密度行列繰り込み群

神戸大学理学部
西野友年

コンピューターを使ってハミルトニアンを対角化することは、しごく他愛のないことに思われる。けれども、よ~く考えると有限自由度しか表現・記憶し得ないコンピューターを使って、ほとんど無限の自由度を持つ物理系のハミルトニアンを対角化しようとするのだから、職業柄「解けましぇ~ん」と公言する訳には行かない計算物理の専門家達は「いいわけと悪業の数々」を積む。その一つが、これから説明する「数値的な繰り込み群処方」だ。

本題の「密度行列繰り込み群」に入る前に、数値繰り込み群を説明するのに適した(?) 模型を一つ設定しておこう。それは、128 個の原子が一列に並んだ一次元格子上を電子が渡り歩く模型だ。N 個の電子があれば、それぞれの座標を $x_i,\ i = 1, 2, \ldots, N$ と表して,

系の波動関数は $\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)$ と書ける. (電子のスピンは無視した。) この場合、ヒルベルト空間の次元 ($=$ 波動関数の全要素数) は ${}_{128}C_N$ であり、N とともに急激に増加する。例えば、$N = 64$ の場合、全ての要素 $\{\Psi(x_1, x_2, \ldots, x_N)\}$ を計算機に格納することなど、全く不可能であることは容易に検証できる。さて、どう「悪業」を積めば良いだろうか?

論点を明確にするために、もう少しヒヨって $N = 1$ の場合を考えよう。(まず $N = 1$ で「腕試し」をしてから、$N > 1$ に攻め込む計画を練るのだ。) この場合、波動関数は $\Psi(x) = \langle x|\Psi\rangle$ であり、ヒルベルト空間の次元は系の長さ $L = 128$ まで落ちる。また、ハミルトニアンは

$$H = -\sum_{i=1}^{L}(|i\rangle\langle i+1| + |i+1\rangle\langle i|) + \sum_{i=1}^{L} U_i\,|i\rangle\langle i| \tag{1}$$

という tight binding 型のもだとしよう。(こう制限しても、議論の一般性は失われない。) これを行列表現すると

$$H = \begin{pmatrix} U_1 & -1 & 0 & 0 & \cdots \\ -1 & U_2 & -1 & 0 & \cdots \\ 0 & -1 & U_3 & -1 & \cdots \\ 0 & 0 & -1 & U_4 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{2}$$

という具合に、三重対角行列となる。(以下の議論は三重対角でないハミルトニアンに対しても容易に拡張できる。) ついでに、U_i は i に依存しないとして、定数 U で表すことにしよう。ハミルトニアン H が与えられた時、まずまっ先に知るべきものは、基底状態

$$|\Psi_0\rangle = \sum_i \Psi_0(i)|i\rangle \tag{3}$$

とその固有エネルギー E_0 だ。 $\Psi_0(i)$ と E_0 を数値計算で求めることを、とりあえずの目標としよう。

「ちょっと単純化しすぎではないですか? $U_i \equiv U$ なんて条件があれば、解析解が求まりますよ?!」という疑問が湧いて来るかもしれない。実は、我々自身に「マゾ的に厳しい条件」を一つ課すのだ。仮に、我々が使える計算機は、たかだか 4 行 4 列のエルミート行列しか対角化できない としたら、どうだろうか? ハミルトニアン H の行列次元は$L = 128$ だったから、こんな条件の下では H を直接対角化することは不可能だ。つまり、この妙な条件設定は「実際に我々が最大固有値を得られるような行列サイズは 10^9 次元くらいだけど、相手にする物理系はもっとも ~ っと多自由度だ」という現実をそのままスケールダウン したものだ。数値計算の技法を議論する時の常套手段と言っても過言ではない。整理すると、極端に少ない計算量で「どこまで計算できるか」をまず競った上で、実際に使える計算資源を用いて (超) 大規模計算に挑むのである。

1 ブロック繰り込み群

10 年ほど前までは、「4 行 4 列の対角化しかできないのであれば、まず系を 4 格子点づつのグループに分けてあげよう」と考えるのが普通で、この考えにハマった人々は次々と沈没して行った。この考えに基づいて、系を分割したものは

$$\cdots [\circ\ \circ\ \circ\ \circ\ ] [\circ\ \circ\ \circ\ \circ\ ] [\circ\ \circ\ \bullet\ \circ\ ] [\circ\ \circ\ \circ\ \circ\ ] [\circ\ \circ\ \circ\ \circ\ ] \cdots$$

