

# 集中講義「密度行列繰込み群 — 計算の原理を中心に」

日時：2007 年

7 月 11 日（水）3 限, 4 限, 5 限

7 月 12 日（木）2 限, 3 限, 4 限

7 月 13 日（金）2 限,

4 限に「3 年生向けセミナー」1 粒子系から学ぶ密度行列繰込み群とその威力”)

場所：大阪大学大学院理学研究科物理学専攻

語り：西野友年（神戸大学理学部・ゼロから学ぶ物理学専攻）

校閲：白井さん（2008.11.14 正誤表に基づき訂正）

## 1 講義の進め方

密度行列繰込み群 (Density Matrix Renormalization Group, DMRG) は 1992 年、S.R White によって編み出された 実空間数値繰込み群 (Real Space Renormalization Group, RSRG) で、100 サイト超の量子スピン鎖など比較的「大規模」な 1 次元量子系の基底状態・基底エネルギーを厳密対角化に肉迫する（完全に一緒ではない）精度で求めることを可能にした。<sup>1</sup> この講義の目的は

- DMRG を学びたい、使ってみたいという方の背中を（清水の舞台から）トンと押す。
- DMRG なんか使いたくない — という方にも実空間繰込み群の面白さを知ってもらおう。
- DMRG に関心はないけど講義の単位は欲しいという人への手助け。

の 3 点に絞りたい。そこで、なるべく予備知識が必要ないよう、DMRG の遠い親戚であるブロック繰込み群 (Block Renormalization Group, BRG) から話を始め、「この手の実空間繰込み群」が総じて 変分法 の一種である事実を示す。（ここまでは数値計算と関係ない。）次に、ブロック繰込み群の兄弟である「Wilson の数値繰込み群」(Numerical Renormalization Group, NRG) を経て、DMRG へと少しづつ話を進めて行く。時間があれば近年の発展

- 量子系の励起スペクトルを求める方法 (Dynamical DMRG, D-DMRG)
- 量子系の時間発展を求める方法 (Real Time DMRG, t-DMRG)
- 量子エントロピーとの関わり

や、古典スピン系への DMRG の応用についても触れたい。

---

<sup>1</sup> S. R. White: Phys. Rev. Lett. 69 (1992) 2863; Phys. Rev. B48 (1993) 10345.

## 2 実空間くりこみ群

密度行列繰込み群 (DMRG) を学ぶには、まず ブロック繰込み群 (BRG) と呼ばれる実空間繰込み群の一種から習い始めるのが良いだろう。その元祖は

S.D. Drell, M. Weinstein, S. Yankielowicz, Phys. Rev. D 16, 1769 (1977)  
 "Quantum field theories on a lattice: Variational methods for arbitrary coupling strengths and the Ising model in a transverse magnetic field"

あたりで、P. Pfeuty (PRB18, 3568 (1978)) や J.E. Hirsch (PRB22, 5259 (1980)) など低次元格子系の研究者達がこれに飛びついた経緯がある。横磁場 Ising 模型は、あまり親しみのないモデルだと思うので、講義では 1 次元  $S = 1/2$  反強磁性 Heisenberg 模型 ( $N$  サイト・ゼロ磁場) を解析対象とする。

Heisenberg 模型のハミルトニアンを次式で与える。(人によって定義が 2 倍や 4 倍違っている場合があるので要注意。)

$$\begin{aligned} H_N &= J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + \cdots + \mathbf{S}_{N-1} \cdot \mathbf{S}_N) = J \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \\ &= J \sum_{i=1}^{N-1} \left( S_i^Z S_{i+1}^Z + \frac{1}{2} S_i^+ S_{i+1}^- + \frac{1}{2} S_i^- S_{i+1}^+ \right) \end{aligned} \quad (2.1)$$

この系は  $N$  が無限に大きいか、または適当な境界条件の下で「厳密に解ける」のであらゆる近似計算の比較対象として良く引き合いに出される。また、数値計算による取り扱いも容易である。各サイトに存在するスピンは、上向き  $S_i^Z = 1/2$  と下向き  $S_i^Z = -1/2$  の 2 状態を取るので、ハミルトニアンの行列次元は  $2^N$  となる。<sup>2</sup>  $N$  が 16 ~ 20 程度までであれば、ハミルトニアンを数値対角化することにより全固有値・全固有状態を十分な精度で求めることができる。ランチョス法など反復法による行列対角化を導入すると、 $N$  が 30 程度までの系について、基底エネルギー  $E_N^{(0)}$  を求めることができる。もっと  $N$  が大きい場合に  $E_N^{(0)}$  を求めたいならば?! そういう要望があれば、そろそろブロック繰込み群にお声がかかる。

### 【系のブロックへの分割】

これから「入門編として学んで行くブロック繰込み群」では、 $E_N^{(0)}$  の近似値を求める下準備として 3 サイトの系の基底エネルギー  $E_3^{(0)}$  と対応する基底状態を、まず求めておく。これらを使って、系のサイズ  $N$  が「3 のべき乗個」<sup>3</sup> の場合を取り扱おうという下心がある。先に「秘法」をまとめておこう。

- 系を 3 サイトずつのブロックに区切って取り扱う。  
 $\cdots \quad \cdots = \cdots \left[ \quad \right] \left[ \quad \right] \left[ \quad \right] \cdots$
- ブロック内の重要な状態 — 低エネルギー状態 — のみを選択する。(繰込み群変換の一例)  
 $\left[ \quad \right] \left[ \text{基} \right]$   
 つまり、重要ではない状態 — 高エネルギー状態 — を捨てることによって系の自由度を落とす。
- この「自由度圧縮操作」(繰込み群変換) を再帰的に繰り返す。  
 $\left[ \quad \right] \left[ \quad \right] \left[ \quad \right] \left[ \text{基基基} \right] \left[ \text{基} \right]$
- 以上を通じて系の基底状態 (又は熱平衡状態) を近似的に求める。

$N = 3$  の場合の Heisenberg ハミルトニアン

$$H_3 = J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3) \quad (2.2)$$

<sup>2</sup> ハミルトニアンがブロック対角に表現できるので、実はより小さな次元の行列の集まりとして取り扱うことが可能である。

<sup>3</sup> 任意の奇数のべき乗個でも良い。何個のスピンをブロックとして取り扱うかは、経験とカンを頼りにして決定する。

は行列で表すと 8 行 8 列の対称行列となる。

$$H_3 = \frac{J}{4} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & -2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{matrix} \cdots | \uparrow \uparrow \uparrow \rangle \\ \cdots | \downarrow \uparrow \uparrow \rangle \\ \cdots | \uparrow \downarrow \uparrow \rangle \\ \cdots | \downarrow \downarrow \uparrow \rangle \\ \cdots | \uparrow \uparrow \downarrow \rangle \\ \cdots | \downarrow \uparrow \downarrow \rangle \\ \cdots | \uparrow \downarrow \downarrow \rangle \\ \cdots | \downarrow \downarrow \downarrow \rangle \end{matrix} \quad (2.3)$$

行列の右側に添えてある |ケット〉は、Z 方向を量子化軸に取ったスピン基底 — イジング基底  $|S_1^Z S_2^Z S_3^Z\rangle$  — を矢印で表したもので、例えば  $|\uparrow \uparrow \uparrow\rangle$  は  $|\frac{+1}{2} \frac{-1}{2} \frac{+1}{2}\rangle$  に相当する。スピンの並びは、左から  $S_1, S_2, S_3$  の順に描いてある。この行列は、ちょっと並べ替えると

$$H'_3 = \frac{J}{4} \begin{pmatrix} 2 & & & & & & & \\ & 0 & 2 & 0 & & & & \\ & 2 & -2 & 2 & & & & \\ & 0 & 2 & 0 & & & & \\ & & & & 0 & 2 & 0 & \\ & & & & 2 & -2 & 2 & \\ & & & & 0 & 2 & 0 & \\ & & & & & & & 2 \end{pmatrix} \begin{matrix} \cdots | \uparrow \uparrow \uparrow \rangle \\ \cdots | \downarrow \uparrow \uparrow \rangle \\ \cdots | \uparrow \downarrow \uparrow \rangle \\ \cdots | \downarrow \downarrow \uparrow \rangle \\ \cdots | \uparrow \uparrow \downarrow \rangle \\ \cdots | \downarrow \uparrow \downarrow \rangle \\ \cdots | \uparrow \downarrow \downarrow \rangle \\ \cdots | \downarrow \downarrow \downarrow \rangle \end{matrix} \quad (2.4)$$

一目瞭然、ブロック対角になっているので容易に対角化できる。物理的な考察を通じて  $H_3$  の固有状態を求めよう。 $H_3$  は全スピン  $S_{\text{tot}} = S_1 + S_2 + S_3$  を保存する。従って、明らかに  $|\uparrow \uparrow \uparrow\rangle$  は  $E = J\left(\frac{1}{4} + \frac{1}{4}\right) = J/2$  の固有状態で、これに  $S_{\text{tot}}^- = S_1^- + S_2^- + S_3^-$  を次々と作用させて作った状態

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\left(|\downarrow \uparrow \uparrow\rangle + |\uparrow \downarrow \uparrow\rangle + |\uparrow \uparrow \downarrow\rangle\right) \text{ や } \frac{1}{\sqrt{3}}\left(|\downarrow \downarrow \uparrow\rangle + |\downarrow \uparrow \downarrow\rangle + |\uparrow \downarrow \downarrow\rangle\right) \text{ や } |\downarrow \downarrow \downarrow\rangle \quad (2.5)$$

も同じく  $E = J/2$  の固有状態である。ダブレット

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\downarrow \uparrow \uparrow\rangle - |\uparrow \uparrow \downarrow\rangle\right) \text{ と } \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\downarrow \downarrow \uparrow\rangle - |\uparrow \downarrow \downarrow\rangle\right) \quad (2.6)$$

が  $E = 0$  の励起状態であることも、容易に確かめられる。これら 6 つの「励起状態」に直交した状態を探すと、以下の通り  $E_3^{(0)} = -J$  の「基底状態」が求まる。

$$\begin{aligned} |\uparrow_{123}\rangle &\equiv \frac{1}{\sqrt{6}}\left(|\downarrow \uparrow \uparrow\rangle - 2|\uparrow \downarrow \uparrow\rangle + |\uparrow \uparrow \downarrow\rangle\right) \\ |\downarrow_{123}\rangle &\equiv \frac{-1}{\sqrt{6}}\left(|\downarrow \downarrow \uparrow\rangle - 2|\downarrow \uparrow \downarrow\rangle + |\uparrow \downarrow \downarrow\rangle\right) \end{aligned} \quad (2.7)$$

運が良いことに (?) この 2 つの縮退した状態は、 $S_{\text{tot}} = 1/2$  のダブレットになっている。<sup>4</sup> この事実を用いると、3 つのスピンからなる「ブロック」の基底状態を、1 つの  $S = 1/2$  量子スピンの 2 状態  $|\uparrow_{123}\rangle$  や  $|\downarrow_{123}\rangle$  と見立てることができる。こういう風に「スピンの集団」があたかも 1 個のスピンのように振舞うもの (と、その自然な拡張) を **ブロックスピン** と呼ぶ。<sup>5</sup> ひとまず整理しておこう。

