# 密度行列繰り込み群無限系法初期推定に関する研究

横浜国立大学大学院工学府物理情報工学専攻 府川慎之介1

## 目次

けじん	5 <i>1</i> 7	1					
2 無限系法初期推定     2							
21	無限系法繰り込み群・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	• 2					
2.2	無限系法初期推定・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	• 4					
2.3	初期推定符号調整の改良・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	• 6					
<b>1</b> .0 2.4	近似推定による初期推定状態の改良・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	10					
2.5	基底対応付けの改良・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	$12^{-10}$					
2.6	高磁場領域計算時の初期推定・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	14					
3 基底·低励起状態計算 17							
3.1	S = 1/2ハイゼンベルグ鎖・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	17					
3.2	S = 1ハイゼンベルグ鎖・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	18					
3.3	S = 1/2ジグザグ鎖・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	20					
4 局磁場領域計算 <b>23</b>							
4.1	S = 1/2ハイゼンベルグ鎖・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	23					
4.2	S = 1ハイゼンベルグ鎖・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	25					
まとん	Ъ	26					
	は 服 2.2 2.3 2.4 2.5 2.6 基 3.1 3.2 3.3 磁 4.1 4.2 と と な よ 4.2 よ 3.3 し、 4.1 4.2 よ 4.2 よ 4.2 5.2 4.3 5.2 5.3 5.4 5.4 5.4 5.5 5.6 5.6 5.7 5.7 5.7 5.7 5.7 5.7 5.7 5.7	はじめに 無限系法初期推定 2.1 無限系法繰り込み群・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・					

参考文献

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> E-mail: fukawa-shinnosuke-nm@ynu.jp

## 1 はじめに

White によって 1992 年に考案された密度行列繰り込み群法(density matrix renormalization group method, DMRG 法)[1]は、現在では大規模スピン系計算の主流となっている。厳密対角化で はメモリや計算時間の問題でせいぜい数十サイトの計算が限度であるが、DMRG 法では数百サイトの計算が可能であり、熱力学的極限の性質を十分な精度で論じることができるようになった。

DMRG 法では保持基底数によって計算精度が決まる。系が大きくなるほど精度を出すために必要な保持基底数が増え計算時間が増加する。DMRG 計算の高速化としては、行列計算の並列化[2]、 ハミルトニアンの粗行列性の利用[3]、基底変換による固有状態の初期推定[4]などがある。

DMRG法ではランチョス法などの反復法で固有状態を求めるが、あらかじめ固有状態に近い状態を用意することで反復回数を減らし計算を高速化できる。DMRG無限系法と呼ばれる計算では繰り込み群としての性質を利用した初期推定方法[5,6]が提案されているが、一般的な系への適用が不可能であることや、初期推定計算における符号調整が不完全であるなどの問題がある。

そこで本論文では初期推定計算の改良を行い、S = 1/2,1反強磁性ハイゼンベルグ鎖

$$H_{Heisenberg} = \sum_{i=1}^{L-1} \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_{i+1}$$
(1)

及びS = 1/2ジグザグ鎖

$$H_{zigzag} = J_1 \sum_{i=1}^{L-1} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J_2 \sum_{i=1}^{L-2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}$$
(2)

の基底・低励起状態の計算に適用した。ここで $S_i$ はサイトiのスピン演算子、Lはサイト数、 $J_1, J_2$ は 最隣接,次隣接相互作用定数である。またこれまで行われていなかった高磁場領域計算時の初期推 定法を考案し、S = 1/2,1ハイゼンベルグ鎖に対し適用した。

本改良初期推定による計算の高速化は劇的である。例えば*S* = 1/2ハイゼンベルグ鎖の基底状態 計算では、初期ベクトルをランダムに設定した場合のランチョス法の反復回数は 100 回を超える が、本論文の改良初期推定を行うと平均 10 回程度になり、DMRG 無限系法全体の計算で約 7 倍 高速化した。また初期推定の精度は有限サイズ効果と関係があり、系が大きくなるほど精度が上 がり計算時間が減る。

本論文の構成は次のようになる;2章ではDMRG法と初期推定方法の概要を解説したのち、初 期推定の改良と高磁場領域での推定について論じた。3・4章では(1)(2)式のモデルへ適用し初期 推定が確かに改良されることを示したほか、現れる現象から初期推定計算の性質を調査した。