と表せる。ここで、白丸は 1 列に並んだ原子で、その上に電子が 1 個存在する所だけ黒丸で示してある。従って、4 格子点づつの各グループ (これからは cell と呼ぼう) 内部の状態は、空 [$\circ\ \circ\ \circ\ \circ$] であるか、それとも粒子が一つ存在する状態 [$\bullet\ \circ\ \circ\ \circ$], [$\circ\ \bullet\ \circ\ \circ$], [$\circ\ \circ\ \bullet\ \circ$], [$\circ\ \circ\ \circ\ \bullet$] のいずれかになる。Kadanoff 流の実空間繰り込みを念頭に置くと、 [$\circ\ \circ\ \circ\ \circ$] が一つ上の階層の”繰り込まれた空格子点 □ ” と解釈できることは明らかである。あと 4 つの、電子を一つ含む状態

から ”繰り込まれた占拠格子点 ■ ” を抽出する一番原始的なやり方は **cell** 内部だけを考えた時の「cell ハミルトニアン」

$$H_{\rm cell} = \begin{pmatrix} U & -1 & 0 & 0 \\ -1 & U & -1 & 0 \\ 0 & -1 & U & -1 \\ 0 & 0 & -1 & U \end{pmatrix} \tag{4}$$

を対角化して、その基底固有関数 $(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4)$ — つまり 4-site cell 内部の基底状態 — を新たに電子の居る” 繰込まれた空格子点 ■ ” とみなす方法 だ。 残りの 3 状態は惜し気もなく捨てる。この「不可逆なブロックスピン変換」を行うと — 詳細は省略するけど — ハミルトニアンは再び元と同じ (ような) 形

$$\tilde{H} = -t \sum_{i=1}^{L/4} (|i\rangle\langle i+1| + |i+1\rangle\langle i|) + \sum_{i=1}^{L/4} \tilde{U} |i\rangle\langle i| \tag{5}$$

に戻る。但し、総和記号の足 i は、$L/4 = 32$ になっている点に注意。また、パラメターの「変換に伴う流れ」は $t = 1 \to \xi_1\xi_4$ および $U \to$ 「セル内部の基底固有エネルギー」となっている。この「元と同じ形に戻って来る」所に快感を感じる所が既に病気の始まりで、更に一つ上の階層でも 4 サイトづつのグループ化を行い

$$\cdots [\square\ \square\ \square\ \square\ ]\ [\square\ \square\ \blacksquare\ \square\ ]\ [\square\ \square\ \square\ \square\ ]\ [\square\ \square\ \square\ \square\ ]\ [\square\ \square\ \square\ \square\ ] \cdots$$

「もう一つ上の階層」を考えて $L/4/4 = 8$ サイトへと「系を繰り込み」、更にもう一階層上がると $L/4/4/4 = 2$ サイトになる、ああここで全系の「有効ハミルトニアン」が 2 行 2 列にまで圧縮できたので、これで全系の近似波動関数が求められる.... と思うのが人情。ところが、こうやって際に計算してみると結果は散々で、とても世に出せるような計算精度ではなかった。求めた基底エネルギー $\tilde{E}_0$ は、誤差だらけであったのだ。(けどソレを恥じずに勇敢に論文を書いた人は多数居る。その勇気は称えられるべきである。) こんな風に、実空間繰り込み群を量子系に応用しようとした人々が沈没して行った結果として「実空間繰込み群というものは哲学であって道具ではない」という認識が蔓延していたのだ。

この「実空間繰込み群における古典的失敗」の原因は何か? というと、それは cell 内部の 5 状態から 2 状態を取り出したという強引さによって、結果として得られる系全体の波動関数が本来のスムーズさを持たずに、cell 分割によってガタガタになってしまうからである。実際に計算したものをグラフにしてみると、解析学でよく話題にとりあげられる「連続だけど至る所微分不可能」 で有名なワイエルシュト