<sup>4</sup> ブロック内部に偶数個のスピンがあれば、こううまくは行かない。より大きな  $S$  を持つ模型でも「解析的に取り扱えるような」うまいブロック化はなかなか難しい。

<sup>5</sup> 今の場合、元々の  $S = 1/2$  スピンとブロックスピンの「同じ自由度」を持っている。後ほどブロックスピンの概念を一般化させ、元々のサイト変数よりもブロックスピンの自由度の方が大きな場合について学ぶ。

- 3 サイト系には 8 つの固有状態がある。うち 6 つは励起状態である。
- $E = -J$  の基底状態 2 つを、ブロックスピンの 2 状態  $|\uparrow_{123}\rangle, |\downarrow_{123}\rangle$  として扱う。<sup>6</sup>

$S_1, S_2, S_3$ , の 3 スピンからブロックスピンを構成したので、これを  $S_{123}$  という記号で表しておこう。

$$\{S_1, S_2, S_3\} \rightarrow S_{123} \quad (2.8)$$

#### 【変換行列】

式 (2.7) で模式的に書いた変換を「実空間の繰込み群変換」またはブロックスピン変換と呼ぶ。変換というものの背後には変換行列がある。ブロックスピン変換は、8 つある 3 スピン系の状態

$$\begin{aligned} |0\rangle &= |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle, & |1\rangle &= |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle, & |2\rangle &= |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle, & |3\rangle &= |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, \\ |4\rangle &= |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle, & |5\rangle &= |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, & |6\rangle &= |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, & |7\rangle &= |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (2.9)$$

を式 (2.6) の  $|\uparrow_{123}\rangle$  と  $|\downarrow_{123}\rangle$  に押し込む変換なので、 $\langle i | \uparrow_{123}\rangle$  と  $\langle i | \downarrow_{123}\rangle$  (但し  $i = 0 \sim 7$ ) をそれぞれの列ベクトルの要素として持つ行列

$$A_{123} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\ 1 & 0 & \cdots & |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\ -2 & 0 & \cdots & |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \\ 0 & -1 & \cdots & |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\ 1 & 0 & \cdots & |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\ 0 & 2 & \cdots & |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \\ 0 & -1 & \cdots & |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\ 0 & 0 & \cdots & |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

が、変換行列となる。変換行列  $A$  は、規格化してある基底波動関数を用いて構成してあるので、

$$A_{123}^\dagger A_{123} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

が成立する。また、後々の準備として射影演算子 (の行列表現) も定義しておこう。

$$P \equiv A_{123} A_{123}^\dagger \quad (2.12)$$

$P$  は 8 行 8 列の行列なのだけど、行列のランクは 2 しかない。また、

$$P^2 = A_{123} A_{123}^\dagger A_{123} A_{123}^\dagger = A_{123} (A_{123}^\dagger A_{123}) A_{123}^\dagger = A_{123} A_{123}^\dagger = P \quad (2.13)$$

からわかるように、 $P$  のベキ乗は  $P$  に等しい。3 サイト系のハミルトニアン  $H_3$  (式 (2.2)) を  $A$  によって相似変換すると、2 行 2 列の対角行列となる。

$$A_{123}^\dagger H_3 A_{123} = \begin{pmatrix} \langle \uparrow_{123} | H_3 | \uparrow_{123} \rangle & \langle \uparrow_{123} | H_3 | \downarrow_{123} \rangle \\ \langle \downarrow_{123} | H_3 | \uparrow_{123} \rangle & \langle \downarrow_{123} | H_3 | \downarrow_{123} \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -J & 0 \\ 0 & -J \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

このように

- 「ブロック内部のハミルトニアン」が対角となる変換を用いる

<sup>6</sup> ここで示したブロックスピンは 1 次元量子系のもので、古典統計モデルで行われる「多数決原理」によるマッピングとは少し毛色が違う。

のが、ブロック繰込み群の特徴の1つである。(DMRG では対角にならない。) 自由度を落とすブロックスピン変換は「多対1」の変換で、励起状態に関する情報は残さない。これは、式 (2.10) の変換行列のランクが2で、元のヒルベルト空間の次元8よりも小さいことに対応している。

### 【ブロックスピンの性質】

ブロックスピンとして考慮する、3 サイト系の基底状態をもう少し調べておこう。 $S_1$  や  $S_3$  の Z 方向へのスピン偏極は次式で与えられる。(これは手計算で確かめてみて下さい。)

$$\langle \uparrow_{123} | S_1^Z | \uparrow_{123} \rangle = \langle \uparrow_{123} | S_3^Z | \uparrow_{123} \rangle = \frac{1}{6}(-1 \cdot \frac{1}{2} + 4 \cdot \frac{1}{2} + 1 \cdot \frac{1}{2}) = \frac{1}{3} \quad (2.15)$$

「生の」スピンの期待値  $\langle \uparrow | S^Z | \uparrow \rangle = 1/2$  に比べると、少し小さな期待値となる。前式の計算は、先ほど求めておいた変換行列  $A$  を使うと<sup>7</sup> 次のように行列の変換として書き表すこともできる。

$$A_{123}^\dagger S_3^Z A_{123} = \begin{pmatrix} 1/3 & 0 \\ 0 & -1/3 \end{pmatrix} = \frac{2}{3} S_{123}^Z \quad (2.16)$$

但し、 $S_3^Z$  は 8 次元の対角行列  $\text{diag}\{1, 1, 1, 1, -1, -1, -1, -1\}$  であると考えた。同様に、次式も成立する。(ウイグナー・エッカルトの定理を使うと、簡単に示すことができる。)

$$\langle \uparrow_{123} | S_1^+ | \downarrow_{123} \rangle = \langle \uparrow_{123} | S_3^+ | \downarrow_{123} \rangle = \frac{1}{6}(2+2) = \frac{2}{3} \quad (2.17)$$

こちらも、行列表現しておこう。

$$A_{123}^\dagger S_3^+ A_{123} = \begin{pmatrix} 0 & 2/3 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{2}{3} S_{123}^+ \quad (2.18)$$

まとめると  $A_{123}^\dagger S_3 A_{123} = (2/3) S_{123}$  と1行で表せてしまう。このように、ブロックスピンを「構成する」個々のスピン演算子の期待値や行列要素は、ブロックスピン変換から導くことができる。(但し、いつでも単純な演算子の形に美しく整理できるとは限らない)

### 【6 サイトの系】

3 サイトずつのブロック  $\{S_1, S_2, S_3\}$  と  $\{S_4, S_5, S_6\}$  を合わせて、 $S_1$  から  $S_6$  までの6 サイト系を構成してみよう。ハミルトニアンの方も、それに合わせた形で書き表す。

$$\begin{aligned} H_6 &= J(S_1 \cdot S_2 + S_2 \cdot S_3) + JS_3 \cdot S_4 + J(S_4 \cdot S_5 + S_5 \cdot S_6) = H_6^0 + H' \\ H_6^0 &= J(S_1 \cdot S_2 + S_2 \cdot S_3) + J(S_4 \cdot S_5 + S_5 \cdot S_6) \\ H' &= JS_3 \cdot S_4 = JS_3^Z S_4^Z + \frac{J}{2}(S_3^+ S_4^- + S_3^- S_4^+) \end{aligned} \quad (2.19)$$

$H_6$  の行列次元は  $2^6 = 64$  で、マトモに取り扱うと死ぬ。そこで、「左右2つの3サイトブロック」を橋渡しする  $JS_3 \cdot S_4$  を 摂動ハミルトニアン として取り扱ってみよう。(実は、この摂動計算を理解しておくことはDMRGの学習には重要なポイントなのだ。) 無摂動状態、つまり  $H_6^0$  の基底エネルギーは  $2E_3^{(0)} = -2J$  で、縮退した基底状態は先に定義したブロックスピンを用いて次のように与えられる。

$$|\uparrow_{123}\rangle|\uparrow_{456}\rangle, \quad |\uparrow_{123}\rangle|\downarrow_{456}\rangle, \quad |\downarrow_{123}\rangle|\uparrow_{456}\rangle, \quad |\downarrow_{123}\rangle|\downarrow_{456}\rangle, \quad (2.20)$$

ブロックスピン  $S_{123}, S_{456}$  と、元々のスピンの関係は、例えば  $|\uparrow_{123}\rangle|\uparrow_{456}\rangle$  では次のようになっている。

$$\begin{aligned} |\uparrow_{123}\rangle|\uparrow_{456}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}(|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - 2|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) \frac{1}{\sqrt{6}}(|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - 2|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) \\ &= \frac{1}{6}(|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - 2|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle) + \text{ほか6項} \end{aligned} \quad (2.21)$$

<sup>7</sup> オペレーターと、その行列表現は、面倒なのでいちいち区別せずにごっちゃに表現します。

式 (2.15) で挙げた 4 つの状態で張られる空間内で、摂動項  $JS_3 \cdot S_4$  の行列要素を求めてみよう。(これは、量子力学で学んだ?! 縮退がある場合の摂動計算である。)

$$\begin{aligned}
\langle \uparrow_{123} | \langle \uparrow_{456} | JS_3 \cdot S_4 | \uparrow_{123} \rangle | \uparrow_{456} \rangle &= \langle \uparrow_{123} | \langle \uparrow_{456} | JS_3^Z S_4^Z | \uparrow_{123} \rangle | \uparrow_{456} \rangle \\
&= J \langle \uparrow_{123} | S_3^Z | \uparrow_{123} \rangle \langle \uparrow_{456} | S_4^Z | \uparrow_{456} \rangle \\
&= J \frac{1}{3} \frac{1}{3} = \frac{J}{9} = \frac{4}{9} \frac{J}{4}
\end{aligned} \tag{2.22}$$

同様に (これまた、ウイグナー・エッカルトの定理より明らかなのだけど) 次式が成立する。

$$\begin{aligned}
\langle \uparrow_{123} | \langle \downarrow_{456} | JS_3 \cdot S_4 | \downarrow_{123} \rangle | \uparrow_{456} \rangle &= \langle \uparrow_{123} | \langle \downarrow_{456} | \frac{J}{2} S_3^+ S_4^- | \downarrow_{123} \rangle | \uparrow_{456} \rangle \\
&= \frac{J}{2} \langle \uparrow_{123} | S_3^+ | \downarrow_{123} \rangle \langle \downarrow_{456} | S_4^- | \uparrow_{456} \rangle \\
&= \frac{J}{2} \frac{2}{3} \frac{2}{3} = \frac{2J}{9} = \frac{4}{9} \frac{J}{2}
\end{aligned} \tag{2.23}$$

以上の 2 式は、摂動ハミルトニアン  $JS_3 \cdot S_4$  がブロックスピン  $S_{123}$  と  $S_{456}$  の間のハイゼンベルグ相互作用として表せることを意味している。但し、相互作用定数は  $J$  ではなく、その  $(2/3)^2 = 4/9$  倍に小さくなっている

$$JS_3 \cdot S_4 \rightarrow \frac{4}{9} J S_{123} \cdot S_{456} \tag{2.24}$$

摂動ハミルトニアンを対角化すると、式 (2.15) に示した 4 つの状態間の縮退は解け、近似的な基底状態のエネルギーとして  $-2J - \frac{3}{4} \frac{4}{9} J = -(2 + \frac{1}{3})J$  を得る。<sup>8</sup>

