) に相当するものである。前節の形式に合わせるように近似的な分配関数を

$$Z' = \langle L|R \rangle \equiv \sum_{\xi\sigma\eta} L(\eta\sigma\xi) R(\xi\sigma\eta) \quad (15)$$

とベクトルの内積の形で表そう。また、中央の σ が特定の値 $\bar{\sigma}$ ($= \pm 1$) を取る確率は式 (4), (5) と同様に次の形で表せる。

$$p(\bar{\sigma}) = \frac{\langle L|\delta(\bar{\sigma}, \sigma)|R\rangle}{\langle L|R\rangle} = \frac{\sum_{\xi\eta} L(\eta\bar{\sigma}\xi) R(\xi\bar{\sigma}\eta)}{\sum_{\xi\sigma\eta} L(\eta\sigma\xi) R(\xi\sigma\eta)} \quad (16)$$

この確率は規格化されている $p(1) + p(-1) = 1$ ので、サイコロを振って $[0, 1)$ 区間で乱数 x を発生させ、 $x < p(1)$ であれば $\bar{\sigma} = 1$ と、それ以外であれば $\bar{\sigma} = -1$ という手順で $\bar{\sigma}$ を決定できる。

§3. 1列のスピン配列を描く

中央のスピン σ 一つだけ、サイコロを振って決定しても何の役にも立たないので、少し拡張して「ある長さ N の直線上に並んだスピン列 $\sigma_1 \sim \sigma_N$ 」について、その配列を確率的に決定しよう。§ 1 の式 (3) の 2 次元への拡張として

$$Z = \langle L|TTT\dots TTTT|R\rangle \quad (17)$$

と転送行列 T を $N-1$ 個だけ挿入すると良いだろう。ここで用いる T は縦長な形をしているので、**列転送行列** (column transfer matrix) と呼ぼう。上下半分に相当する **半列転送行列** (half-column transfer matrix, HCTM) も導入すると後々便利だ。 T の上半分を P 、下半分を S と呼ぼう。(図 4 参照) ついでに、左から i 番目の (半) 列転送行列を

$$T_i = S_i P_i \quad (18)$$

と番号付けしておこう。 S_i や P_i は次のようなスピン変数を持っている。

$$S_i = S(\xi_i \sigma_i \sigma_{i+1} \xi_{i+1}), \quad P_i = P(\eta_{i+1} \sigma_{i+1} \sigma_i \eta_i) \quad (19)$$

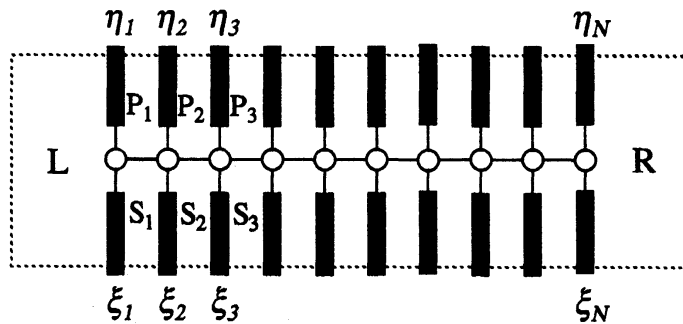


Fig. 4. $\langle L |$ と $|R\rangle$ の間に列転送行列を $N-1$ 個はさむ。

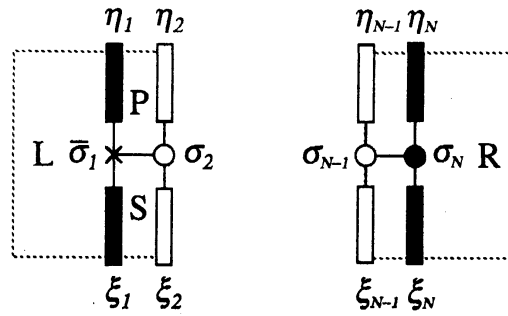
さて、1次元イジング模型で考えたように、スピン $\sigma_1 \sim \sigma_N$ を左側から順に決定して行くために用いる、 i 番目のスピンについての条件付き確率 $p_{\bar{\sigma}_1 \dots \bar{\sigma}_{i-1}}(\bar{\sigma}_i)$ を求めてみよう。これは、 $i-1$ 番目までのスピンが $\bar{\sigma}_1, \dots, \bar{\sigma}_{i-1}$ と固定された後、 i 番目のスピンが上向きか下向きかを与える確率だ。これを求める手法は、DMRG の有限サイズアルゴリズムで採用されている **演算子の繰り込み** と基本的には同じで、以下の通り部分和を再帰的に用いる。