ラスのナンチャラ (??) 関数にソックリな図が得られる。近似波動関数の構成方法を、よく考えると、この困難は「階層的なブロック化」に頼る限り、克服するのは至難の技だ。

2　1 体問題の DMRG

この困難を何とかしよう、目標に基づいて、密度行列繰込み群 [1] (Density Matrix Renormalization Group, DMRG) は登場した。DMRG は、全系を次のように 4 つの cell (?) に分割する。

$$[\circ \ \ldots \circ \ \circ \ \circ \ \circ \ ] \, [\circ \ ] \, [\circ \ ] \, [\circ \ \circ \ \circ \ \circ \ \ldots \circ \ ]$$

全サイト数を L とした上で—今まで $L = 128$ と仮定していたけど、この制限は外そう — 左端の cell の大きさを n サイトとすると右端の cell は (L-n-2) サイトで、両者を接続する中左と中右の cell は「生」の格子点である。左から L, ℓ, r, R とラベル付けし、それぞれの cell に「電子が居ない状態」を $|0\rangle_L$, $|0\rangle_\ell$, $|0\rangle_r$, $|0\rangle_R$ と記すことにしよう。また、cell L の「系の左端から数えて i 番目に電子が居る」状態を $|i\rangle_L$ (但し $1 \leq i \leq n$), cell ℓ に電子が居る状態を $|1\rangle_\ell$, cell r に電子が居る状態を $|1\rangle_r$, cell R の「系の左端から数えて j 番目に電子が居る」状態を $|j\rangle_R$ (但し $n+3 \leq i \leq L$) と書き表わそう。

これらは、単なる基底ベクトルの書き換えにすぎないので、全系の「厳密な」基底状態が $|\Psi_0\rangle = \sum_{i=1}^{L} \Psi_0(i)|i\rangle$ と表される時、つまり

$$\sum_{j=1}^{L} H_{ij}\Psi_0(j) = E_0\Psi_0(i) \tag{6}$$

が成立する波動関数 $\Psi_0(i)$ が あらかじめわかっていれば cell に分割した基底による基底状態の表現は

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle \quad &= \quad \sum_{i=1}^{n} \Psi_0(i)|i\rangle_L|0\rangle_\ell|0\rangle_r|0\rangle_R + \Psi_0(n+1)|0\rangle_L|1\rangle_\ell|0\rangle_r|0\rangle_R \\ &+ \quad \Psi_0(n+2)|0\rangle_L|0\rangle_\ell|1\rangle_r|0\rangle_R + \sum_{j=n+3}^{L} \Psi_0(j)|0\rangle_L|0\rangle_\ell|0\rangle_r|j\rangle_R \end{aligned} \tag{7}$$

となる。(当たり前!) ここで、

$$\Phi_L|L_{\rm exist}\rangle = \sum_{i=1}^{n} \Psi_0(i)|i\rangle_L\,, \quad \Phi_R|R_{\rm exist}\rangle = \sum_{j=n+3}^{L} \Psi_0(j)|j\rangle_R \tag{8}$$

という線形結合を導入して、L および R に「電子が存在している」という状態を表そう。但し Φ_L と Φ_R は規格化 $\langle L_{\rm exist}|L_{\rm exist}\rangle = 1$ および $\langle R_{\rm exist}|R_{\rm exist}\rangle = 1$ が満たされるような複素数ならば何でも良い。基底波動関数が実関数の場合には、もちろん

$$\Phi_L = \left\{\sum_{i=1}^{n} \Psi_0(i)\Psi_0(i)\right\}^{1/2}, \quad \Phi_R = \left\{\sum_{i=n+3}^{L} \Psi_0(i)\Psi_0(i)\right\}^{1/2} \tag{9}$$

となる。また、記号に統一性を持たせるために $\Phi_\ell = \Psi_0(n+1)$、$\Phi_r = \Psi_0(n+2)$ を導入しよう。ついでに $|L\rangle_L = |L_{\rm exist}\rangle$ および $|R\rangle_R = |R_{\rm exist}\rangle$ と略記すると

$$\begin{aligned} |\tilde{\Phi}_0\rangle &= \Phi_L|L\rangle_L|0\rangle_\ell|0\rangle_r|0\rangle_R + \Phi_\ell|0\rangle_L|1\rangle_\ell|0\rangle_r|0\rangle_R \\ &+ \Phi_r|0\rangle_L|0\rangle_\ell|1\rangle_r|0\rangle_R + \Phi_R|0\rangle_L|0\rangle_\ell|0\rangle_r|R\rangle_R \end{aligned} \tag{10}$$

