密度行列繰り込み群と幾つかの変分原理

神戸大学理学部・西野友年, 西尾幸暢, Andrej Gendiar

密度行列繰り込み群 (Density Matrix Renormalization Group, DMRG) は 1 次元量子系の基底状態を精密に求める数値計算法として、約 10 年前に S.R. White によって提唱された。[1, 2] 量子系と古典系の対応を考えれば、2 次元古典系にも DMRG を適用できて、転送行列に対し固有状態 (の近似) を与えられることが直ちにわかる。[3, 2] 一方で、DMRG は Baxter の変分原理を背景に持つ計算法であると解釈することも可能で、[4, 5] 変分計算であるが故の 色々と妙なクセ も持ち合わせている。その一端を観察する一例として、円筒上の 2 次元 Ising 模型に対する 幾つかの変分原理 を考え、そのどれが 正確な数値繰り込み に適当なものなのかを考えてみよう。いきなり 2 次元系を考える前に、まずは 1 次元 Ising 模型から観察して行く。

1　1 次元 Ising Model の分配関数計算

1 次元 Ising 模型の分配関数は、その計算方法が統計力学の教科書に演習問題として収録されているように、簡単に求めることができる。幾つかの方法があるのだけど、ここでは 端から和を取って行く ことにしよう。

1 次元 Ising Model のハミルトニアンは、N 個の Ising スピン ($\sigma_i = \pm 1$) からなる系で、両端のスピンが自由に動ける自由端条件 (Free Boundary Condition) の下では

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

と与えられる。相互作用定数 J は正で、強磁性的な場合を考えよう。分配関数は全系の ボルツマン因子 $\exp(-\beta H_N)$ に対して、スピンの配列和を取ったものになる。

$$Z_N = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \exp[-\beta H(\sigma_1 \dots \sigma_N)] = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \prod_{i=1}^{N-1} \exp(\beta J \sigma_i \sigma_{i+1}) \tag{2}$$

$N = 3$ の場合を例に取ると、左端の σ_1 から順にスピンの和を取って行くことによって、Z_3 は簡単に計算できる。

$$\begin{aligned} Z_3 &= \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3} \exp(\beta J \sigma_1 \sigma_2) \exp(\beta J \sigma_2 \sigma_3) = 2 \cosh \beta J \sum_{\sigma_2 \sigma_3} \exp(\beta J \sigma_2 \sigma_3) \\ &= 2 \cosh \beta J \cdot 2 \cosh \beta J \sum_{\sigma_3} 1 = 2(2 \cosh \beta J)^2 \end{aligned} \tag{3}$$

一般的に $Z_N = 2(2\cosh\beta J)^{N-1}$ が成立していることは明らかだろう。こんな風に、スピンの部分的な和を取って自由度を消去して行くことを、どんな模型にでも考えられれば.... という「淡い願望」が、数値繰り込み群の基本的な動機づけだと思って間違いない。

スピンの和を全部取らずに、最後の 1 個だけは残しておくことを考えよう。

$$\Psi_N(\sigma_N) = \sum_{\sigma_1 \ldots \sigma_{N-1}} \exp[-\beta H(\sigma_1 \ldots \sigma_N)] = (2\cosh\beta J)^{N-1} \tag{4}$$

いまの場合 $\Psi_N(\sigma_N)$ は σ_N に関係しない定数になってしまった。ただ、外部磁場 h が存在する場合などには $\Psi_N(\sigma_N)$ が σ_N に依存するようになるので、一般性を失わないように以下の式にも σ_N を Ψ_N の変数として明記しておく。(但し、添え字が煩雑なので $\Psi_N(\sigma)$ と略記することにしよう。) この量を使うと $2N-1$ 個のスピンを含む系の分配関数が直ちに求められる。

$$Z_{2N-1} = \sum_{\sigma} \Psi_N(\sigma)\,\Psi_N(\sigma) = \sum_{\sigma} (2\cosh\beta J)^{2N-2} = 2(2\cosh\beta J)^{2N-2} \tag{5}$$

これは、長さ $2N-1$ の系の 両端からスピンの配列和を取って行く ことによって Z_{2N-1} を求めたことに相当している。$N-1$ 個のスピンの部分和 を実行して求めた Ψ_N の 副産物として 長さ $2N-1$ の系の分配関数が 簡単に求められる ことも、頭の片隅に置いておこう。

後に続く話の都合で、転送行列を先に定義しておこう。

$$T(\sigma|\sigma') = \exp(\beta J \sigma\sigma') \tag{6}$$

これを使うと、長さ $2N$ の系の分配関数も $\Psi_N(\sigma)$ を使って表すことができる。

$$\begin{aligned} Z_{2N} &= \sum_{\sigma\sigma'} \Psi_N(\sigma)\, T(\sigma|\sigma')\, \Psi_N(\sigma') \\ &= \sum_{\sigma} \Psi_N(\sigma)\, \Psi_{N+1}(\sigma) \end{aligned} \tag{7}$$