摂動を使ったので、少し議論がゴチャゴチャしたけれども、実は変換行列  $A$  を使うとスッキリと整理することができる。 $S_{123}$  を作る変換  $A_{123}$  と、 $S_{456}$  を作る変換  $A_{456}$  の「テンソル積」

$$A_{1\sim 6} = A_{123} A_{456} \tag{2.25}$$

を  $H_6$  に作用させると、難なくブロックスピン変換されたハミルトニアンを得る。

$$\begin{aligned}
A_{1\sim 6}^\dagger H_6 A_{1\sim 6} &= A_{123}^\dagger J(S_1 \cdot S_2 + S_2 \cdot S_3) A_{123} + A_{456}^\dagger A_{123}^\dagger JS_3 \cdot S_4 A_{123} A_{456} \\
&+ A_{456}^\dagger J(S_4 \cdot S_5 + S_5 \cdot S_6) A_{456} \\
&= -2J + J \left( A_{123}^\dagger S_3 A_{123} \right) \cdot \left( A_{456}^\dagger S_4 A_{456} \right) \\
&= -2J + \frac{4}{9} J S_{123} \cdot S_{456} \\
&= \tilde{H}_6
\end{aligned} \tag{2.26}$$

このような、ブロックスピンの導入に伴うハミルトニアンのマッピングを

- ハミルトニアンに対するブロックスピン変換 / 繰込み群変換

と表現する。

## 【9 サイトの系】

ブロック 3 つ  $\{S_1, S_2, S_3\}$ ,  $\{S_4, S_5, S_6\}$ ,  $\{S_7, S_8, S_9\}$  を合わせて、 $S_1$  から  $S_9$  までの 9 サイト系を構成し、摂動的に扱ってみよう。この場合、ブロック間を接続する摂動項は  $JS_3 \cdot S_4 + JS_6 \cdot S_7$  となる。前節で示したように、摂動項は結局のところブロックスピン間のハイゼンベルグ相互作用となる。これは、式

<sup>8</sup> この値は、6 サイト系の基底エネルギー  $E_6^{(0)}$  よりも高い。

(2.22) の拡張として、変換行列  $A = A_{123}A_{456}A_{789}$  を用いて  $H_9$  をブロックスピン変換すると簡単に示すことができる。

$$\begin{aligned} H_9 &= J \sum_{i=1}^8 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \\ \rightarrow \tilde{H}_9 &= A^\dagger H_9 A = -3J + \frac{4}{9} \{ J\mathbf{S}_{123} \cdot \mathbf{S}_{456} + J\mathbf{S}_{456} \cdot \mathbf{S}_{789} \} \end{aligned} \quad (2.27)$$

これは「巧妙なトリック」で、9 サイト系を 3 サイトずつのブロックに区切った結果として、

- ブロックスピンを 3 つ含む Heisenberg スピン系を得た

のである。 $\tilde{H}_9$  の基底状態はブロックスピンにより構成される  $S = 1/2$  ダブルレット

$$\begin{aligned} |\uparrow_{1\sim 9}\rangle &\equiv \frac{1}{\sqrt{6}} (|\downarrow_{123}\uparrow_{456}\uparrow_{789}\rangle - 2|\uparrow_{123}\downarrow_{456}\uparrow_{789}\rangle + |\uparrow_{123}\uparrow_{456}\downarrow_{789}\rangle) \\ |\downarrow_{1\sim 9}\rangle &\equiv \frac{-1}{\sqrt{6}} (|\downarrow_{123}\downarrow_{456}\uparrow_{789}\rangle - 2|\downarrow_{123}\uparrow_{456}\downarrow_{789}\rangle + |\uparrow_{123}\downarrow_{456}\downarrow_{789}\rangle) \end{aligned} \quad (2.28)$$

で与えられ、そのエネルギーは

$$\tilde{E}_9^{(0)} = -3J + \frac{4}{9}(-J) \quad (2.29)$$

となる。 $\tilde{E}_9^{(0)}$  は状態の自由度をブロックスピン変換によって落として求めたものなので、真の基底エネルギー  $E_9^{(0)}$  よりも高くなっている。(← 変分計算としての側面)

#### 【27 サイト、81 サイト、そして無限へ】

式 (2.24) のダブルレットは、3 つのブロックスピンから構成される「超」ブロックスピンとみなすことができる。これで議論が振り出しに戻った。ブロックスピン変換を再帰的に使うことにより、27 サイト系の摂動ハミルトニアンを同様に得ることができる。

$$H_{27} = J \sum_{i=1}^{26} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rightarrow \tilde{H}_{27} = -3^2 J + 3 \frac{4}{9}(-J) + \left(\frac{4}{9}\right)^2 \{ J\mathbf{S}_{1\sim 9} \cdot \mathbf{S}_{10\sim 18} + J\mathbf{S}_{10\sim 18} \cdot \mathbf{S}_{19\sim 27} \} \quad (2.30)$$

このようにブロックを「3 倍ゲーム」で拡大しながら、元々の系が持っていた局所的な相互作用をブロック間の有効相互作用へと繰込んで行くのが、ブロック繰込み群の正体だ。毒を食らわば 81 サイト、同様に計算を進めて行こう。

$$\tilde{H}_{81} = -3^3 J + 3^2 \frac{4}{9}(-J) + 3 \left(\frac{4}{9}\right)^2 (-J) + \left(\frac{4}{9}\right)^3 \{ J\mathbf{S}_{1\sim 9} \cdot \mathbf{S}_{10\sim 18} + J\mathbf{S}_{10\sim 18} \cdot \mathbf{S}_{19\sim 27} \} \quad (2.31)$$

十分に大きな  $3^M$  サイト (但し  $M$  は正の整数) で基底エネルギーの近似値を求めると、

$$\tilde{E}_{3^M}^{(0)} = -3^{M-1} J \{ 1 + (4/27) + (4/27)^2 + (4/27)^3 + \dots \} \sim -3^M J \times \frac{9}{23} \quad (2.32)$$

つまり、無限系ではサイトあたりの基底エネルギーの近似値が  $-9J/23 = 0.39130\dots \times J$  となる。苦労した割には (!) Bethe-Hulthén の厳密解

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E_N^0}{N} = -J \log 2 + \frac{J}{4} = 0.44314718\dots \times J \quad (2.33)$$

に遠く及ばない結果しか出ない。

ブロック繰込み群の改善方法は幾つかある。ブロックを 3 サイトではなく、5 サイトや 7 サイトなど任意の奇数サイトに拡張すると、基底エネルギーの近似値は少しづつ改善して行く。けれども、

- ブロック内のスピンを多く取るほど、ブロック間を接続する摂動項の数が少なくなり、再帰的な繰込み群変換のご利益が減る

という欠点もまた生じる。そもそも、誤差の原因はブロック内の励起状態を無視した ことにあるのだから、ブロック内の状態を  $S = 1/2$  ダブルットの 2 つだけでなく、

- 低エネルギー励起状態もブロックスピントドンドン取り込んで計算する

という方法もあり得る。例えば 3 サイトのブロックについて述べると、8 つのブロック内状態から、 $E = -J$  の基底ダブルットと、 $E = 0$  の「もう一組のダブルット」から 4 状態のブロックスピンを構成するのである。<sup>9</sup> この場合、解析的な計算は無理なので数値計算の手を借りることになる ..... が、やってみると結果は思わしくない。(その理由は、後ほど明らかになる。) こういう忌わしい記憶 もあって、

- 実空間繰り込み群とは精度の悪い計算の代名詞

と考える人も多かった。<sup>10</sup>

<sup>9</sup> この拡張において、ブロックスピンは元々の  $S = 1/2$  スピンとは似ても似つかないものになる。摂動ハミルトニアン の形も、もはや Heisenberg 相互作用ではなくなる。

<sup>10</sup> もちろん、モンテカルロ繰込みや Wilson RG など実用に耐える実空間繰込みも存在したし、時を同じくして Baxter が虎視眈々と実空間繰込み群を「近代化」していたので、これは思い込み の一種である。



### 3 Wilson の「実空間」繰込み群

繰込み群の開祖、K.G. Wilson が近藤不純物問題に適用した実空間繰込み群の方法は、今日「数値繰込み群 (Numerical RG, NRG)」と呼ばれている。<sup>11</sup> ( Rev. Mod. Phys. 47, 773 (1975) ) 前章で取り扱った「3 サイトのブロック化」の考え方の延長として、NRG を学んでみよう。DMRG 学習の下準備としても良い題材である。

#### 【空間依存性を持つハミルトニアン】

(解析的に話を済ませたいという講師の勝手な都合により) 空間依存性を持った Heisenberg ハミルトニアンを考えよう。次式のように 3 番目のボンドから、相互作用の強さが順に 2/3 倍になって行くものだ。

$$H = JS_1 \cdot S_2 + JS_2 \cdot S_3 + \frac{2}{3}JS_3 \cdot S_4 + \left(\frac{2}{3}\right)^2 JS_4 \cdot S_5 + \left(\frac{2}{3}\right)^3 JS_5 \cdot S_6 - \dots \quad (3.1)$$

このような系の基底状態や低エネルギー状態を考える場合、番号の若い方のスピンは「次々と凍り付いて行く」ので、端から順に繰込み群変換を用いて行くと、精度良い結果が得られる。

例によって、最初は左から 3 個のスピンの  $\{S_1, S_2, S_3\}$  に着目して  $S = 1/2$  ダブレットのみを残し、ブロックスピン  $S_{123}$  を作る。次に、5 サイトまで考慮したハミルトニアンを、変換行列  $A_{123}$  により「繰込み群変換」する。

$$\begin{aligned} H_5 &= JS_1 \cdot S_2 + JS_2 \cdot S_3 + \frac{2}{3}JS_3 \cdot S_4 + \left(\frac{2}{3}\right)^2 JS_4 \cdot S_5 \\ \rightarrow \tilde{H}_5 &= A_{123}^\dagger H_5 A_{123} = -J + \left(\frac{2}{3}\right)^2 JS_{123} \cdot S_4 + \left(\frac{2}{3}\right)^2 JS_4 \cdot S_5 \end{aligned} \quad (3.2)$$

これを見ると、 $S_{123}$  と  $S_4$  および  $S_5$  が再び「元と相似な内部ハミルトニアンを持った 3 サイトのブロック」を構成していることがわかる。 $\tilde{H}_5$  を対角化して、基底ダブレットから変換行列  $A_{(123)45}$  を構成すると、その行列要素は  $A_{123}$  と等しくなる。この変換行列を用いて、7 サイトまで考慮してみよう。

$$\begin{aligned} \tilde{H}_7 &= -J + \left(\frac{2}{3}\right)^2 JS_{123} \cdot S_4 + \left(\frac{2}{3}\right)^2 JS_4 \cdot S_5 + \left(\frac{2}{3}\right)^3 JS_5 \cdot S_6 + \left(\frac{2}{3}\right)^4 JS_6 \cdot S_7 \\ \rightarrow \tilde{\tilde{H}}_7 &= A_{(123)45}^\dagger \tilde{H}_7 A_{(123)45} = A_{(123)45}^\dagger A_{123}^\dagger H_7 A_{123} A_{(123)45} \\ &= -J - \left(\frac{2}{3}\right)^2 J + \left(\frac{2}{3}\right)^4 JS_{(123)45} \cdot S_6 + \left(\frac{2}{3}\right)^4 JS_6 \cdot S_7 \end{aligned} \quad (3.3)$$