という風に、Hilbert Space の次元を「みかけ上」 4 にまで落とせる。この変換を、強引に「繰り込み群変換」とみなすならば、[1]ハミルトニアン H の方も「おなじ」線形変換を用いて、行列次元が 4 の Hermite 行列に変換できる。

$$\tilde{H} = \begin{pmatrix} H_{LL} & H_{L\ell} & 0 & 0 \\ H_{\ell L} & H_{\ell\ell} & H_{\ell r} & 0 \\ 0 & H_{r\ell} & H_{rr} & H_{rR} \\ 0 & 0 & H_{Rr} & H_{RR} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{LL} & H_{L\ell} & 0 & 0 \\ H_{\ell L} & U & -1 & 0 \\ 0 & -1 & U & H_{rR} \\ 0 & 0 & H_{Rr} & H_{RR} \end{pmatrix} \tag{11}$$

但し「繰り込まれた」行列要素は次のように計算される。

$$\begin{aligned} H_{LL} &= \sum_{i,j=1}^{n} \langle L|i\rangle\, H_{ij}\, \langle j|L\rangle \\ H_{L\ell} &= \sum_{i=1}^{n} \langle L|i\rangle\, H_{i(n+1)} \quad H_{\ell L} = \sum_{i=1}^{n} H_{(n+1)\,i}\, \langle i|L\rangle \\ H_{Rr} &= \sum_{i=n+3}^{L} \langle R|i\rangle\, H_{i(n+2)} \quad H_{rR} = \sum_{i=n+3}^{L} H_{(n+2)\,i}\, \langle i|R\rangle \\ H_{RR} &= \sum_{i,j=n+3}^{L} \langle R|i\rangle\, H_{ij}\, \langle j|R\rangle \end{aligned} \tag{12}$$

[1]この「繰り込み群変換」という言葉は、あまり実体を反映していないのだけど、歴史上 (?) のいきがかりにより「繰り込み群」という名前が使われるようになってしまった。

ここからが大切なポイント: L 次元の H を 4 次元の $\tilde{H}$ に圧縮したにもかかわらず、$\tilde{H}$ が満たす固有方程式

$$\begin{pmatrix} H_{LL} & H_{L\ell} & 0 & 0 \\ H_{\ell L} & U & -1 & 0 \\ 0 & -1 & U & H_{rR} \\ 0 & 0 & H_{Rr} & H_{RR} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_L \\ \Phi_\ell \\ \Phi_r \\ \Phi_R \end{pmatrix} = E_0 \begin{pmatrix} \Phi_L \\ \Phi_\ell \\ \Phi_r \\ \Phi_R \end{pmatrix} \tag{13}$$

から求められる基底固有エネルギー E_0 は、式 6 に出て来る E_0 と全く同じである。厳密な基底波動関数を知っていれば 1 体問題のハミルトニアン H を $\tilde{H}$ に圧縮しても、基底状態に関して言えば何の誤差も生じないのだ。

実際は、前もって厳密な基底波動関数 $\Psi_0(i = 1, 2, \ldots, L)$ など知ってるはずがないので、上の固有方程式は「理論的なトートロジー」に陥っているように見える。いや、そうではない。基底波動関数とは (全く) 関係のない、適当に (乱数で) 与えたような初期 (試行) 波動関数 $\Psi^0(i = 1, 2, \ldots, L)$ から出発して、それを反復操作によって少しづつ $\Psi^0 \to \Psi^1 \to \Psi^2 \cdots$ と改良して最終的に厳密な基底波動関数 $\Psi^\infty = \Psi_0$ に到達する計算手順が存在するのだ。話が長くなるとナニなので、ここで天下り的にその手順のエッセンス (=原理だけ) を示そう。