最後の式変形では、 $\Psi_N(\sigma)$ をベクトルに見立てた漸化式

$$\Psi_{N+1} = T\,\Psi_N \tag{8}$$

を使った。こうして求めた Z_{2N-1} と Z_{2N} の比を取ると、系の長さが増えたことによる分配関数の増分 を求めることができる。

$$\lambda = \frac{Z_{2N}}{Z_{2N-1}} = \frac{\Psi_N^*\, T\, \Psi_N}{\Psi_N^*\, \Psi_N} \tag{9}$$

ここで Ψ_N^* は Ψ_N を転置したもので、分母は Ψ_N をベクトルと解釈した時のノルムになっている。こうして 転送行列 T の Ψ_N に対する変分期待値 とし

て求めた λ は、無限に長い系での 1 サイトあたりの分配関数 $\bar{\lambda}$ の下限になり、N が増えるに従って λ は $\bar{\lambda}$ へと漸近して行く.... のが普通だ。1 次元イジング模型には特別な事情があって Z_{2N}/Z_{2N-1} は常に $2\cosh\beta J$ で N には関係のない定数になる。ここまでは頭の体操で、$\Psi_N(\sigma)$ を使ったからと言って、特に計算上のご利益が何かあるわけではない。部分和が活躍するのは 2 次元以上の系だ。

2　2 次元 Ising Model の分配関数計算

正方格子上に Ising スピン $\sigma_{\mathbf{i}}$ が並んだ 2 次元 Ising 模型を考えよう。太字の添え字 $\mathbf{i}$ は、格子上の 2 次元座標を表している。この模型のハミルトニアンは

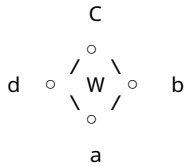
$$H = -J\sum_{\{\mathbf{ij}\}}\sigma_{\mathbf{i}}\sigma_{\mathbf{j}} \tag{10}$$

と最近接サイト対 $\{\mathbf{ij}\}$ 間に働くスピン相互作用の和で書き表せる。これに対する分配関数は

$$Z = \sum_{\{\sigma\}}\exp(-\beta H) \tag{11}$$

と、全てのスピン — 中括弧でくくった $\{\sigma\}$ でそれを表す — についての配列和で表せる。1 次元系との対応を考えれば、式 (2) のように系に含まれるスピンの数を Z の添え字として付けたくなるけれども、数式の見た目が煩雑になるので、2 次元系では添え字を省略する。さて、これを以前のように 部分和を使って 手短かに書き表せるだろうか?

2 次元 Ising 模型の「最小単位」は、スピンが四角を囲む 4 サイトの有限系だ。ちょっとした計算上の都合で、格子を 45° 回して「ひし型の系」としてこれを眺めてみよう。



この系の分配関数 Z はボルツマン因子

$$W(\sigma_a\sigma_b\sigma_c\sigma_d) = \exp\left[\beta J(\sigma_a\sigma_b + \sigma_b\sigma_c + \sigma_c\sigma_d + \sigma_d\sigma_a)\right] \tag{12}$$

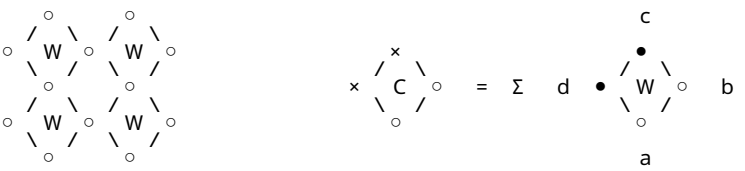
の、各スピン変数についての和を直接計算すれば簡単に求められる。

$$Z = \sum_{\sigma_a\sigma_b\sigma_c\sigma_d} W(\sigma_a\sigma_b\sigma_c\sigma_d) = (\cosh\beta J)^4 + (\sinh\beta J)^4 \tag{13}$$

これは 4 サイトの 閉じた 1 次元 Ising 模型の分配関数に等しくて、式 (6) で定義した 1 次元 Ising 模型の転送行列 T を上の式に持ち込むと、少し見通しの良い形で Z を求めることもできる。

$$Z = \mathrm{Tr}\, T^4 \tag{14}$$

ちょっとスピンの数を増やして、12 個のスピンを含む系を考えてみよう。上の 4 サイトの系を 4 つつなぎ合わせた形 をしている点がミソだ。



この場合に分配関数 Z を直接計算しようとすると 沈没する ので、先に 部分和 を求めておこう。(上図右の黒丸スピンについて和を取る)

$$C(\sigma_a|\sigma_b) = \sum_{\sigma_c\sigma_d} W(\sigma_a\sigma_b\sigma_c\sigma_d) \tag{15}$$

数理物理屋さん は、これくらいの計算なら朝飯前なのだけど 数値物理屋さん にはハードルの高い式なので $C(\sigma_a|\sigma_b)$ の解析形は求めずに、上の式は W が与えられた時に 右辺を数値的に計算して左辺を与える と解釈しよう。(数値 suchi と 数理 suri は チリ chi-ri の差しかない...) 以下に登場する数式も同様で、ほとんどの場合、数値計算を念頭に置いている。こうして求めた部分和 C を使うと、分配関数は