このように ( 模式図では [ [ [ [ [ ] ] ] ] ] )

- ブロックスピンを作っては、系の端にサイトを追加して行く

計算方法が、Wilson による実空間繰込み群の処方である。このまま、2 サイトずつ増やしなからず ~ と繰込み操作を続けて行くと、無限に長い場合の基底エネルギーの近似値として

$$-J \frac{1}{1-4/9} = -J \frac{1}{5/9} = -\frac{9}{5}J \quad (3.4)$$

を得る。興味のある方は、実際に  $N = 21$  くらいまでハミルトニアンを数値対角化してみて、上の結果と見比べてみると良いだろう。<sup>12</sup>

<sup>11</sup> 運動量空間での繰込み群の方が、一般には良く知られているし、場の理論を考える時には色々ご利益がある。DMRG の出現以前は「実空間繰込み群のご利益は薄い」とも思われていた — というのは前述のとおり。

<sup>12</sup> やってみたことは無いのだけど、まああの値になるだろうと予想している。

【空間依存性を持たないハミルトニアン】

空間依存性を持つ、不自然なハミルトニアンに対して Wilson 繰込み群が上手く行っても、あまり面白くない。ブロック繰込み群で考えたような、均質な  $N$  サイトハイゼンベルグスピン系に対して、数値計算の助けを借りてでも Wilson 繰込み群を経由して精密な基底エネルギーを求める方法を考えてみよう。計算機を使う場合には、「敵を知る前に己を知る」ことが大切だ。手持ちの計算機で数値的に対角化できる<sup>13</sup> 行列次元が、高々  $2m$  であるとしよう。ここに登場する  $m$  は適当な整数で、パソコンで計算を進める場合 1000 くらいの数になる。

まず、手持ちの計算機で 7 サイトの Heisenberg ハミルトニアン

$$H_7 = J \sum_{i=1}^6 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \quad (3.5)$$

くらいなら、何とか対角化できると仮定しよう。Z 方向を量子化軸に取った  $|S_1^Z S_2^Z S_3^Z S_4^Z S_5^Z S_6^Z S_7^Z\rangle$  という形の 128 個の基底 (Ising 基底)

$$\begin{aligned} |0\rangle &= |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\ |1\rangle &= |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\ |2\rangle &= |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\ &\vdots \\ |127\rangle &= |\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (3.6)$$

に対して、 $H_7$  を 128 次元対称行列として表現して取り扱う。<sup>14</sup> 行列要素は以下のように与えられる。

$$(H_7)_{jk} = \langle j | H_7 | k \rangle \quad (3.7)$$

さて、 $H_7$  を対角化して得られる固有エネルギーと固有状態を、次のように書いておこう。(但し  $\xi = 0 \sim 127$ )

$$H_7 |\Psi_7^{(\xi)}\rangle = E_7^{(\xi)} |\Psi_7^{(\xi)}\rangle = E_7^{(\xi)} \sum_{j=0}^{127} |j\rangle \langle j | \Psi_7^{(\xi)}\rangle = E_7^{(\xi)} \sum_{j=0}^{127} a_{j\xi} |j\rangle \quad (3.8)$$

但し、固有エネルギーは  $E_7^{(0)} \leq E_7^{(1)} \leq E_7^{(2)} \dots$  と低い順に並べておく。

ひとつスピンを足して、8 サイトの系を対角化したい .... けれども、 $128 \times 2 = 256$  次元行列は取り扱えない .... という「計算機の実力の限界による制約」があると仮定しよう。これに対応するために

- 7 サイトのブロックの 128 個の固有状態から、エネルギーが低い順に  $m$  ( $\leq 128/2 = 64$ ) 個を取り出して「 $m$  状態ブロックスピン」を作る

ことにする。細かいことを言うと、 $m$  として選べる整数には制限があって、エネルギーが縮退した固有状態は「全て残すか、または全てを捨てる」必要がある。そうしないと、系の  $SU(2)$  対称性が崩れてしまうからだ。ブロックスピンの各状態は

$$|\xi\rangle = |\Psi_7^{(\xi)}\rangle, \quad \xi = 0, 1, \dots, m-1 \quad (3.9)$$

で、変換行列は (くどくどと書くけど) 次のように 128 行  $m$  列の長方形行列で与えられる。

$$A = (a_{j\xi}), \quad a_{j\xi} = \langle j | \xi \rangle \quad (3.10)$$

このように、 $H_7$  を対角化して、その固有ベクトルを列ベクトルとして持つ変換行列を作ったのだけ

<sup>13</sup> ハウスホルダー法で対角化可能かどうかを考える。

<sup>14</sup> ホントはブロック対角になるように、更に total  $S^Z$  について並べ直しをするのだけど「入門編」なので面倒なことは避る。

- (適当な) 行列を対角化して、その固有ベクトルを用いてブロックスピン変換を生成する

という点は、後で学ぶ DMRG にも共通している。式 (2.11) で確認したように、 $A^\dagger A$  は  $m$  次元単位行列になる。また  $P = AA^\dagger$  は、ランクが  $m$  の  $128$  次元正方行列で、射影演算子としての性質  $P^2 = P$  を満たす。式 (2.14), (2.16), (2.18) に習って、ブロック内部のハミルトニアン  $H_7$  と、端っこのスピン  $S_7$  を変換しておこう。

$$\begin{aligned}\tilde{H}_7 &= A^\dagger H_7 A = \text{diag}\{E_7^{(0)}, E_7^{(1)}, \dots, E_7^{(m-1)}\} \\ \tilde{S}_7 &= A^\dagger S_7 A\end{aligned}\quad (3.11)$$

$S_7$  は  $S_7^z = \text{diag}(1, -1, 1, -1, 1, -1, \dots)$  と  $S_7^\pm$  に分けて考えて、それぞれ  $m$  次元行列  $\tilde{S}_7^z = A^\dagger S_7^z A$  および  $\tilde{S}_7^\pm = A^\dagger S_7^\pm A$  として持っておく。(これらは一般に「密な」行列になる。)

ここまで準備すると、8 サイト系が取り扱えるようになる。

$$\begin{aligned}H_8 &= H_7 + JS_7 \cdot S_8 \\ A^\dagger H_8 A &= A^\dagger H_7 A + A^\dagger (JS_7 \cdot S_8) A = \tilde{H}_7 + J(A^\dagger S_7 A) \cdot S_8 \\ &= \tilde{H}_7 + J\tilde{S}_7 \cdot S_8\end{aligned}\quad (3.12)$$

$A^\dagger H_8 A$  の行列次元は  $2m$  になり、 $m \leq 64$  と約束しておいたので  $128$  以下、つまり最初に仮定した計算機的能力で対角化可能だ。固有値と固有状態を求めよう。

$$A^\dagger H_8 A |\tilde{\Psi}_8^{(\eta)}\rangle = \tilde{E}_8^{(\eta)} |\tilde{\Psi}_8^{(\eta)}\rangle = \tilde{E}_8^{(\eta)} \sum_{\xi=0}^{m-1} \sum_{z=\uparrow, \downarrow} |\xi z\rangle \langle \xi z | \tilde{\Psi}_8^{(\eta)}\rangle = \tilde{E}_8^{(\eta)} \sum_{\xi z} b_{(\xi z)\eta} |\xi z\rangle \quad (3.13)$$

ここで  $z$  は、付け加えた 8 番目のスピンの状態を表す変数である。 $2m$  個の状態の中から、 $m$  (またはその近辺の適当な整数) 個だけの状態を「8 サイトまでのブロック」に対するブロックスピン変数として採択する。変換行列  $B$  の要素は、上式の  $b_{(\xi z)\eta}$  (但し  $\eta = 0 \sim m-1$ ) で与えられている。

$$\begin{aligned}\tilde{H}_8 &= B^\dagger (A^\dagger H_8 A) B = \text{diag}\{\tilde{E}_8^{(0)}, \tilde{E}_8^{(1)}, \dots, \tilde{E}_8^{(m-1)}\} \\ \tilde{S}_8 &= B^\dagger S_8 B\end{aligned}\quad (3.14)$$

これは (3.11) と本質的に同じ式なので、後は同様に  $S_9$  を加えて対角化、そしてブロックスピン変換 .....

$$\begin{aligned}A_\ell^\dagger \tilde{H}_\ell A_\ell &= \text{diag}\{E_\ell^{(0)}, E_\ell^{(1)}, \dots, E_\ell^{(m-1)}\} \\ \tilde{H}_{\ell+1} &= A_\ell^\dagger (\tilde{H}_\ell + S_\ell \cdot S_{\ell+1}) A_\ell\end{aligned}\quad (3.15)$$

と延々と繰り返して行くだけだ。こうして、 $N$  サイト目まで反復計算すると、 $\tilde{E}_N^{(0)}, \tilde{E}_N^{(1)}, \dots$  と低エネルギー固有値  $E_N^{(i)}$  の「まあまあ良い」近似値を得ることが出来る。高エネルギー状態を無視したので、近似の度合いは基底状態が一番良く、励起状態では段々と近似精度が悪くなる。<sup>15</sup>

## 【固定点】

Wilson 繰込み群で、ず~っとブロックスピン変換を続けて行くと、やがて  $\ell \gg 1$  で「繰込まれたハミルトニアン」 $\tilde{H}_\ell$  は対角項が  $\ell$  に線形な変化を示すだけとなる。これは、行列次元を  $2m$  に絞り込ん

<sup>15</sup> もっとうまく Wilson 繰込み群を使う方法が、奥西によって最近得られている。”Wilson-like real-space renormalization group and low-energy effective spectrum of the XXZ chain in the critical regime”, J. Phys. Soc. Jpn. 76, 063001 (2007) および”Real-space renormalization group approach for the corner Hamiltonian”, J.Phys.Soc.Jpn. 74 (2005) 3186-3192 を参照のこと

だ空間で延々と同じことを行った結果であり、物理的に意味があることかどうかは微妙である。ともかくも、このような状態に陥るまで反復計算してやれば、無限に大きな系の「基底状態のサイトあたりのエネルギー」を勘定することができる。

#### 【精度が出ない欠点】

均一な Heisenberg スピン系に Wilson 繰込み群を適用した場合、頑張って  $m = 1000$  くらい状態を取って来ても、基底エネルギーに  $1/10000$  (未確認) くらいの誤差が出てしまう。その原因は、境界条件にある。サイトを付け加えるのは常に系の端なので、「系の端への摂動に対する応答」を十分に拾っておく必要がある。だが、ブロックスピンの状態として採択する低エネルギー状態は、金太郎飴のように端の方が似通ったスピン配列となっていて、スピンを1つ付加した影響を効率良く取り込めるようになっていない。