- まず、適当に初期値 $\Psi^0(i = 1, 2, \ldots, L)$ を与える。完全に乱数で与えても良い。
- 左のブロック L のサイズ n を 1 に、右のサイズは $L - n - 2$ に取る。
- 式 $8, 9$ を使って $|R\rangle$ を求める。 (ちなみに $|L\rangle$ はトリビアル。)
- $|L\rangle$ と $|R\rangle$ を使って、式 $9, 12$ により $\tilde{H}$ を求める。
- ソレを対角化して $(\Phi_L, \Phi_\ell, \Phi_r, \Phi_R)$ を求める。

ここで、ちょっと説明。この時点で、Φ_L、Φ_ℓ、Φ_r は $\Psi^0(n = 1)$、$\Psi^0(n + 1 = 2)$、$\Psi^0(n + 2 = 3)$ を、少し改良したものになっている。また、Φ_R はソレより右側に粒子が存在する確率振幅を改良する働きを持っている。どういう意味で改良されているのか? というと、波動関数

$$\begin{aligned} & (\Psi^1(1), \Psi^1(2), \Psi^1(3), \Psi^1(4), \Psi^1(5), \ldots) \\ = \quad & (\Phi_L, \Phi_\ell, \Phi_r, \Phi_R\langle 4|R\rangle, \Phi_R\langle 5|R\rangle, \Phi_R\langle 6|R\rangle, \ldots) \end{aligned} \tag{14}$$

は、最初に設定した $\Psi^0(i)$ よりも低いエネルギー期待値を与えるのだ。この改良は「左右のブロックの切れ目付近、特に ℓ と r のあたり」のみについて行われるので、

系全体に効果を及ぼすには、以下のように切れ目の位置を与える n を次々と動かして行かなければならない。

- 切り口を一つズラす: $n \leftarrow n+1$
- 式 $8, 9$ を使って $|L\rangle$ と $|R\rangle$ を求める。
- $|L\rangle$ と $|R\rangle$ を使って、式 $9, 12$ により $\tilde{H}$ を求める。
- ソレを対角化して $(\Phi_L, \Phi_\ell, \Phi_r, \Phi_R)$ を求める。

少々クドいけど、この時点で波動関数は

$$\begin{aligned} & (\Psi^2(1), \Psi^2(2), \Psi^2(3), \Psi^2(4), \Psi^2(5), \ldots) \\ = \quad & (\Phi_L\langle 1|L\rangle, \Phi_L\langle 2|L\rangle, \Phi_\ell, \Phi_r, \Phi_R\langle 5|R\rangle, \Phi_R\langle 6|R\rangle, \ldots) \end{aligned} \tag{15}$$

と改良される。以下、直上の 4 ステップを反復することによって、$n=1$ から $n=L-3$ まで波動関数を改良して行くことが可能だ。波動関数は各ステップで

$$(\ldots, \Phi_L\langle n-1|L\rangle, \Phi_L\langle n|L\rangle, \Phi_\ell, \Phi_r, \Phi_R\langle n+3|R\rangle, \Phi_R\langle n+4|R\rangle, \ldots) \tag{16}$$

という形になっている。右端 $n=L-3$ まで行ったら、今度は「戻って来る方向に」切り口をズラして、以下の 4 ステップを $n=1$ まで続ける。

- 切り口を一つズラす: $n \leftarrow n-1$
- 式 $8, 9$ を使って $|L\rangle$ と $|R\rangle$ を求める。
- $|L\rangle$ と $|R\rangle$ を使って、式 $9, 12$ により $\tilde{H}$ を求める。
- ソレを対角化して $(\Phi_L, \Phi_\ell, \Phi_r, \Phi_R)$ を求める。

こうして、系の左右を分ける切り口を右へ左へと動かしつつ計算を進めると、しまいには基底波動関数 Ψ_0 に到達する。

計算の原理だけを聞くと、何となく

- 式 $8, 9$ を使って $|L\rangle$ と $|R\rangle$ を求める。
- $|L\rangle$ と $|R\rangle$ を使って、式 $9, 12$ により $\tilde{H}$ を求める。