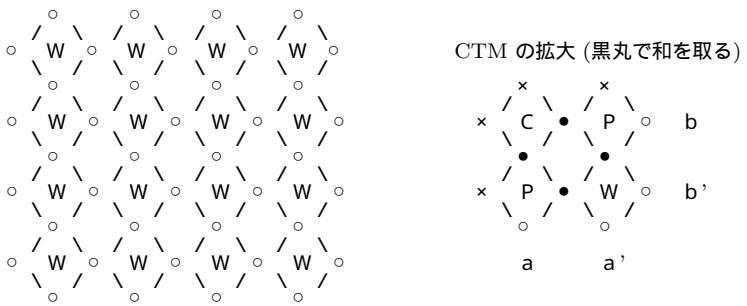
$$Z = \sum_{\sigma\sigma'\sigma''\sigma'''} C(\sigma|\sigma')\, C(\sigma'|\sigma'')\, C(\sigma''|\sigma''')\, C(\sigma'''|\sigma') \tag{16}$$

と書き表せて、ずいぶんと計算が楽になる。C は 2 次元正方行列とも見なせるので、上の式は更に短く 行列積のトレース として表すこともできる。

$$Z = \mathrm{Tr}\, C^4 \tag{17}$$

この式は、式 (14) とソックリな形をしている。C も ある意味で 転送行列の仲間だと解釈して良いので、これには「角転送行列」(Corner Transfer Matrix, CTM) という名前がついている。

部分和を取るテクニックと角転送行列を使えば、40 個のスピンを含む系の分配関数も楽々計算できる。



計算の準備として、C に加えてもう一つ別のタイプの部分和を先に求めておく。

$$P(\sigma_a|\sigma_b|\sigma_c) = \sum_{\sigma_d} W(\sigma_a\sigma_b\sigma_c\sigma_d) \tag{18}$$

P は 3 つのスピン変数を持っているけれども、左右両端の 2 つを行列の足に見立てて「P は σ_b によって定められる行列」だと考えるのが自然だ。(... ということが後になってわかる。) こうして求めた P と、C や W を使うとひと回り拡大した角転送行列 C_2 を求めることができる。上の図の右側を見てから下式に目を落とすと、スピンの対応関係が読み取り易いだろう。

$$C_2(\sigma_a\sigma'_a|\sigma_b\sigma'_b) = \sum_{\sigma\sigma'\sigma''\sigma'''} C(\sigma|\sigma')P(\sigma_a|\sigma'''|\sigma)P(\sigma'|\sigma''|\sigma_b)W(\sigma''\sigma'''\sigma'_a\sigma'_b) \tag{19}$$

要するに、ブロックをくっつけて行き、

- 二つの異なるブロックに接しているスピン変数については和を取る

という要領で、領域が増えた角転送行列を求めるわけだ。40 サイトの系の分配関数は $Z = \mathrm{Tr}\,(C_2)^4$ として求められる。

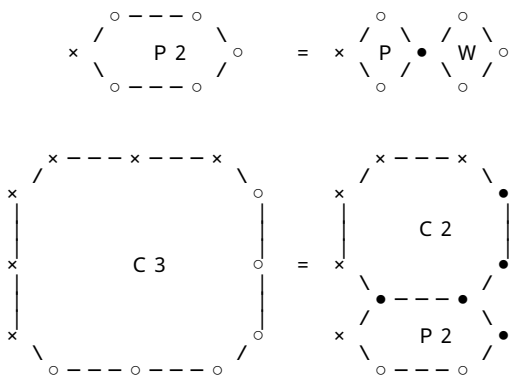
毒を食らわば皿まで、次は 84 個のスピンを含む系の分配関数を、24 個のスピンを含む角転送行列 $C_3(\sigma_a\sigma'_a\sigma''_a|\sigma_b\sigma'_b\sigma''_b)$ を使って $Z = \mathrm{Tr}\,(C_3)^4$ の形で求める。C_3 を求めるには、まず長さを伸ばした P を求めておいて

$$P_2\,(\sigma_a\sigma'_a|\sigma_b|\sigma_c\sigma'_c) = \sum_{\sigma} P(\sigma_a|\sigma|\sigma_c)W(\sigma\sigma'_a\sigma_b\sigma'_c) \tag{20}$$

(以後この手の式は $P\cdot W$ という風に略記する) これと C_2 と W を組み合わせれば良い。

$$C_3 = C_2\cdot P\cdot P\cdot W \tag{21}$$

P と C の拡大を図示すると、こんな風になる。



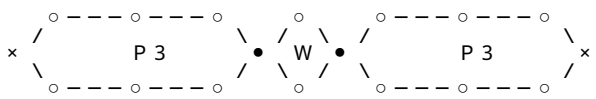
こうして、ドンドン拡大を続けて行くことによって、けっこう大きな系まで分配関数を 数値的にではあるが精密に 求めることが可能だ。