#### 2 無限系法初期推定

## 2.1 DMRG 無限系法

DMRG法にはLを次々に大きくする無限系法と、Lは一定のまま精度を高めてゆく有限系法の2 種類がある。今回行った初期推定は無限系法での計算であるため、はじめにその概要を説明する。

DMRG 法では系全体(superblock)を system と environment の2つに分ける。system および environment は共にブロックとスピンからなる。ランチョス法などによりターゲットとなる系全 体のある固有状態  $|\psi\rangle$ を計算したのち、system に対する密度行列 $\rho_{ii'}$ を計算する。

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{ij} |i\rangle_s |j\rangle_e \tag{3}$$

$$\rho_{ii'} = \sum_{j} \psi_{ij} \psi_{i'j} \tag{4}$$

ここで $|i\rangle_s$ , $|j\rangle_e$ は system、environment の基底であり、 $\rho_{ii'}$ は密度行列のii'成分である。密度行列 の対角化を行い、固有値の大きいm個の固有状態を新たな基底とする基底変換を system に施す (繰り込み)。こうしてサイト数が1つ大きいブロックを計算し、このブロックから再び system と environment を構成し上記の計算を繰り返すことで状態数を増やさず次々と計算してゆく方法が DMRG 法である。特に DMRG 無限系法では environment は system を反転させたものを用い る。初めに4サイトでの対角化を行い、上に書いた手順に従ってブロックに繰り込み、系全体の サイト数を各ステップで2ずつ増やしながら目的のサイト数に達するまで計算を続ける。

DMRG 法における計算誤差は密度行列固有値 $\lambda_i$ から見積もることができる。(4)式から $\lambda_i$ の総和 は $\sum_i \lambda_i = \sum_i \rho_{ii} = 1$ となるが、 $\lambda_i$ を大きさで並び替えたとき切り捨てられる基底の固有値の総和 $e_{tr}$ 

$$e_{tr} = 1 - \sum_{i=1}^{m} \lambda_i \tag{5}$$

がおおよその計算精度となる。ここでmは保持基底数である。



図1 DMRG 無限系法の概要

なお図1の系は開いた境界条件(OBC)の場合のものである。ブロックとスピンの設定によって は周期境界条件(PBC)の計算も可能だが、OBCに比べ*e*<sub>tr</sub>が1,2桁大きくなることが報告されてい る[1]。今回の計算ではPBCで行う特別の理由はないため、すべての計算をOBCで行った。

多くのスピン系の計算ではハミルトニアンの性質から計算量を減らすことができる。サイトiの スピン演算子の z成分 $S_i^z$ に対し、スピンの z成分の総和 $S_{total}^z$ は

$$S_{total}^z = \sum_{i=1}^{L} S_i^z \tag{6}$$

で与えられるが、 $S_{total}^{z}$ とハミルトニアンHが交換するとき、Hは $S_{total}^{z}$ が同じ部分空間でのみ値を 持つ行列となり、対角化計算は $S_{total}^{z}$ 一定の部分空間でのみ行えばよい。この時計算されるエネル ギー固有状態は一定の $S_{total}^{z}$ を持つ同時固有関数になっている。またそのような状態から密度行列 を作ると、(4)式からわかるように system 部分のスピン z 成分の総和 $S_{system}^{z}$ 

$$S_{system}^{z} = \sum_{i=1}^{L/2} S_{i}^{z}$$

$$\tag{7}$$

が同じ部分空間でのみ値を持つ行列となり、固有状態も一定の $S^z_{system}$ を持つ。この状態はDMRGの 次ステップのブロック基底であり、ブロックのスピンz成分の総和 $S^z_{block}(L+2)$ は $S^z_{system}(L)$ と対応 している。

ハミルトニアンがこの性質を持っているとき、容易に磁化曲線を計算することができる。磁場 hによるエネルギー項(ゼーマン項);

$$H_{Zeeman} = -h \sum_{i} S_i^z = -h S_{total}^z \tag{8}$$

を考えると、元のハミルトニアンHが $S_{total}^{z}$ と可換であれば $H + H_{Zeeman}$ も可換であり、 $H_{Zeeman}$ を加えても各固有状態は不変であるが、固有値のみが磁場によって以下の様に変化する;