という計算にかなりの時間を費やしそうな気がするけど、実はそんなことはない。「再利用できるモノは記憶して使いまわす」という数値計算の第 0 法則 (?) を使うと、かなりの計算を省略できる。例えば切り口を右に動かす場合、次のステップの H_{LL} は

$$\text{新しい } H_{LL} = (\Phi_L, \Phi_\ell) \begin{pmatrix} H_{LL} & H_{L\ell} \\ H_{\ell L} & U \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_L \\ \Phi_\ell \end{pmatrix} \tag{17}$$

と、わずかに 2 行 2 列の線形演算で済んでしまう。

3 密度行列の登場

1 体問題の DMRG に、いつまで経っても密度行列が出てこないではないか? と叱られそうだ。説明のために、しばらくの間系を

$$[\circ \ \ldots \circ \ \circ \ \circ \ \circ \ \circ \ ] \, [\circ \ \circ \ \circ \ \circ \ \circ \ \ldots \circ \ ]$$

と左右 2 つのブロックに分割しよう。すると、基底状態は

$$\begin{aligned} |\Psi_0\rangle &= \sum_{i=1}^{n} \Psi_0(i) |i\rangle_L |0\rangle_R + \sum_{j=n+1}^{L} \Psi_0(j) |0\rangle_L |j\rangle_R \\ &= \Phi_L |L_{\rm exist}\rangle |0\rangle_R + \Phi_R |0\rangle_L |R_{\rm exist}\rangle \end{aligned} \tag{18}$$

となり、この状態「のみ」から作られる全系の密度行列は $\rho = |\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|$ と表される。さて、右側のブロックの状態について縮約を取って、左側のブロックに関する密度副行列を求めてみよう。

$$\begin{aligned} \rho_L = \ & {}_R\langle 0|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|0\rangle_R \ + \ \langle R_{\rm exist}|\Psi_0\rangle\langle\Psi_0|R_{\rm exist}\rangle \\ = \ & |\Phi_L|^2 |L_{\rm exist}\rangle\langle L_{\rm exist}| \ + \ |\Phi_R|^2 |0\rangle\langle 0| \end{aligned} \tag{19}$$

こうして得られた ρ_L の固有ベクトルを求めてみると

$$\begin{aligned} \rho_L |0\rangle_L &= |\Phi_R|^2 |0\rangle_L \\ \rho_L |L_{\rm exist}\rangle_L &= |\Phi_L|^2 |L_{\rm exist}\rangle_L \end{aligned} \tag{20}$$

となる。ハミルトニアンの圧縮 (式 11, 12) に出て来た線形変換 $\langle i|L_{\rm exist}\rangle$ は、実は ρ_L の固有ベクトルの要素だったのだ。

1 体問題を離れて、任意の「ふたつに分割可能な系」を考えると、何をやっているのかがもう少し見えて来る。系を部分系 L と R に分割したとき、L の状態を $|i\rangle_L$ で、R の状態を $|j\rangle_R$ で表すと、任意の状態を

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} \Psi(i,j)|i\rangle_L|j\rangle_R \tag{21}$$

で表現できる。この状態「のみ」から作られる全系の密度行列 $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ を行列表現すると $\rho(i'j'|ij) = \Psi^*(i',j')\Psi(i,j)$ となるから、さっきのように縮約を取って部分系 L と R の密度副行列 (の行列表現) を求めてみよう。

$$\begin{aligned} \rho_L(i',i) &= \sum_j \rho(i'j|ij) = \sum_j \Psi^*(i',j)\Psi(i,j) \\ \rho_R(j',j) &= \sum_i \rho(ij'|ij) = \sum_i \Psi^*(i,j')\Psi(i,j) \end{aligned} \tag{22}$$

1 体問題の場合と同様に、ρ_L と ρ_R を対角化してみると、その固有値は全て正であることを「発見」するだろう。(証明もできる。) 更に、両者の固有値は (ゼロのものを除いて) 相等しい。

$$\begin{aligned} \rho_L &= \sum_k (w_k)^2 |L_k\rangle\langle L_k| \\ \rho_R &= \sum_k (w_k)^2 |R_k\rangle\langle R_k| \end{aligned} \tag{23}$$