1 次元とのアナロジーで、2 次元系にも式 (9) のような変分関係式を持ち込める。まず、

$$T_{2N} = P_N \cdot P_N\,, \quad T_{2N+1} = P_N \cdot W \cdot P_N \tag{22}$$

は、それぞれ幅 $2N$ と $2N+1$ の無限に長い帯状の系に対する転送行列で、

例: $T_7 = T_{2*3+1}$



それに対して変分的な試行関数を

$$\Psi_{2N} = C_N \cdot C_N\,, \quad \Psi_{2N+1} = C_N \cdot P_N \cdot C_N \tag{23}$$

で与えておくと、転送行列の最大固有値の下限として

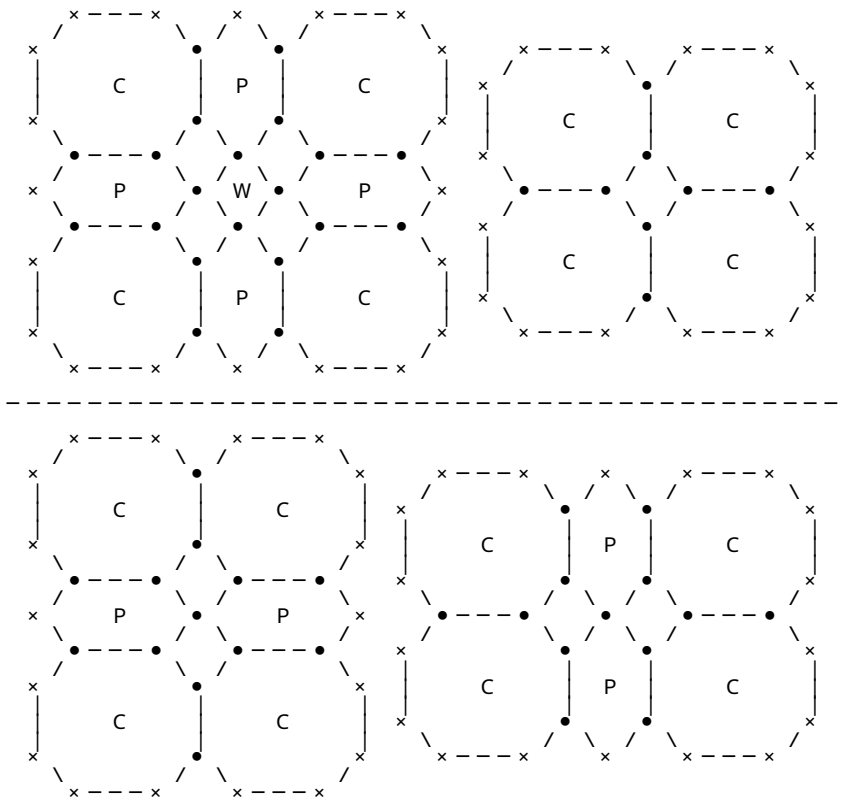
$$\lambda_{2N} = \frac{\Psi^*_{2N} T_{2N} \Psi_{2N}}{\Psi^*_{2N} \Psi_{2N}}\,, \quad \lambda_{2N+1} = \frac{\Psi^*_{2N+1} T_{2N+1} \Psi_{2N+1}}{\Psi^*_{2N+1} \Psi_{2N+1}} \tag{24}$$

が得られる。更に λ_{2N} と λ_{2N+1} の比を取ってみよう。

$$\gamma = \frac{\lambda_{2N+1}}{\lambda_{2N}} = \frac{(\Psi^*_{2N+1} T_{2N+1} \Psi_{2N+1})(\Psi^*_{2N} \Psi_{2N})}{(\Psi^*_{2N} T_{2N} \Psi_{2N})(\Psi^*_{2N+1} \Psi_{2N+1})} \tag{25}$$

式で見ると何ともゴチャゴチャしているけれども、γ は 1 サイトあたりの分配関数の近似値と解釈できることが、次図から読み取れるだろうか? (Baxter の教科書にも似た図が出て来る。)

例: $N = 2$ の場合



こうして、N を増やしつつ γ の挙動を見ることによって、$N \to \infty$ の極限を伺い知ることができる。但し、N 回目の拡張の後に得られる C_N は 2^N 次元行列なので、数値計算の助けを借りるにしても 段々と計算が困難になって行く。どないしよ?!