この点について、よく引き合いに出されるのが1次元井戸型ポテンシャル中の1粒子問題である。ポテンシャル障壁が無限に高ければ、基底状態・励起状態にかかわらず、系の端で波動関数がゼロになる。格子系に焼き直しても、 $1/N$  のオーダーの小さな振幅しか持たない。こういう話をすると「1粒子系と多自由度系をごちゃ混ぜにするな」と怒られそうだけれども、多自由度系の状態は素励起や準粒子など、1粒子描像に還元できる(場合が多い)ことを考えると、1粒子系でうまく行かないものは多自由度系に持って行っても、やっぱりうまく行かないのだ。

## 4 密度行列繰込み群その1: 基底状態のターゲット

密度行列繰込み群 (DMRG) では、最終的に求めたい量子状態をまず念頭に置き、その状態をなるべく効率良く・精密に表現できるブロックスピンとは何かを考え、この目的を満足するようなブロックスピン変換を生成する。例として  $N = 8$  サイトの Heisenberg スピン鎖を考えよう。理由は後で述べることにして、ハミルトニアンを「系の左半分のハミルトニアン  $H_4^L$ 」と「系の右半分のハミルトニアン  $H_4^R$ 」と、両者を橋渡しする部分  $JS_4 \cdot S_5$  に分けて書き表そう。

$$\begin{aligned} H_8 &= J \sum_{i=1}^7 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = H_4^L + JS_4 \cdot S_5 + H_4^R \\ H_4^L &= J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4) \\ H_4^R &= J(\mathbf{S}_5 \cdot \mathbf{S}_6 + \mathbf{S}_6 \cdot \mathbf{S}_7 + \mathbf{S}_7 \cdot \mathbf{S}_8) \end{aligned} \quad (4.1)$$

(注意:  $H_4^R$  の添え字の「4」は、右半分に4つのスピが含まれていることを示すものである。) このように系を2つの部分系 — 慣習的に system と reservoir と呼ばれる — に分割して取り扱うのが DMRG の特徴の1つである。この分割に対応して、256個の基底  $|\mathbf{S}_1^Z \mathbf{S}_2^Z \dots \mathbf{S}_8^Z\rangle = |j\rangle$  ( $j = 0 \sim 255$ ) も

- 系の左半分 (L とラベル付けする) の4つのスピンの状態  $|\mathbf{S}_1^Z \mathbf{S}_2^Z \mathbf{S}_3^Z \mathbf{S}_4^Z\rangle = |\ell\rangle$  (但し  $\ell = 0 \sim 15$ )
- 系の右半分 (R とラベル付けする) の4つのスピンの状態  $|\mathbf{S}_5^Z \mathbf{S}_6^Z \mathbf{S}_7^Z \mathbf{S}_8^Z\rangle = |r\rangle$  (但し  $r = 0 \sim 15$ )

の直積  $|\mathbf{S}_1^Z \mathbf{S}_2^Z \mathbf{S}_3^Z \mathbf{S}_4^Z\rangle |\mathbf{S}_5^Z \mathbf{S}_6^Z \mathbf{S}_7^Z \mathbf{S}_8^Z\rangle = |\ell\rangle |r\rangle$  として表現しよう。

さて、最初に述べておいたように、最終的に求めたい量子状態を1つ選ばう。<sup>16</sup> まずは、基底固有状態  $|\Psi_8^{(0)}\rangle$  を最終的に求めたい量子状態とする。これを「基底状態をターゲットする」と言い表す。<sup>17</sup> そして、一見すると本末転倒に聞こえる

- すでに基底波動関数

$$\begin{aligned} \Psi_8^{(0)}(\mathbf{S}_1^Z \mathbf{S}_2^Z \dots \mathbf{S}_8^Z) &= \langle \mathbf{S}_1^Z \mathbf{S}_2^Z \dots \mathbf{S}_8^Z | \Psi_8^{(0)} \rangle = \left( \langle \mathbf{S}_1^Z \mathbf{S}_2^Z \mathbf{S}_3^Z \mathbf{S}_4^Z | \langle \mathbf{S}_5^Z \mathbf{S}_6^Z \mathbf{S}_7^Z \mathbf{S}_8^Z | \right) | \Psi_8^{(0)} \rangle \\ &= \left( \langle \ell | \langle r | \right) | \Psi_8^{(0)} \rangle = \Psi_8^{(0)}(\ell, r) \end{aligned} \quad (4.2)$$

が求まっている

と仮定する所から話を始める。左半分 (または右半分) の4つのスピンをそれぞれブロックとみなして、これに対応する「最適なブロックスピン変換」を考えてみよう。

### 【最小誤差と密度行列】

系の左半分、右半分についてのブロックスピン変換を、それぞれ  $A$  および  $B$  で表そう。ブロックスピンとして残す状態の数を慣例に従って  $m$  と書く。 $m$  は16以下の正整数で、 $m = 16$  の場合は「全ての状態を残す忠実な変換」となる。 $m < 16$  ならば、自由度を落とす近似的な変換となる。ともかくも、 $A$  や  $B$  は16行  $m$  列の行列で表せる。これまでの「繰込み群処方」に従って、ブロックスピンを16個の基底の線形結合として表しておこう。<sup>18</sup>

- 系の左半分のブロックスピン  $|\xi\rangle = \sum_{\ell=0}^{15} a_{\ell\xi} |\ell\rangle$

<sup>16</sup> 必要ならば2つも3つも選んで良い。「多状態ターゲット」を参照。

<sup>17</sup> 参照する状態であり、かつ追い求める目標でもある、そういう意味を込めた、うまい用語である。

<sup>18</sup> 行列の足の付き方が逆なのではないかと思う人も居るだろう。実は、後の都合により、標準的ではない足の付け方になっている。

- 系の右半分のプロックスピン  $|\eta\rangle = \sum_{r=0}^{15} b_{r\eta}|r\rangle$

変換  $A$  や  $B$  は「これから決定して行く未知の行列」なのだけど、これまで通り 互いに直交する規格化された列ベクトルを並べて作ることにする。例えば  $A^\dagger A$  や  $B^\dagger B$  が  $m$  次元単位行列であることや、

$$\begin{aligned}\langle \xi' | \xi \rangle &= \sum_{\ell} a_{\ell\xi'}^* a_{\ell\xi} = \delta_{\xi'\xi} \\ \langle \eta' | \eta \rangle &= \sum_r b_{r\eta'}^* b_{r\eta} = \delta_{\eta'\eta}\end{aligned}\quad (4.3)$$

$AA^\dagger$  や  $BB^\dagger$  が射影演算子になることなどは従前の通り。

プロックスピン変換が、ターゲットした基底状態に対する固有方程式

$$H_8 |\Psi_8^{(0)}\rangle = E_8^{(0)} |\Psi_8^{(0)}\rangle \quad (4.4)$$

にどのような影響を与えるかを観察してみよう。変換  $A$  と  $B$  を同時に作用させても良いのだけど、式がゴチャゴチャするので、まずは系の左半分について考えることにし、プロックスピン変換  $A$  のみを作用させよう。すると、次のような「変換後の固有方程式」を得る。

$$\tilde{H}_8 |\tilde{\Psi}_8\rangle = (A^\dagger H_8 A) A^\dagger |\Psi_8^{(0)}\rangle = \tilde{E}_8^{(0)} A^\dagger |\Psi_8^{(0)}\rangle \quad (4.5)$$

近似的な基底エネルギー  $\tilde{E}_8^{(0)}$  として、なるべく真の値  $E_8^{(0)}$  に近いものを得る条件を考えてみよう。ちょっとカッコの位置をずらすと、

$$A^\dagger (H_8 AA^\dagger |\Psi_8^{(0)}\rangle) = A^\dagger (\tilde{E}_8^{(0)} |\Psi_8^{(0)}\rangle) \quad (4.6)$$

という式になるので、結局のところ  $AA^\dagger |\Psi_8^{(0)}\rangle$  が  $|\Psi_8^{(0)}\rangle$  を良く近似することに問題を帰着できる。

- 射影演算子  $AA^\dagger$  を  $|\Psi_8^{(0)}\rangle$  にかけてもほとんど変化しない、そういう  $A$  が求められているのだ。

オペレーター形式では見辛い人も居るだろうから、行列要素でも書いておく。  $\Psi_8^{(0)}(\ell, r)$  と

$$\sum_{\xi=0}^{m-1} a_{\ell\xi} \sum_{\ell'=0}^{15} a_{\ell'\xi}^* \Psi_8^{(0)}(\ell', r) = \sum_{\xi=0}^{m-1} a_{\ell\xi} \tilde{\Psi}_8^{(0)}(\xi, r) \quad (4.7)$$

との違いの問題だ。(要図示)  $\tilde{\Psi}_8^{(0)}(\xi, r) = (\langle \xi | \langle r | A^\dagger |\Psi_8^{(0)}\rangle)$  は、プロックスピン変換を作用させた波動関数なので「繰込まれた波動関数」と呼ぶことにしよう。誤差は、ベクトル同士の引き算の 2 乗ノルム

$$\begin{aligned}\varepsilon^2 &= \left( \langle \Psi_8^{(0)} | - \langle \Psi_8^{(0)} | AA^\dagger \right) \left( | \Psi_8^{(0)} \rangle - AA^\dagger | \Psi_8^{(0)} \rangle \right) \\ &= \langle \Psi_8^{(0)} | \Psi_8^{(0)} \rangle - 2 \langle \Psi_8^{(0)} | AA^\dagger | \Psi_8^{(0)} \rangle + \langle \Psi_8^{(0)} | AA^\dagger AA^\dagger | \Psi_8^{(0)} \rangle \\ &= \langle \Psi_8^{(0)} | \Psi_8^{(0)} \rangle - \langle \Psi_8^{(0)} | AA^\dagger | \Psi_8^{(0)} \rangle\end{aligned}\quad (4.8)$$

として表せるので、この誤差の最小化問題としてプロックスピン変換  $A$  を決定することができる。  $\Psi_8^{(0)}(\ell, r)$  を  $\Psi(\ell, r)$  と略記して、上式を行列要素で書き直すと (ダッシュ付きの変数がアチコチで見辛いけど)<sup>19</sup>

$$\varepsilon^2 = \sum_{\ell=0}^{15} \sum_{r=0}^{15} \Psi^*(\ell, r) \Psi(\ell, r) - \sum_{\ell'=0}^{15} \sum_{\ell=0}^{15} \sum_{r=0}^{15} \sum_{\xi=0}^{m-1} \Psi^*(\ell', r) a_{\ell'\xi} a_{\ell\xi}^* \Psi(\ell, r)$$

<sup>19</sup> 行列要素に落とす時には、 $\langle \text{ブラ} |$  に関する要素に複素共役の \* 印が入る。

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\ell'=0}^{15} \sum_{\ell=0}^{15} \delta_{\ell'\ell} \left( \sum_{r=0}^{15} \Psi(\ell, r) \Psi^*(\ell', r) \right) \\
&- \sum_{\ell'=0}^{15} \sum_{\ell=0}^{15} \left( \sum_{\xi=0}^{m-1} a_{\ell'\xi} a_{\ell\xi}^* \right) \left( \sum_{r=0}^{15} \Psi(\ell, r) \Psi^*(\ell', r) \right)
\end{aligned} \tag{4.9}$$

となる。ここで系の左半分についての密度 (副) 行列  $\rho^L = \text{Tr}^R |\Psi\rangle\langle\Psi|$  を導入すると式がスッキリとする。まず  $\rho^L$  の行列要素は

$$\rho_{\ell\ell'}^L = \sum_{r=0}^{15} \Psi(\ell, r) \Psi^*(\ell', r) \tag{4.10}$$