まず、今まで $|R\rangle$ と書き表していた系の右半分を代表するベクトルを $|R_N\rangle$ と添え字付けておこう。何故なら、図 4 の通り σ_N が含まれているからである。この $|R_N\rangle$ に列転送行列 T_i を順番に作用させて行き、次々とベクトルを生成しよう。

$$|R_{N-1}\rangle = T_{N-1} |R_N\rangle, \quad |R_{N-2}\rangle = T_{N-2} |R_{N-1}\rangle, \quad \text{etc.} \quad (20)$$

そして最後に左端まで来ると σ_1 に接している $|R_1\rangle$ を得る。数値計算の詳細について少々述べておくと、式 (20) のような転送行列のベクトルへのかけ算は、部分ごとに分けて行うのが高速計算のコツである。例えば、下のよう書き直して、和を右側の和記号から取る。(図 5)

$$R(\eta_i \sigma_i \xi_i) = \sum_{\sigma_{i+1} \xi_{i+1}} S(\xi_i \sigma_i \sigma_{i+1} \xi_{i+1}) \left[\sum_{\eta_{i+1}} R(\xi_{i+1} \sigma_{i+1} \eta_{i+1}) P(\eta_{i+1} \sigma_{i+1} \sigma_i \eta_i) \right] \quad (21)$$

Fig. 5. 列転送行列の作用による L と R の伸展。

こうして $|R_1\rangle$ まで求めておけば、 σ_1 についての確率を式 (15), (16) の拡張として次のように書くことができる。

$$p(\bar{\sigma}_1) = \frac{\langle L_1 | \delta(\bar{\sigma}_1, \sigma_1) | R_1 \rangle}{\langle L_1 | R_1 \rangle} \quad (22)$$

上式では $|R_1\rangle$ に符合する形で $\langle L|$ を $\langle L_1|$ と番号付けしておいた。(両方とも σ_1 を変数として持つから。) この確率に従ってサイコロを振ると、左端のスピン σ_1 を決定できる。仮に $\sigma_1 = \bar{\sigma}_1$ が選ばれたとしよう。隣のスピン σ_2 はどうだろうか? 先に定義した条件付き確率 $p_{\bar{\sigma}_1}(\bar{\sigma}_2)$ があれば σ_2 を同様にサイコロ振りにより決定できる。 σ_2 をおびき出す目的で、列転送行列をひとつ $\langle L_1|$ にかける。(図 5)

$$L(\eta_2 \sigma_2 \xi_2) = \sum_{\eta_1} P(\eta_2 \sigma_2 \bar{\sigma}_1 \eta_1) \sum_{\xi_1} L(\eta_1 \bar{\sigma}_1 \xi_1) S(\xi_1 \bar{\sigma}_1 \sigma_2 \xi_2) \quad (23)$$

ちょっと注意を要するのが、上式では $\bar{\sigma}_1$ について和を取らないことだ。何故なら、既に $\bar{\sigma}_1$ は up か down か、どちらかに決定されているのだから。従って、こうして生成された $\langle L_2|$ は **固定されたスピン $\bar{\sigma}_1$ を暗に含んでいる**。この $\langle L_2|$ と、以前に式 (20) で求めておいた $|R_2\rangle$ を用いると、主目的であった σ_2 についての条件付き確率が求まる。

$$p_{\bar{\sigma}_1}(\bar{\sigma}_2) = \frac{\langle L_2 | \delta(\bar{\sigma}_2, \sigma_2) | R_2 \rangle}{\langle L_2 | R_2 \rangle} \quad (24)$$