3　密度行列繰り込み群のブロックスピン変換

密度行列繰り込み群では、一列上に並んだ N 個のスピン $\sigma\,\sigma'\sigma''\sigma'''\ldots$ をより少ない自由度の 有効スピンへとマッピングすることを考える。

$$\{\sigma\,\sigma'\sigma''\sigma'''\ldots\} \to \eta \tag{26}$$

いま ブロックスピン変数 η は、1 から m までの状態を取り得るとしよう。ブロックスピン変換は線形行列 $A(\sigma\,\sigma'\sigma''\sigma'''\ldots|\eta)$ で表すのが通例で、A は

C_N や P_N に対して次のように作用する。

$$\begin{aligned} \tilde{C}_N(\xi|\eta) &= \sum C_N(\sigma_a \ldots|\sigma_b \ldots) A(\sigma_a \ldots|\xi) A(\sigma_b \ldots|\eta) \qquad (27) \\ \tilde{P}_N(\xi|\sigma_b|\eta) &= \sum P_N(\sigma_a \ldots|\sigma_b|\sigma_c \ldots) A(\sigma_a \ldots|\xi) A(\sigma_c \ldots|\eta) \end{aligned}$$

右辺のスピン変数の和は「2 度出て来るものについて和を取る」ことにする。(以下同様。) これらの式は A の転置行列 A^* を使うと、行列積の形 でもう少し簡潔に書き表せる。

$$\tilde{C}_N = A^* C_N A\,, \quad \tilde{P}_N = A^* P_N A \qquad (28)$$

形式上は $C_N \to \tilde{C}_N$ および $P_N \to \tilde{P}_N$ という 自由度を落とす変換 が書き下せた。残った問題は、有効な変換行列 A を見つけることである。一つの指針として

- 系の分配関数をなるべく変化させないこと

が考えられ、これに合致した変換 A は 密度行列の対角化 から得られることが知られている。ここで言う「密度行列」とは「そのトレースが系の分配関数を与えるもの」で、角転送行列の 4 乗は 密度行列の一例 になっている。

$$\rho = (C_N)^4\,, \quad \mathrm{Tr}\,\rho = \mathrm{Tr}\,(C_N)^4 = Z \qquad (29)$$

角転送行列 C_N は、いま考えている 2 次元 Ising 模型では対称行列だったので、ρ は直交変換 O を使って対格化可能だ。(非対称の場合は少し注意が必要)[6, 7]

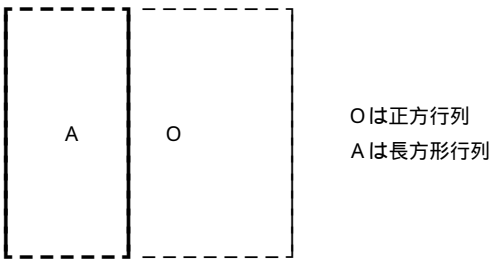
$$\rho(\sigma_a \ldots|\sigma_b \ldots) = \sum_\zeta \alpha_\zeta\, O(\sigma_a \ldots|\zeta)\, O(\sigma_b \ldots|\zeta) \qquad (30)$$

固有値 α_ζ は大きな順番で並べておくことにしよう。任意の整数 m について

$$Z = \mathrm{Tr}\,\rho = \sum_{\zeta=1}^{2^N} \alpha_\zeta \geq \sum_{\zeta=1}^{m} \alpha_\zeta = \tilde{Z} \qquad (31)$$

という 不等式 — 変分関係式 — が明らかに成立している。式 (29) から明らかなように。C_N と ρ は同じ固有ベクトルを持っていて、ρ の固有値 α_ζ は C_N の固有値の 4 乗、つまり全て正又はゼロになる。実際に α_ζ を計算してみると、最初の方に飛び抜けて大きなものが集まっていて、後ろの方の固有値はゴミのように小さいことが観察できる。従って、 m が充分に大きければ ζ を m 以下に制限して求めた $\tilde{Z}$ は Z の良い近似になっている。

O と A の関係



.... と、言うことは直交行列 $O(\sigma\ldots|\zeta)$ の $\zeta=1$ から $\zeta=m$ までをブロックスピン変換 $A(\sigma\ldots|\zeta)$ と見なせば「分配関数をできるだけ保存する」という、上に掲げた指針を実現することになる。例えば ρ 自身のブロックスピン変換は

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}(\xi|\eta) &= \sum A(\sigma_a\ldots|\xi)A(\sigma_b\ldots|\eta)\rho(\sigma_a\ldots|\sigma_b\ldots) \\ &= \delta_{\xi\eta}\alpha_\eta \end{aligned} \tag{32}$$

と m 次元対角行列になり、

$$\tilde{Z}=\mathrm{Tr}\,\tilde{\rho}=\mathrm{Tr}\,\left(A^*\rho A\right)=\mathrm{Tr}\,\left(AA^*\rho\right)=\mathrm{Tr}\,(\hat{P}\rho) \tag{33}$$

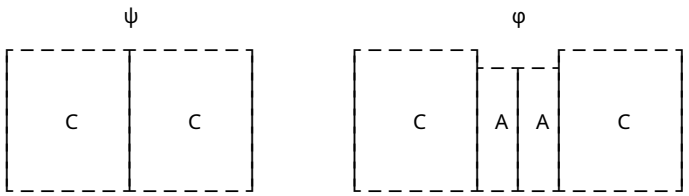
が成り立っている。なお、$\hat{P}=AA^*$ は $\hat{P}^2=\hat{P}$ を満たす 射影演算子 だ。(P_N と $\hat{P}$ が紛らわしい点は平にご容赦を。)