 $E_0(S_{total}^z, h) = E_0(S_{total}^z, h = 0) - hS_{total}^z$ (9)

 $E_0(S_{total}^z, h = 0)$ は各 $S_{total}^z$ 部分空間の最低エネルギーである。磁化曲線は各磁場に対して最低のエネルギーを持つ状態の磁化の値を示したものであり、 $E_0(S_{total}^z, h) = E_0(S_{total}^z + 1, h)$ を満たすhで磁化が $S_{total}^z$ から $S_{total}^z + 1$ に変化するようプロットすればよい。つまり各 $S_{total}^z$ 部分空間での最低固有値が分かっていれば、わざわざゼーマン項を加えた計算を行わずとも磁化曲線を得られるのである。

DMRG 法で $S_{total}^{z}$ が大きい値での最低固有値を計算するとき1つ問題が生じる。厳密対角化で は計算したいサイト数 $L_{last}$ 及び $S_{total}^{z}(L_{last})$ での計算を初めから行うことができる。しかし DMRG 無限系法ではサイト数は徐々に増やしてゆくため、0 や1 などの小さな値でない限り計算を進め るなかで $S_{total}^{z}$ の値を増加させてゆく必要がある。この論文では DMRG 無限系法の途中での  $S_{total}^{z}(L)$ は次の様に設定した;

$$S_{total}^{z}(L) = \operatorname{ceil}[S_{total}^{z}(L_{last})\frac{L}{L_{last}}]$$
(10)

ここで ceil は切り上げである。このような設定にした理由は、異なるサイト数でも磁化 $M = S_{total}^{Z}/L$ が同じ値ならば同じ性質を持ったエネルギー固有状態となり、DMRG 計算の途中での保持基底を決定するのに妥当な状態と考えられるためである。

#### 2.2 無限系法初期推定

DMRG 無限系法では小さな系の固有状態から決定した保持基底を用いて大きな系の状態を精度良く求めている。これを繰り込み群の観点から見ると、系が大きくなるにつれパラメータ空間上で熱力学的極限の固定点へ近づいていると解釈される。つまり系が大きくなると繰り込み変換で残される基底はほとんど同じ*S<sup>2</sup>block*と密度行列固有値を持つようになり、またこれらの基底を用いて計算される全系の固有状態の各成分も前のステップでの固有状態の各成分と近い値になる。この考えを元にして DMRG 無限系法の初期推定が考案された[5]。

無限系法初期推定を行うには、まず基底の対応付けが必要になる。先に述べたように、ハミルトニアンが*S*<sup>z</sup><sub>total</sub>と交換するならば、密度行列固有状態(=保持基底)も一定の*S*<sup>z</sup><sub>block</sub>を持つ。これらを各*S*<sup>z</sup><sub>block</sub>で固有値の大きさ順に並べ替えたとき、n番目に大きい基底を|*S*<sup>z</sup><sub>block</sub>,*n*)<sub>L</sub>と表す。この基底に対し、同じ*S*<sup>z</sup><sub>block</sub>,*n*でサイト数がL'のときのステップでの基底|*S*<sup>z</sup><sub>block</sub>,*n*)<sub>L'</sub>を対応付ける。そしてL'での全系の固有状態

$$|\psi\rangle_{L'} = \sum_{i1,i2,i3,i4} \psi_{i1i2i3i4} |i1\rangle_{L'} |i2\rangle |i3\rangle |i4\rangle_{L'}$$
(11)

より、この $\psi_{i1i2i3i4}$ を用いて初期推定状態| $\psi_{initial}$ )<sub>L</sub>

$$|\psi_{initial}\rangle_L = \sum_{i_1, i_2, i_3, i_4} \psi_{i_1 i_2 i_3 i_4} |i_1\rangle_L |i_2\rangle |i_3\rangle |i_4\rangle_L$$
(12)