これに従って、2 番目のスピンを決定する。そして同様に $\langle L_3| = \langle L_2| T$ を求め、式 (20) で求めておいた $|R_3\rangle$ と合わせて 3 番目のスピンについての条件付き確率を求め と作業を反復して行くと N 個のスピン列についてのスナップショット $\{\bar{\sigma}\} = \bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \dots, \bar{\sigma}_N$ が得られるわけだ。この辺りは 1 次元イジング模型でスナップショットを得る手順と大差ない。

§4. 四角い領域内のスピン配列を描く

長さ N のスピン列についての配列決定操作を、隣り合う M 列について繰り返行くと、広さ $N \times M$ の領域のスナップショットを得ることができる。(思い出そう、これが最終目的だった。) その計算手順は? やはり条件付き確率の計算が要となる。ある長さ N のスピン列 $\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \dots, \bar{\sigma}_N$ (図 6 中の \times 印) についてその配列が決定された後の状態を考え、隣のスピン列について条件付き確率を求めてみよう。登場する 2 つのスピン列を明確に区別するために、2 番目のスピン列を $\{\tau\} = \tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N$ (図 6 中の \circ 印) と表そう。これらスピン列の周囲はどういう状況かということ、図 4 で考えたムカデのような系に、更に横長の行転送行列を一つ挟み込んだ形になっている。(こっちの方が、よりムカデに近い形をしている?) 例に習って、この行転送行列を幾つかの因子の積で分解表現しよう。図中、右から半行転送行列 (half-row transfer matrix, HRTM) である $O(\nu\bar{\sigma}_N\tau_N\nu')$ 、 i が $N-1$ から 1 までの局所ボルツマン重率⁵⁾ $W(\tau_i\tau_{i+1}\bar{\sigma}_i\bar{\sigma}_{i+1})$ 、そして再び半行転送行列 $Q(\mu'\tau_1\bar{\sigma}_1\mu)$ が並んでいる。

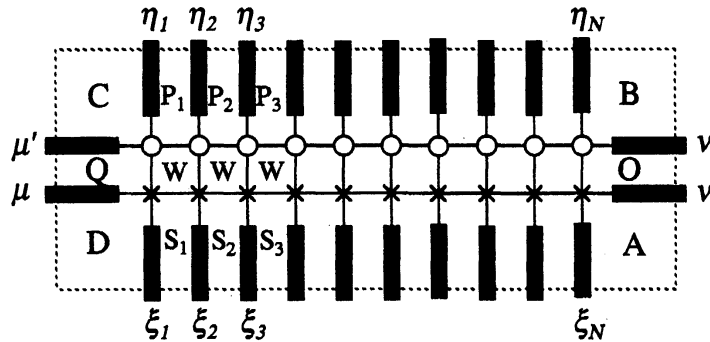


Fig. 6. 2 段目のスピン列を含むクラスター。 \times 印は既に決定されたスピン、 \circ 印はこれから決定するスピン。

このサンドイッチ構造の系は、見方を少し変えれば前節で取り扱った図 4 の形に帰着することができる。角転送行列と半行転送行列を、縦方向に 1 サイト分だけ拡張して考えるのだ。例えば後者、半行転送行列 S は局所ボルツマン重率 W を一つ接合することにより図 7 のように伸ばせる。

$$S'(\xi_i\tau_i\tau_{i+1}\xi_{i+1}) = W(\tau_i\tau_{i+1}\bar{\sigma}_i\bar{\sigma}_{i+1})S(\xi_i\bar{\sigma}_i\bar{\sigma}_{i+1}\xi_{i+1}) \quad (25)$$

右辺に現れるスピン変数 $\bar{\sigma}_i$ と $\bar{\sigma}_{i+1}$ は既に固定されているので、それらは左辺に現れる S' の変数とは考えていない。従って、こうして拡張しても S'_i の自由度は S_i と同一である。(ちょっと注意すべきは、こうして拡張した後の S'_i が場所に依存している点である。)