4 あとふたつの変分関係式

$\rho=(C_N)^4$ を対角化してブロックスピン変換 A を求める話には、式 (22) の転送行列 $T_{2N}=P_N\cdot P_N$ の "ての字" も出て来なかった。T_{2N} に登場してもらうには、転送行列固有値の変分的な評価 $\lambda_{2N}=\Psi^*_{2N}T_{2N}\Psi_{2N}/\Psi^*_{2N}\Psi_{2N}$ に目をつけるのがよい。変分関数は $\Psi_{2N}=C_N\cdot C_N$ で与えられていて、N が適当に大きければ Ψ_{2N} は T_{2N} の固有状態の良い近似になる。スピンの足までキッチリ書き表すと

$$\Psi_{2N}(\sigma_a\ldots;\sigma_c\ldots)=\sum C_N(\sigma_a\ldots|\sigma_b\ldots)\,C_N(\sigma_b\ldots|\sigma_c\ldots) \tag{34}$$

と足が並んでいるから、Ψ_{2N} も 2^N 次元行列だと考えて $\Psi_{2N}=(C_N)^2=C_NC_N$ と書いても誤解は生じないだろう。



今まで考えて来たブロックスピン変換は 一列に並んだスピン変数 を、1 個の有効スピン η に置き換えるものだったので、 $\Psi_{2N} = C_N C_N$ の「C_N と C_N のつなぎ目」に作用させることも可能だ。

$$\Phi_{2N} = C_N A A^* C_N = C_N \hat{P} C_N \tag{35}$$

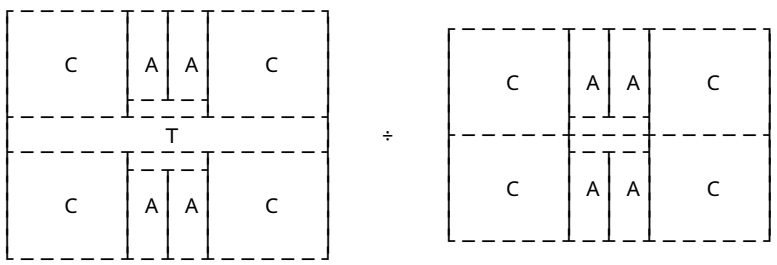
数式を見てわかるように Ψ_{2N} に対して 縦に射影演算子 $\hat{P}$ をはさんだ形 のものが Φ_{2N} で、「A が良い変換」ならば Φ_{2N} は Ψ_{2N} と大差なく、T_{2N} の良い変分関数になっているはずである。この考えを式で表すと、どうなるだろうか? まず思い浮かぶのは、変分固有値

$$\lambda = \frac{\Phi_{2N}^* T_{2N} \Phi_{2N}}{\Phi_{2N}^* \Phi_{2N}} = \frac{[C_N \hat{P} C_N]^* T_{2N} [C_N \hat{P} C_N]}{[C_N \hat{P} C_N]^* [C_N \hat{P} C_N]} \tag{36}$$

の極大条件で、 λ を最大化するような変換 A に対しては Φ_{2N} が Ψ_{2N} を良く近似していると 信じる のだ。これが 本稿で考える **2** 番目の変分原理 で

- 転送行列固有状態をなるべく保つように変換 A を定める

という指針を満たすべく、式 (36) の λ を最大化する A を ゴリゴリ数値的に探す のだ。(下図は式 (36) のグラフ表示)



もっと直接的に Ψ_{2N} とその近似 Φ_{2N} を見比べる方法がある。両方とも規格直交化して、内積を取るのだ。

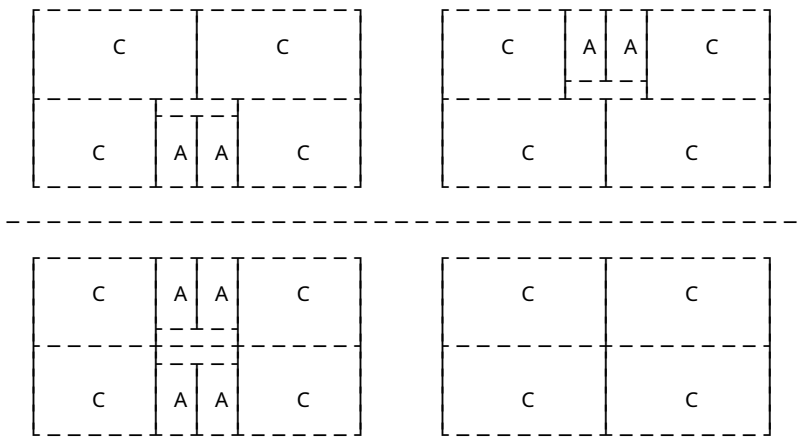
$$\frac{\Psi_{2N}^* \Phi_{2N}}{\sqrt{\Psi_{2N}^* \Psi_{2N}} \sqrt{\Phi_{2N}^* \Phi_{2N}}} \tag{37}$$