こうして求めた、密度副行列の固有値 w_k と固有ベクトル $|L_k\rangle$ および $|R_k\rangle$ を使うと、もとの状態を

$$|\Psi\rangle = \sum_k w_k |L_k\rangle|R_k\rangle \tag{24}$$

と分解して表現することが可能だ。(式 18 と見比べてみよ。) この手の分解は、一般に特異値分解と呼ばれる。非常に小さな特異値は、無視してもあまり問題ないので、大きい方から m 個だけ w_k を取って来て、それ以外は無視するような近似は「数値計算で扱う計算量を減らす」観点からみて有益だ。

$$|\Psi\rangle \sim \sum_{k=1}^{m} w_k |L_k\rangle|R_k\rangle \tag{25}$$

通常、この近似は、多少の誤差を持ち込む。より多くの状態を考慮する — より大きな m を使う — と誤差を減らすことが可能だ。また、近似の善し悪しは、波動関

数自体の性質にも依存する。w_k を大きい順に並べた時に、急に減衰するような状態に対しては、上の近似は良い結果を与え、そうではない場合にはソレナリの結果しか与えない。内状を暴露すると、1 体問題の場合は、ゼロでない密度行列固有値が $|\Phi_L|^2$ と $|\Phi_R|^2$ の 2 個しかなく、それ以外のゼロ固有値に対応する状態を無視したので、結果として何も誤差を生まなかったのだ。

波動関数の特異値分解 (式 24) と、m 状態への制限 (式 25) を用いて、1 体問題の場合のように基底状態を「非常に少ない計算量で」求めることが可能で、コレが一般的な「密度行列繰り込み群」の方法として知られている。詳細は参考文献に譲ろう。「密度行列対角化」は、実は Baxter の角転送行列の方法や、量子化学の Natural Chemical Bond を求める際にも顔を出す。どうやら「いかにして計算量または情報を圧縮するか」という問題には共通かつ必須な手続きであるらしい。

4 密度行列繰への (私的) 最近の取り組み

DMRG の基礎的な所を眺めると、いろいろな問題に関連していることがわかる。例えば、ちょっと別の角度から DMRG を眺めると、変分法とのつながりが見えて来る。DMRG は試行関数をテンソル積の形で表す変文法だと言い切っても過言ではない。この変分法的な性質「だけ」を取り出して、2 次元量子系のハミルトニアンや 3 次元古典系の転送行列に対する、変分問題を設定することも可能で、そこを突破口にして (DMRG が主に利用されている 1 次元量子系よりも) 高い次元の系にも DMRG の応用範囲を広げる試みが進展している。精進あるのみ。

波動関数を、より少ない情報で近似する — という作業は「与えられた量子状態を伝送路を通じて遠方 (?) に転送する」場合に必要になって来る。コレは量子情報転送で、できるだけ転送する時間を減らそうとすると、特異値分解 (の親玉) が必要になる。こんな風に、量子情報圧縮と DMRG は密接に関係していることがわかっている。ただ、今の所は関連が指摘されているだけで、どちらか一方の分野に Positive な寄与をしているとは言いがたい..... 精進あるのみ。

1 体問題の DMRG は、特異値分解を通じて画像を圧縮する手段の一つとして応用できるかもしれない。大きな画像を特異値分解しようとすると、何千次元もの行列を対角化する必要があり、現時点では民生用の画像圧縮としては全く役に立たない。そこで、全体を一気に特異値分解するのではなく、DMRG のように一部分づつ取り扱うことが考えられないか? という問題設定だ。答えは? というと、実は私もまだ「コレだ」というアルゴリズムを発見できないでいる。精進あるのみ。

最後に、情報窓口を挙げておく。最近の研究で得られた結果は
http://quattro.phys.sci.kobe-u.ac.jp/nishi/publist.html
に列挙してあるので、興味のある方はどうぞダウンロードしてネ。また、DMRG に関連したプレプリントを見つける度に http://quattro.phys.sci.kobe-u.ac.jp/dmrg.html にアップロードしているので、どうぞ御覧下さい。

参考文献

[1] S. R. White: Phys. Rev. Lett. 69 (1992) 2863; Phys. Rev. B48 (1993) 10345.

[2] "Density-Matrix Renormalization", Springer Lecture Note in Physics 528, eds. I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke and K. Hallberg, Springer 1999.