だ。簡単のために  $|\Psi\rangle$  が  $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$  と規格化されているとしよう。すると

$$\text{Tr}^L \rho^L = \langle\Psi|\Psi\rangle = 1 \tag{4.11}$$

と、トレースも 1 になる。 $\rho^L$  を式 (4.8) に代入すると

$$\varepsilon^2 = \sum_{\ell=0}^{15} \rho_{\ell\ell}^L - \sum_{\ell'=0}^{15} \sum_{\ell=0}^{15} \sum_{\xi=0}^{m-1} a_{\ell'\xi} a_{\ell\xi}^* \rho_{\ell\ell'}^L = \text{Tr}^L \rho^L - \text{Tr}^L (AA^\dagger \rho^L) \tag{4.12}$$

と変型できる。上式をじ~っと眺めると

- 密度行列  $\rho^L$  の固有ベクトルを使って射影演算子を作れば良い

ことに気づく。ちょっと強引だけれども、とにかく、 $A$  の各列ベクトルが  $\rho^L$  の対角化により、その固有ベクトルとして得られることを認めてみよう。密度行列には半正値性がある、固有方程式

$$\rho^L |\xi\rangle = \lambda_\xi |\xi\rangle \quad \text{または} \quad \sum_{\ell'} \rho_{\ell\ell'}^L a_{\ell'\xi} = \lambda_\xi a_{\ell\xi} \tag{4.13}$$

に現れる固有値  $\lambda_\xi$  は常に正になる。また、 $\rho^L$  のトレースは 1 だったので、 $\sum_{\xi=1}^{16} \lambda_\xi = 1$  が成立する。従って、 $1 \geq \lambda_0 \geq \lambda_1 \geq \lambda_2 \dots \geq \lambda_{m-1} \geq 0$  と固有値を降順に並べて、対応する順番の固有ベクトルで  $A$  を構成しておけば、

$$\begin{aligned}
\varepsilon^2 &= \sum_{\ell=0}^{15} \rho_{\ell\ell}^L - \sum_{\ell'=0}^{15} \sum_{\ell=0}^{15} \sum_{\xi=0}^{m-1} a_{\ell'\xi} a_{\ell\xi}^* \rho_{\ell\ell'}^L \\
&= 1 - \sum_{\ell=0}^{15} \sum_{\xi=0}^{m-1} \left( \sum_{\ell'=0}^{15} a_{\ell'\xi}^* \rho_{\ell\ell'}^L a_{\ell'\xi} \right) = 1 - \sum_{\ell=0}^{15} \sum_{\xi=0}^{m-1} \lambda_\xi a_{\ell\xi}^* a_{\ell\xi} \\
&= 1 - \sum_{\xi=0}^{m-1} \lambda_\xi
\end{aligned} \tag{4.14}$$

となり、十分な数  $m \leq 16$  個の状態をブロックスピンとして残しておけば、誤差  $\varepsilon^2$  は非常に小さくすることができる訳だ。系の右半分についても同様に、

$$\rho^R = \text{Tr}^L |\Psi\rangle\langle\Psi| \quad \text{行列要素は} \quad \rho_{r'r'}^R = \sum_{\ell=0}^{15} \Psi(\ell, r) \Psi^*(\ell, r') \tag{4.15}$$

を対角化して

$$\rho^R |\eta\rangle = \lambda_\eta |\eta\rangle \quad \text{または} \quad \sum_{r'} \rho_{r'r'}^R b_{r'\eta} = \lambda_\eta b_{r\eta} \tag{4.16}$$

からブロックスピン変換  $B$  を生成する。こんな具合に、

- 系の密度行列を対角化してブロックスピン変換を作るから密度行列繰込み群

なのだ。訳がわからなくなった人も出て来た頃だと思うので、同じことを違った視点から眺めてみよう。

## 5 密度行列繰込み群その2: 特異値分解と行列積状態

前節で学んだ「密度行列を対角化してブロックスピン変換  $A$  と  $B$  を得る」ということを一旦忘れてしまおう。<sup>20</sup> ターゲットした基底波動関数  $\Psi(\ell, r)$  を、次のような形に近似する方法から、新たに考え始める。

$$\phi(\ell, r) = \sum_{\xi=1}^m \sum_{\eta=1}^m a_{\ell\xi} b_{r\eta} \omega_{\xi\eta} \quad (5.1)$$

$a_{\ell\xi}$  や  $b_{r\eta}$  については、これまで通り直交性を仮定しよう。そして  $|\phi\rangle$  と、ターゲット状態  $|\Psi\rangle$  の距離

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 &= (\langle \Psi | - \langle \phi |) (| \Psi \rangle - | \phi \rangle) \\ &= \langle \Psi | \Psi \rangle - \sum \Psi^*(\ell, r) a_{\ell\xi} b_{r\eta} \omega_{\xi\eta} - \sum \Psi(\ell, r) a_{\ell\xi}^* b_{r\eta}^* \omega_{\xi\eta}^* \\ &\quad + \sum a_{\ell\xi} b_{r\eta} \omega_{\xi\eta} a_{\ell\xi'}^* b_{r\eta'}^* \omega_{\xi'\eta'}^* \end{aligned} \quad (5.2)$$

を最小にするよう、 $a_{\ell\xi}$  や  $b_{r\eta}$  や  $\omega_{\xi\eta}$  を選んでみよう。(和記号については Einstein の縮約を取ることにする。また、複素共役な量は変分について区別する。) まず、極小条件  $\delta\varepsilon^2/\delta\omega_{\xi\eta}^* = 0$  より

$$\omega_{\xi\eta} = \sum a_{\ell\xi}^* b_{r\eta} \Psi(\ell, r) = \left( \langle \xi | \langle \eta | \right) A^\dagger B^\dagger | \Psi \rangle = \tilde{\Psi}(\xi, \eta) \quad (5.3)$$

という関係式が出て来る。 $\delta\varepsilon^2/b_{r\eta}^* = 0$  からは次式を得る。

$$\sum \Psi(\ell, r) a_{\ell\xi}^* \omega_{\xi\eta}^* = \sum a_{\ell\xi} b_{r\eta'} \omega_{\xi\eta'} a_{\ell\xi'}^* \omega_{\xi'\eta}^* = \sum b_{r\eta'} \omega_{\xi\eta'} \omega_{\xi\eta}^* \quad (5.4)$$

ここで  $\omega_{\xi\eta}$  を要素に持つ行列  $\Omega$  がランク落ちしていなければ<sup>21</sup>

$$\tilde{\Psi}(\xi, r) = \sum \Psi(\ell, r) a_{\ell\xi}^* = \sum b_{r\eta} \omega_{\xi\eta} \quad (5.5)$$

が成立する。 $\delta\varepsilon^2/a_{\ell\xi}^* = 0$  から、同様な式が得られる。

$$\begin{aligned} \sum \Psi(\ell, r) b_{\ell\eta}^* \omega_{\xi\eta}^* &= \sum a_{\ell\xi'} b_{r\eta} \omega_{\xi'\eta} b_{r\eta'}^* \omega_{\xi\eta}^* = \sum a_{\ell\xi'} \omega_{\xi'\eta} \omega_{\xi\eta}^* \\ \tilde{\Psi}(\ell, \eta) &= \sum \Psi(\ell, r) b_{r\eta}^* = \sum a_{\ell\xi} \omega_{\xi\eta}^* \end{aligned} \quad (5.6)$$

式 (5.5) に  $\Psi^*(\ell', r)$  をかけて、 $r$  について和を取り、式 (5.6) を代入すると

$$\begin{aligned} \sum \Psi^*(\ell', r) \Psi(\ell, r) a_{\ell\xi}^* &= \sum \Psi^*(\ell', r) b_{r\eta} \omega_{\xi\eta} \\ &= \sum a_{\ell'\xi'} \omega_{\xi'\eta}^* \omega_{\xi\eta} \end{aligned} \quad (5.7)$$

となる。 $\omega_{\xi'\eta}^* \omega_{\xi\eta}$  というのは、(固有値が非負な) エルミート行列の  $(\xi', \xi)$  要素なので

$$\omega_{\xi\eta} = \delta_{\xi\eta} \omega_{\xi\xi} \quad (5.8)$$

と、対角な場合だけを考えても一般性を失わない。となると?

$$\left( \sum_r \Psi^*(\ell', r) \Psi(\ell, r) \right) a_{\ell\xi}^* = \omega_{\xi\xi}^2 a_{\ell\xi} \quad (5.9)$$

という具合に、 $a_{\ell\xi}$  が密度行列  $\rho^L(\ell', \ell)$  の固有ベクトル ( $\ell$  要素) であることが自然に示せる。同様に、 $b_{r\eta}$  は  $\rho^R(r', r)$  の固有ベクトルになる。

<sup>20</sup> この節の議論は回り道の回り道なので、時間がない時にはパスする。

<sup>21</sup> ランク落ちしていると、無駄な自由度を使っていることになるので、ランク落ちしない所まで  $\Omega$  の行列次元を下げる。



さてここで、式 (5.8) をソレ以前の式、特に最初の式 (5.1) に代入してみよう。

$$\phi(\ell, r) = \sum_{\xi=1}^m a_{\ell\xi} b_{r\xi} \omega_{\xi} \quad (5.10)$$

特に、ブロックスピン変数の自由度を目一杯  $m = 16$  まで取ると  $\phi(\ell, r)$  は基底波動関数に一致する。(証明してみてください。)

$$\Psi(\ell, r) = \sum_{\xi=1}^{16} a_{\ell\xi} b_{r\xi} \omega_{\xi} = \sum_{\xi=1}^{16} a_{\ell\xi} \omega_{\xi} \bar{b}_{\xi r} \quad (5.11)$$

少し式が見易いように、 $B$  の転置行列  $B^\dagger$  の要素  $\bar{b}_{\xi r} = b_{r\xi}$  を導入した。こういう分解は特異値分解と呼ばれ、 $\omega_{\xi}$  のことを特異値と言う。上の2つの式を見比べると、結局のところ近似波動関数  $\phi(\ell, r)$  の善し悪しは、特異値を大きな順に並べた時に、どれくらい速やかにその値が減衰するかにかかっている。