この量は、 Φ_{2N} が Ψ_{2N} の良い近似であれば、ほぼ 1 になる。このままでは見辛いので分母分子とも 2 乗すると、有名な シュワルツの不等式 が出て

来る。

$$1 \geq \frac{(\Phi_{2N}^* \Psi_{2N})(\Psi_{2N}^* \Phi_{2N})}{(\Psi_{2N}^* \Psi_{2N})(\Phi_{2N}^* \Phi_{2N})} \tag{38}$$

これが **3** 番目の変分原理 で、右辺ができるだけ 1 に近いという条件から A を決定することが可能だ。(グラフで示すと下図のようになる。)



最初に考えた **1** 番目の変分原理 (式 (31-33)) は分子に現れる

$$\Phi_{2N}^* \Psi_{2N} = [C_N \hat{P} C_N]^* [C_N C_N] = \mathrm{Tr}\,(C_N)^4 \hat{P} = \mathrm{Tr}\,\rho \hat{P} \tag{39}$$

だけを独立に最大化しようとする試みだとも考えられる。こうして、3 つの変分原理を考えて来たけれども、等方的 (に近い) 2 次元古典系では、系の形が四角や円盤だと

- どんな変分法から出発しても、得られる変換 A は大差ない

という 三位一体の法則 があり、3 種類も不等式を得る必要は特にない。しかし、系が筒状だったり、球面上に乗っていたりすると、馬脚が露呈して来るのだ。

5 筒上の 2 次元 Ising 模型

縦の長さが $2N$ で、周が L の筒型の 2 次元 (?) Ising 模型を考えよう。この系の分配関数は

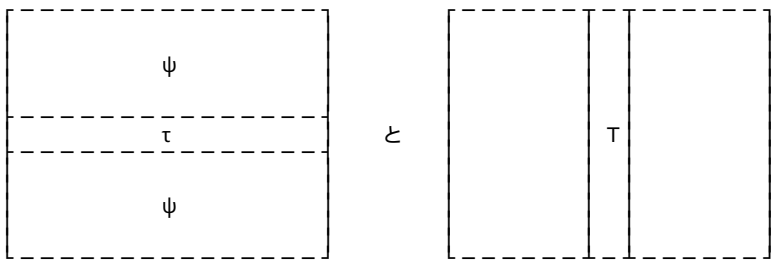
$$Z = \mathrm{Tr}\,(T_{2N})^L = \mathrm{Tr}\,(P_N \cdot P_N)^L \tag{40}$$

と 周の方向にスピンを転送する 転送行列を使って表せる。少し変形して、Z を二つの 2^L 次元のベクトルの内積で書いておこう。

$$\mathrm{Tr}\,(P_N \cdot P_N)^L = \left[\,\mathrm{Tr}\,(P_N)^L\,\right]^* \left[\,\mathrm{Tr}\,(P_N)^L\,\right] = \Psi_N^* \Psi_N \tag{41}$$

この式では $P_N(\sigma\ldots|\sigma'|\sigma''\ldots)$ を、σ' によって決定される 2^N 次元行列として取り扱った。イメージ的には半分に切った茶筒 が Ψ_N に相当している。

横幅 L (周期境界)、縦の長さ $2N+1$ (自由端) の筒型古典系



この系には 筒の縦方向にスピンを転送する 輪の形をした転送行列 τ もあって、実用上は τ の最大固有値を求めることが重要である。[6, 7] 以前との対応で、これの変分的な表現を求めておくと、次のようになる。

$$\lambda = \frac{\mathrm{Tr}\,(T_{2N+1})^L}{\mathrm{Tr}\,(T_{2N})^L} = \frac{\Psi_N^*\,\tau\,\Psi_N}{\Psi_N^*\,\Psi_N} = \frac{\Psi_N^*\,\Psi_{N+1}}{\Psi_N^*\,\Psi_N} \tag{42}$$

この τ に対してブロックスピン変換を作用させて、この変分問題を解決するのが「量子転送行列 DMRG」の名前で良くしられている実用上、成功している考え方 なのだけど、ここでは P_N の方に変換を作用させることに 固執しよう。(わざわざ「イバラの道」を進むのも一興。)

筒の縦方向の長さ $2N$ を大きくして行くと Ψ_N を $\mathrm{Tr}\,(P_N)^L$ から数値的に求めることが段々と困難になるので、$P_N \to \tilde{P}_N = A^* P_N A$ という形のブロックスピン変換を施す必要が出て来る。問題は、A をどうやって決定するかだ。P_N の積の中に、一カ所だけ 射影演算子 $\hat{P}$ を挟み込んだものを考えよう。

$$\Phi_N = \mathrm{Tr}\,(P_N)^L \hat{P} \tag{43}$$

本当は、あらゆる所に $\hat{P}$ を噛み込ませた $\mathrm{Tr}\,(P_N\hat{P})^L$ を考えるべき所なのだけど、それは更に難しい問題なので棚上げしておく。こう定義された Φ_N について、最大化すべきは