一方、角転送行列 A と D の拡張は、角転送行列繰り込み群の処方⁴⁾ を用いて、次のように半行転

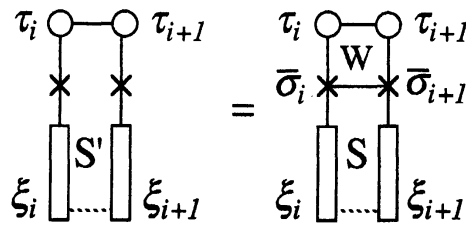


Fig. 7. HCTM S の縦方向への伸展。

送行列 O と Q をはりつける形で行う。(図 8)

$$A'(\xi_N \tau_N \nu') = \sum_{\nu} A(\xi_N \bar{\sigma}_N \nu) O(\nu \bar{\sigma}_N \tau_N \nu')$$

$$D'(\mu' \tau_1 \xi_1) = \sum_{\mu} Q(\mu' \tau_1 \bar{\sigma}_1 \mu) D(\mu \bar{\sigma}_1 \xi_1) \tag{26}$$

半列転送行列の拡張と同じように、こうして拡大された角転送行列は拡大前の角転送行列と同じ自由度しか持っていない。従って拡張に伴う計算量の(指数的な)増大はない。こうして、図 6 にあげた系は、 A', B, C, D', P_i, S'_i によって構成される図 4 の形の系に帰着される。という訳で、2 行目のスピン列 $\{\tau\}$ も、前節の処方に従って左から順番にサイコロを振りつつ決定できるのだ。更に、同様の行スピン決定を 3 行目、4 行目と繰り返して行き、 M 行 N 列の長方形領域の内部でスピン配列のスナップショットを最終的に得るのだ。(余談ながら、行転送行列と列転送行列が出て来たから行列転送行列もあるのかということ、そういうものは存在しない。)

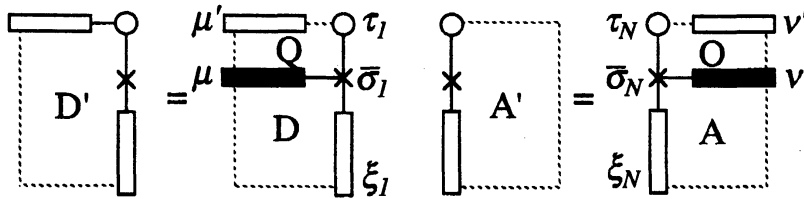


Fig. 8. 角転送行列 D と A の拡張。

§5. Disucssions

1 次元、2 次元イジング模型のスナップショットが得られた所で、3 次元イジング模型への拡張は? この場合、転送行列固有ベクトルが、何らかのテンソル積の形で与えられていれば、これまで同様の操作を用いてスナップショットを得ることが出来る。が、3 次元古典系の DMRG には、まだ決定打が

ない — たぶん誰でもそう考えている (←迷信か?) — ので、この間には何とも答えようが無いのだ。

前節でとりあげた2次元イジング模型のスナップショット生成にも、マイナーな問題が残っている。それは、系の大きさが有限で小さな場合に、系全体にわたって正確なスナップショットを計算できるか? という問題であり、2次元古典系の有限サイズクラスターに対しての DMRG (とその変形) の適用方法がどうも怪しいまま放置されている今日、まだ解決に至っていない。

2次元イジング模型のスナップショットが角転送行列などから再現できたということは、角転送行列などが十分な熱力学情報を持ち得ているという明かしである。が、角転送行列の固有値や固有ベクトルをいくら眺めても、そんな情報は出てこない。「橋がわたっていない」この関係は、もうしばらく(?) 我々を楽しませてくれそうだ。

-
- 1) S. R. White: Phys. Rev. Lett. 69 (1992) 2863; Phys. Rev. B48 (1993) 10345.
 - 2) 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.
 - 3) T. Nishino: J. Phys. Soc. Jpn. 64 (1995) 3598.
 - 4) T. Nishino and K. Okunishi, J. Phys. Soc. Jpn. 65 (1996) 891; J. Phys. Soc. Jpn. 66(1997) 3040.
 - 5) ここでは IRF 模型の形イジング模型を表現した。文献 [2] 参照。