特異値の2乗  $\omega_{\xi}^2$  は、系の左半分でブロックスピン状態  $|\xi\rangle$  を見いだす確率になっている。次の和

$$S = - \sum_{\xi} \omega_{\xi}^2 \ln \omega_{\xi}^2 \quad (5.12)$$

は量子エントロピーと呼ばれるもので、系の右半分と左半分の量子的な相関(またはエンタングルメント)を定量的に表す量だ。

#### 【行列積状態】

特異値分解を再帰的に(?) 使うと、波動関数  $\Psi(S_1^Z S_2^Z \dots S_8^Z)$  を行列積(又はテンソル積)の形で表すことができる。これまでは系を  $\{S_1 S_2 S_3 S_4\}$  と  $\{S_5 S_6 S_7 S_8\}$  と中央で分割して、それぞれ状態を変数  $\ell$  と  $r$  で表して来た。式 (5.11) に挙げた  $\Psi(\ell, r)$  の特異値分解をよく眺めると、中央で分割しない場合にも同様の議論が出来ることがわかる。例えば  $\{S_1 S_2\}$  と  $\{S_3 S_4 S_5 S_6 S_7 S_8\}$  に系を分割した場合には、 $|S_1^Z S_2^Z\rangle = |\ell\rangle$  (但し  $\ell = 1 \sim 4$ ) および  $|S_3^Z \dots S_8^Z\rangle = |r\rangle$  (但し  $r = 1 \sim 64$ ) について

$$\Psi(\ell, r) = \sum_{\xi=0}^3 a_{\ell\xi} b_{r\xi} \omega_{\xi} = \sum_{\xi=0}^3 a_{\ell\xi} \omega_{\xi} \bar{b}_{\xi r} = \sum_{\xi=0}^3 a_{(12)\xi} \omega_{\xi} \bar{b}_{\xi(345678)} \quad (5.13)$$

と特異値分解できる。上式中の (12) は  $(S_1^Z S_2^Z)$  の略記であり、(345678) も同様である。ここで

$$\tilde{\Psi}(\xi, r) = \sum_{\ell} a_{\ell\xi}^* \Psi(\ell, r) = \sum_{\ell} \omega_{\xi} \bar{b}_{\xi(345678)} = \tilde{\Psi}(\xi, S_3^Z S_4^Z \dots S_8^Z) = \tilde{\Psi}_{\xi(345678)} \quad (5.14)$$

に着目しよう。「略記の方法」に慣れてもらう目的で、わざと色々な記号を上のに含めておいた。<sup>22</sup>  $\tilde{\Psi}(\xi, r)$  の変数を  $\{\xi S_3\}$  と  $\{S_4 \dots S_8\}$  に区分(ブロック化)して、再び特異値分解を用いると

$$\tilde{\Psi}_{\xi(345678)} = \tilde{\Psi}_{(\xi 3)(45678)} = \sum_{\eta=1}^8 a'_{(\xi 3)\eta} \omega'_{\eta} \bar{b}'_{\eta(45678)} \quad (5.15)$$

という分解が得られる。元の式に代入して、同様に分解をドンドン続けると、直交行列の積(と特異値)で、元の波動関数を再構成することができる。

$$\begin{aligned} \Psi_{12345678} &= \sum a_{(12)\xi} a'_{(\xi 3)\eta} \omega'_{\eta} \bar{b}'_{\eta(45678)} \\ &= \sum a_{(12)\xi} a'_{(\xi 3)\eta} a''_{(\eta 4)\mu} \omega''_{\mu} \bar{b}''_{\mu(5678)} \\ &= \sum a_{(12)\xi} a'_{(\xi 3)\eta} a''_{(\eta 4)\mu} \omega'''_{\mu(5\nu)} \bar{b}''_{\nu(6\rho)} \bar{b}_{\rho(78)} \end{aligned} \quad (5.16)$$

<sup>22</sup> こういう風と同じ意味を表す記号に大小様々なものを用意するテクニックが「マヤ文字」でも駆使されている。

最後の変型では、系の右端から同様に特異値分解を実行して行った。左右からの分解が出会うポイントを1つずらすと、次のような形にも書ける。(添え字で変数が区別できるから、以後ダッシュ記号を落とす。)

$$\begin{aligned}\Psi_{12345678} &= \sum a_{(12)\xi} a'_{(\xi3)\eta} a''_{(\eta4)\mu} a'''_{(\mu5)\nu} \omega_\nu''' \bar{b}'_{\nu(6\rho)} \bar{b}_{\rho(78)} \\ &\rightarrow \sum a_{(12)\xi} a_{(\xi3)\eta} a_{(\eta4)\mu} a_{(\mu5)\nu} \omega_\nu \bar{b}_{\nu(6\rho)} \bar{b}_{\rho(78)}\end{aligned}\quad (5.17)$$

上の2式を見比べると、

$$\omega_\mu \bar{b}_{\mu(5\nu)} = a_{(\mu5)\nu} \omega_\nu \quad (5.18)$$

という関係を得る。これを用いると、行列積の中で特異値が「ぶら下がっている場所」を系の任意の場所へ自由に「移動」させることができる。また、ギリシア文字で表した index (足) が、必ず特異値と結びついていることもわかる。と、いうことは? 大きな特異値を残し、小さな特異値を無視するようにギリシア文字の変数 (~ ブロックスピン変数) を至る所で制限しても、行列積で与えられる波動関数はあまり変化しないことがわかる。DMRG は、このような特異値分解の性質をうまく利用している。

【多状態ターゲット】 オマケなので飛ばして読むのが良い

2つ以上の波動関数を、ほとんど同じ形の行列積で(近似的に)表す必要に迫られることがある。例えば、基底状態と第一励起状態を求めたい場合や、状態  $|\Psi\rangle$  にオペレーター  $\hat{O}$  を作用させた状態  $|\Phi\rangle = \hat{O}|\Psi\rangle$  を求めたい場合などである。

$$\begin{aligned}\Psi_{12345678} &= \sum a_{(12)\xi} a_{(\xi3)\eta} a_{(\eta4)\mu} \tilde{\Psi}_{\mu\nu} \bar{b}_{\nu(5\rho)} \bar{b}_{\rho(6\sigma)} \bar{b}_{\sigma(78)} \\ \Phi_{12345678} &= \sum a_{(12)\xi} a_{(\xi3)\eta} a_{(\eta4)\mu} \tilde{\Phi}_{\mu\nu} \bar{b}_{\nu(5\rho)} \bar{b}_{\rho(6\sigma)} \bar{b}_{\sigma(78)}\end{aligned}\quad (5.19)$$

これもまた地道に、直交性を持った長方形行列  $A$  と  $B$  に対して次のような「近似波動関数」

$$\begin{aligned}\psi(\ell, r) &= a_{\ell\xi} \tilde{\psi}_{\xi\eta} \bar{b}_{\eta r} \\ \phi(\ell, r) &= a_{\ell\xi} \tilde{\phi}_{\xi\eta} \bar{b}_{\eta r}\end{aligned}\quad (5.20)$$

を考え、誤差関数

$$\varepsilon^2 = \left( \langle \Psi | - \langle \psi | \right) \left( | \Psi \rangle - | \psi \rangle \right) + \left( \langle \Phi | - \langle \phi | \right) \left( | \Phi \rangle - | \phi \rangle \right) \quad (5.21)$$

の極小条件から  $A$  や  $B$  が満たすべき式を導くのである ... が、式ばかり長くなるので、<sup>23</sup> 途中は割愛して結果だけを書くと、 $A$  は「密度行列を足し合わせたもの」

$$\rho^L(\ell, \ell') = \sum_r \Psi(\ell, r) \Psi^*(\ell', r) + \sum_r \Phi(\ell, r) \Phi^*(\ell', r) \quad (5.22)$$

を対角化すると得られる。(Bについても同様。)<sup>23</sup> 1つの状態  $|\Psi\rangle$  だけを考慮した場合には、行列積の「真ん中」には対角な特異値がぶら下がっていたけれども、2つ以上の状態を考慮する — ターゲットする — と、対応する部分に入る行列は対角にはならない。

<sup>23</sup> 実は重要なポイントがあって、十分に大きな  $m$  を取らないと密度行列を足し合わせるという議論は成立しない。

## 6 密度行列繰込み群その3: 無限系アルゴリズム

これまでの議論から、密度行列を対角化することにより (a) ターゲットした状態の (b) 指定した分割に対する — 最適なブロックスピン変換が求められることがわかった。ところで、 $N$  サイト Heisenberg Model の基底波動関数  $\Psi_{123\dots N}$  から作られる、左から 2 サイト  $\ell = (12)$  についての密度行列

$$\rho^L(\ell, \ell') = \sum_{(45\dots N)} \Psi_{(12)(3\dots N)} \Psi_{(1'2')(3\dots N)}^* \quad (6.1)$$

と、 $N+2$  サイトの基底波動関数  $\Psi_{123\dots N+2}$  から作られる密度行列

$$\rho^L(\ell, \ell') = \sum_{(45\dots N+2)} \Psi_{(12)(3\dots N+2)} \Psi_{(1'2')(3\dots N+2)}^* \quad (6.2)$$

は、十分に  $N$  が大きければ「ほとんど変わらない」と考えて良いだろう。つまり、

- $N$  サイト系で得られたブロックスピン変換  $A$  および  $B$  は、 $N \pm 2$  サイト系に対して作用させても「そんなに悪くない」と考えられる

訳だ。この、密度行列の「サイズに対する鈍感性」を利用して、比較的大きなサイズ  $N$  の系の基底状態 (や低エネルギー励起状態) を求め計算アルゴリズムが、DMRG の無限系アルゴリズムと呼ばれるものである。

### 【計算の出発点】

ハミルトニアンが対角化可能な、小さなサイズ  $N$  の系から計算を始める。 $N=0$  や  $N=2$  と、トリビアルな所から出発する流儀もあって、その方がプログラムは組み易いのだけど、入門編として  $N=4$  から出発する。ハミルトニアンは、形式的に  $H_1^L = 0$  および  $H_1^R = 0$  を導入して次のように表しておこう。

$$H_4 = H_1^L + JS_1 \cdot S_2 + JS_2 \cdot S_3 + JS_3 \cdot S_4 + H_1^R \quad (6.3)$$

そして、 $H_4$  を対角化して、基底波動関数  $\Psi_{1234}$  を得る。系を中央で左右に分割することを考え、 $\Psi_{(12)(34)}$  から  $\rho_{(12)(1'2')}^L$  および  $\rho_{(34)(3'4')}^R$  を作る。これらに対角化して、ブロックスピン変換  $A_2$  と  $B_2$  を得よう。この段階では、 $m=4$  と全ての状態を残しておいても、計算機資源を全く圧迫しないので

- 計算精度を保つために、残せる状態はなるべく残す

という考えに基づいて  $m=4$  とする。 $A_2$  や  $B_2$  についている添え字は、それらが「(もともと) 何個のスピンを1つのブロックスピン変数にマップするのか」を表している。さて、最初ハミルトニアンから「中央を橋渡しする」 $JS_2 \cdot S_3$  を除いた部分に対して  $A_2$  と  $B_2$  を作用させてみよう。

$$\begin{aligned} \tilde{H}_2^L &= A_2^\dagger \left( H_1^L + JS_1 \cdot S_2 \right) A_2 \\ \tilde{H}_2^R &= B_2^\dagger \left( H_1^R + JS_3 \cdot S_4 \right) B_2 \end{aligned} \quad (6.4)$$

Wilson 繰込み群とは異なり、 $\tilde{H}_2^L$  や  $\tilde{H}_2^R$  は対角とはならない。オペレーターであれば何でも  $A_2$  や  $B_2$  により変換できるので、スピン演算子も次のように変換できる。

$$\begin{aligned} \tilde{S}_i &= A_2^\dagger S_i A_2 & i = 1, 2 \\ \tilde{S}_j &= B_2^\dagger S_j B_2 & j = 3, 4 \end{aligned} \quad (6.5)$$