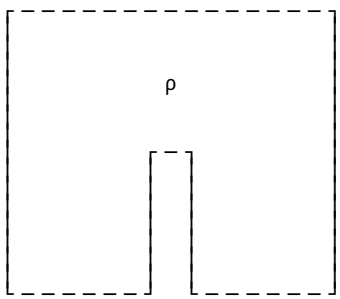
(甲) $\Phi_N^*\Psi_N = \mathrm{Tr}\,\rho\hat{P}$ か、それとも

(乙) $\Phi_N^*\,\tau\,\Phi_N/\Phi_N^*\Phi_N$ か、はてまた

(柄) $(\Phi_N^*\Psi_N)^2/(\Psi_N^*\Psi_N)(\Phi_N^*\Phi_N)$ か?

まず、 $\Phi_N^*\Psi_N$ を最大化する試みは 確実に失敗する。なぜか? というと、下図に示されている「茶筒を縦に半分だけ切り開いたもの」に相当する密度行列 ρ の固有値は、N が長くなるにつれて 全く減衰しなくなる からだ。

縦に切り開いた密度行列



これでは、スピン列を適当な m 状態変数に押し込めることが不可能になる。

- 密度行列 ρ の対角化が、良いブロックスピン変換を与えない

わけだ。この 残念な (?) 現象 には物理的な背景がある。系の相関長 ξ よりも N が長くなると、縦方向のスピン相関は皆無になってしまうけれども、周を回る方向の相関は L が一定なために N に関係なく存在する。つまり、長い筒は ほぼ独立な部分の寄せ集め と考えられるのだ。

- ほぼ独立な部分に分解できるのならば、筒型の転送行列 τ に接している部分だけを観察しなさい

という教訓が、ここから得られる。だからと言って、τ からどれだけ離れた所で筒を 腹切り すれば良いのか、それを明確に与える原理を探すことは難しい。密度行列の固有値が減衰しないという事情は、3 次元 Ising 模型のような、より高い次元の系にも共通しているので [8, 2]

- 密度行列繰り込み群は高次元では成功しない

と良く 噂される。本当かもしれない.... けど、少し議論に飛躍がある。正しくは「系全体の分配関数を最大化しようとする変分からアプローチを行い、密度行列を対角化して変換行列を得ようとする試みは成功しない」と言うべきであって、良い変換 A の存在まで否定している訳ではない。

筒型の系に話を戻すと、$\Psi_{N+1} = \tau\Psi_N$ という関係があるので、2 番目と 3 番目の変分原理 (乙と柄) は N が充分に大きければ「ほぼ同じ」になる。(微妙な違いは残る。) 実際に、シュワルツの不等式を「より良く満たす」変換 A を、数値計算で ゴリゴリ探索する ことによって求めて、これを使って Φ_N および τ の変分期待値 $\lambda = \Phi_N^* \tau \Phi_N / \Phi_N^* \Phi_N$ を求めてみると、良い結果が得られる。[9]

- 密度行列対角化がうまく機能しない場合でも、良いブロックスピン変換は存在する可能性がある

という一例がここにあるのだ。

6 積み残したこと

シュワルツ不等式の計算には、変換行列 A に対して 4 次のスカラーが登場する。従来の密度行列繰り込み群では、同様の量が A の 2 次だったので、単純に密度行列対角化しか取り扱わなくて済んだのだけど、4 次の問題に対角化は歯が立たない。そこで 数値計算に逃げ込んで A を探したのだけど、恐ろしい量の計算が必要になり、実用的とは言えない。古典系で (部分的ではあるが) 既に成功しているように、[?] 非線形問題を自己無矛盾な線形方程式の反復計算で漸近的に解いて行くアルゴリズムの発見が必要不可欠だ。

最後に取り扱った筒型の 2 次元古典系は、あくまでも思考実験の為の模型であって、本当の狙いは 3 次元古典系や 2 次元量子系に対して「良いブロックスピン変換を生成する」ことにある。ボチボチ仕事を進めて行きたい。

情報窓口: 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下さい。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.

[3] T. Nishino: J. Phys. Soc. Jpn. **64** (1995) 3598.

[4] R.J. Baxter, J. Math. Phys. **9** (1968), 650; J. Stat. Phys. **19** (1978), 461; *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (AcademicPress, London, 1982), p.363.

[5] T. Nishino and K. Okunishi, J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996) 891; J. Phys. Soc. Jpn. **66**(1997) 3040.

[6] X. Wang and T. Xiang: Phys. Rev. **B56** (1997) 5061.

[7] N. Shibata: J. Phys. Soc. Jpn **66** (1997) 2221; J. Phys. A: Math. Gen. vol.36 (2003) R381.

[8] Ming-Chiang Chung, and Ingo Peschel; Phys. Rev. B 64 (2001) 064412

[9] in preparation (for ever?)