実際の計算では、スピン演算子は  $S^Z$  と  $S^\pm$  に分割して保持する方が楽だ。ここまで準備すると、 $N = 6$  の「繰込まれた形の」ハミルトニアンを書き下せる。

$$\tilde{H}_6 = \tilde{H}_2^L + J\tilde{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + JS_3 \cdot \mathbf{S}_4 + JS_4 \cdot \tilde{\mathbf{S}}_5 + \tilde{H}_2^R \quad (6.6)$$

但し、 $\tilde{H}_2^R$  は右から2個のスピン (を繰り込んだもの) に働くよう、サイトをズラして考える。同様に  $\tilde{S}_5$  も式 (6.5) の  $\tilde{S}_3$  を意味している。

ホントは、6 サイト系の両端 2 サイトについて構成した  $A_2$  や  $B_2$  を  $H_6$  に作用させて  $\tilde{H}_6$  を得るべきなのだけど、「無い袖は振れない」ので4 サイト系で作った変換を6 サイト系に適用するのである。幸い、 $m = 4$  と全ての状態を保持していて  $A_2$  や  $B_2$  は「忠実な変換」なので、今のところ  $H_6$  と  $\tilde{H}_6$  は同じ固有値を持っている。

この  $2^{2m^2}$  次元のハミルトニアンを対角化すれば、基底波動関数  $\tilde{\Psi}(\xi S_3^Z S_4^Z \eta) = \tilde{\Psi}_{\xi 3 4 \eta}$  を得る。再び系を中央で左右に分割し、 $\tilde{\Psi}_{(\xi 3)(4 \eta)}$  から  $\rho_{(\xi 3)(\xi' 3')}^L$  および  $\rho_{(4 \eta)(4' \eta')}^R$  を作る。これらに対角化して、ブロックスピン変換  $A_3$  と  $B_3$  を得る。まだ  $m = 8$  と全ての状態を残しておいて良いだろう。ここから先は単純な繰り返しで、左右のブロックのハミルトニアンは次のように1 サイトずつ付け加えて拡大する。

$$\begin{aligned} \tilde{H}_3^L &= A_3^\dagger \left( \tilde{H}_2^L + JS_2 \cdot \mathbf{S}_3 \right) A_3 \\ \tilde{H}_3^R &= B_3^\dagger \left( \tilde{H}_2^R + JS_4 \cdot \mathbf{S}_5 \right) B_3 \end{aligned} \quad (6.7)$$

このプロセスは、Wilson 繰り込み群ソックリである。演算子の方も

$$\begin{aligned} \tilde{S}_i &= A_3^\dagger \tilde{S}_i A_3 & i = 1, 2 \\ \tilde{S}_3 &= A_3^\dagger \mathbf{S}_3 A_3 \\ \tilde{S}_4 &= B_3^\dagger \mathbf{S}_4 B_3 \\ \tilde{S}_j &= B_3^\dagger \tilde{S}_i B_3 & j = 5, 6 \end{aligned} \quad (6.8)$$

と変換しておいて、再びシステムサイズを拡大する。

$$\tilde{H}_8 = \tilde{H}_3^L + J\tilde{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4 + JS_4 \cdot \mathbf{S}_5 + JS_5 \cdot \tilde{\mathbf{S}}_6 + \tilde{H}_3^R \quad (6.9)$$

以下同様。こうやって、計算を繰り返して行くと、ある段階でハミルトニアンの行列次元が大きくなりすぎて、計算が手に負えなくなって来る。その段階まで達したら、 $m$  を計算機で取り扱える値まで制限する。(その後は  $A_n$  や  $B_n$  が長方形行列となる。) このようにして、任意のサイズ  $N$  まで、延々と反復計算を行うのが DMRG の無限系アルゴリズムである。計算の途上で、常に  $\tilde{\Psi}(\xi S_i^Z S_{i+1}^Z \eta)$  の形の「繰り込まれた波動関数」を保持しているので、ボンドエネルギー

$$\langle \tilde{\Psi} | JS_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} | \tilde{\Psi} \rangle = 3J \langle \tilde{\Psi} | JS_i^Z S_{i+1}^Z | \tilde{\Psi} \rangle \quad (6.10)$$

などを監視して、これが十分に収束したら、無限に長い系のボンドエネルギーだと考えるわけだ。なお、一番最初に式 (6.1) と (6.2) の類似性を指摘したけれども、無限に長い系であれば、これら 2 つの密度行列はホントに同一のものになる。

## 7 密度行列繰込み群その3: 有限系アルゴリズム

無限系アルゴリズムで取り扱っている、「繰り込まれたハミルトニアン」 $\tilde{H}_N$ の全貌(?)を眺めてみよう。すると、「生の」ハミルトニアン $H_N$ に対して、繰り込み群変換を何度も作用させていることがわかる。

$$\tilde{H}_N = B_M^\dagger A_M^\dagger B_{M-1}^\dagger A_{M-1}^\dagger \cdots B_2^\dagger A_2^\dagger H_N A_2 B_2 \cdots A_M B_M \quad (7.1)$$

これを対角化して近似的な基底固有エネルギー $\tilde{E}_N^{(0)}$ と、それに対応する繰り込まれた波動関数 $\tilde{\Psi}_N^{(0)}(\xi S_M^Z S_{M+1}^Z \eta)$ を得る意味について思い出そう。 $i = M, j = M, k = M+1, l = M+2$ と定義しておいて、 $\tilde{\Psi}_N^{(0)}(\xi S_M^Z S_{M+1}^Z \eta) = \tilde{\Psi}_{\xi j k \eta}$ と書き直すと、行列積で与えられる(繰り込まれていない)近似波動関数

$$\phi_{12\dots i j k l \dots N} = \sum a_{(12)\xi} a_{(\xi 3)\eta} \cdots a_{(\zeta i)\mu} \tilde{\Psi}_{\mu j k \nu} \bar{b}_{\nu(l\rho)} \cdots \bar{b}_{\sigma(N-1 N)} \quad (7.2)$$

に対して、

$$\langle \phi | H_N | \phi \rangle = \tilde{E}_N^{(0)} \quad (7.3)$$

が成立しているのだ。無限系アルゴリズムでは、正しくない環境の下でブロックスピン変換を生成したので、近似的な基底エネルギー $\tilde{E}_N^{(0)}$ の精度が十分に保たれていない可能性がある。無限系アルゴリズムで得られた $N$ サイト系の結果を、更に精密化する方法、それが「有限系アルゴリズム」である。

無限系アルゴリズムで $N = 2M$ サイトに達した時点での、くりこまれたハミルトニアンは

$$\tilde{H}_{2M} = \tilde{H}_{M-1}^L + J\tilde{S}_{M-1} \cdot \mathbf{S}_M + JS_M \cdot \mathbf{S}_{M+1} + JS_{M+1} \cdot \tilde{S}_{M+2} + \tilde{H}_{M-1}^R \quad (7.4)$$

という形になっている。一般の $N$ で示すと添え字がゴチャゴチャするので、単純な例 $N = 8$ に立ち戻ろう。

$$\tilde{H}_8 = \tilde{H}_3^L + J\tilde{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4 + JS_4 \cdot \mathbf{S}_5 + JS_5 \cdot \tilde{S}_6 + \tilde{H}_3^R \quad (7.5)$$

これを対角化して得た $\tilde{\Psi}_{\xi 45 \eta}$ から繰込み群変換 $A_4$ を求めて、これを用いて $\tilde{H}_4^L$ や $\tilde{S}_4$ を作る。一方、 $\tilde{H}_2^R$ や( $\tilde{H}_2^R$ に接している) $\tilde{S}_6$ は既に一度計算して求めてあるはずなので、それをメモリーから掘り出して来る。すると、左右の分割点が1つズレた形のハミルトニアンができる。

$$\tilde{H}_8 = \tilde{H}_4^L + J\tilde{S}_4 \cdot \mathbf{S}_5 + JS_5 \cdot \mathbf{S}_6 + JS_6 \cdot \tilde{S}_7 + \tilde{H}_2^R \quad (7.6)$$

(ここで止めてもいいんだけど)このまま、同様に右へと到達すると

$$\tilde{H}_8 = \tilde{H}_5^L + J\tilde{S}_5 \cdot \mathbf{S}_6 + JS_6 \cdot \mathbf{S}_7 + JS_7 \cdot \mathbf{S}_8 + \tilde{H}_1^R \quad (7.7)$$

という形まで、 $\tilde{H}_8$ を変型して行ける。これを対角化して得た波動関数 $\tilde{\Psi}_{\xi 678}$ から、今度は右側に対する繰込み群変換 $B_2$ を作り、これを使って $\tilde{H}_2^R$ や $\tilde{S}_7$ を求めなおす。この段階で $\tilde{H}_4^L$ や $\tilde{S}_4$ を掘り出すと、再び

$$\tilde{H}_8 = \tilde{H}_4^L + J\tilde{S}_4 \cdot \mathbf{S}_5 + JS_5 \cdot \mathbf{S}_6 + JS_6 \cdot \tilde{S}_7 + \tilde{H}_2^R \quad (7.8)$$

へと戻って来る。こうして、右へ左へと反復計算するのが、DMRGの有限系アルゴリズムである。見てわかるように、いつでも(形式的には)正しい環境の下でブロックスピン変換を生成している。これが、行列積状態(MPS)を変分ミニマムへと導くアルゴリズムであることは、ハミルトニアンとMPSの関係を眺めてみると理解できる。

(講義ノートここまで。)

## 8 動的応答スペクトルの求め方

修正ベクトル (Correction Vector)      時間的余裕によりけり

## 9 イジングモデルの DMRG とその変型

古典系の密度行列繰り込み群については、プロジェクター画面を用いて説明する。時間があれば、その変型として角転送行列繰り込み群についても触れたい。

## 10 有限温度量子系の取り扱い

$$\rho = \exp(-\beta H), \quad Z = \text{Tr } \rho \quad (10.1)$$

鈴木・トロッター分解したものを横から眺める。

## 11 量子系の時間発展の追跡

これまた、トロッター分解から眺めるのが良い。

White による多状態ターゲットを用いたアルゴリズムもある。

## 12 1 粒子系から学ぶ密度行列繰り込み群

原子のスケールで物理系の状態や時間発展を調べようとする、量子力学のお世話になる。その基本は、ハミルトニアンを対角化して固有状態を求めることだ。孤立した水素原子であれば、この作業は紙とエンピツさえあれば何とかなる。だが、原子が何個も集まった「多原子系」になると、ハミルトニアンの対角化には電子計算機が必要となる。系の自由度が大きくなり、対角化する行列の次元が数千にも及ぶからだ。原子を何百個も含む系になると、対角化はおろか「系の状態 (ベクトル) を数えるだけで計算機がパンクする」ようになってしまう。このような場合にも計算をあきらめず、計算機の能力が及ぶ範囲まで物理系の自由度を圧縮する巧妙な手法として「密度行列繰り込み群」が知られている。その威力の一端を目で見て学ぶために、1つの電子が数十個の原子を渡り歩く単純な模型を考え、たった4行4列の行列を扱うだけで、系の基底状態を求めるデモンストレーションを行う。その延長として、無限の自由度を含む2次元統計模型の取り扱いなども考えてみよう。

## 13 よみがえる実空間繰り込み群

MERA (Multi Scale Entanglement Renormalization Ansatz) はすごい!!