を設定する。ここで $|i1\rangle_{L(L')}$ , $|i4\rangle_{L(L')}$ はそれぞれサイト数L(L')での system 及び environment のブ ロックの基底であり、 $|i1\rangle_{L'}$ と $|i1\rangle_{L}$ 、 $|i4\rangle_{L'}$ と $|i4\rangle_{L}$ は対応している。また $|i2\rangle$ , $|i3\rangle$ は system 及び environment のスピンの基底である。なお $S^{z}_{block}$ となるブロックの基底の数が一致しないことがあ るが、サイト数L'での基底が余るならサイト数Lでの基底の数に合わせてnの大きいものを打ち切 り、逆に足りないならば対応付けできない初期推定状態の成分は0と設定する。また基底の対応 付けには $S^{z}_{block}$ の一致が必要なため、半整数スピン鎖の場合はブロック部分のサイト数の偶奇性が 一致するL' = L - 4に設定するが、整数スピンではこの偶奇性によらず $S^{z}_{block}$ を一致させることが できるのでL' = L - 2とできる。

以上のようにして初期推定状態の元を作ることができるが、このままでは初期推定はできない。 なぜならブロックの基底は密度行列の固有状態であり、符号の任意性が残っているためである。 これにより初期推定状態の各成分の絶対値は真の固有状態と一致しているものの、符号がランダ ムに変わってしまっている。Ref. 5 では1次元反強磁性鎖で成り立つ Marshall's sign rule を利 用した符号調整を行い、*S* = 2ハイゼンベルグ鎖の基底状態と第一励起状態の初期推定を行ってい る。しかし Marshall's sign rule は特定の場合でのみ成り立つ法則であり、例えばフラストレーシ ョンがある場合には厳密には成立しない。また Marshall's sign rule の表式からスピンが半整数 の場合には虚数が現れてしまうのでそのままでは利用できない。Ref. 6 ではハミルトニアンや上 昇演算子の行列要素から符号調整を行っている。この方法はスピンやモデルによらず適用できる が、調整がうまくいかないことが多い。しかし本論文で提案する改良方法はある程度の符号調整 がなされているほうが好ましく、この方法と共に用いることでほぼ完璧に調整ができるようにな る。そこで Ref. 6 の演算子からの符号調整方法について説明しておく。



図2 ブロック部分のハミルトニアン $H_b(E)$ とブロック右端スピンの上昇演算子 $S_r^+(右)$ 。ハミルトニアンは  $S^z_{block}$ 一定の部分空間でのみ値を持ち、上昇演算子は $S^z_{block}$ が1だけ大きい基底との要素のみ値を持つ。

ハミルトニアンHが $S_{total}^{z}$ と交換するとき、ブロック部分の基底も一定の $S_{block}^{z}$ を持つ。この基底 を $S_{block}^{z}$ ごとに密度行列の大きさ順に並べ替えると、ブロック部分のハミルトニアンH<sub>b</sub>とブロック 右端スピンの上昇演算子 $S_{r}^{+}$ は図2のようになる。 $H_{b}$ は $S_{block}^{z}$ が同じ部分空間のみでのみ値を持ち (図2左)、またブロック右端スピンの上昇演算子 $S_{r}^{+}$ は $S_{block}^{z}$ と $S_{block}^{z}$ +1の行列要素のみ値をもつ(図 2左)。この性質を利用して、同じ $S_{block}^{z}$ では、最大固有値を持つ基底 $|S_{block}^{z}, 1\rangle$ に対し ( $S_{block}^{z}, 1|H_{b}|S_{block}^{z}, n$ ) (n > 1)が正になるように $|S_{block}^{z}, n$ )の符号を設定し、また異なる $S_{block}^{z}$ では、 く $S_{block}^{z}, 1|S_{r}^{+}|S_{block}^{z} + 1, 1$ )が正になるよう $|S_{block}^{z} + 1, 1$ )の符号を調整する。図2において〇で表され ている行列要素が調整に利用されるものである。全基底の符号反転を除けばこの計算によって一 意に符号を決定できる。

この調整の妥当性について原論文では詳しく触れられていないが、定性的には以下の様に説明 できる;基底の密度行列固有値が大きいほど対応するブロックの演算子の行列要素は大きな値を 持ち、計算される全系の固有状態に大きく影響する傾向があるだろう。そのような固有状態に大 きく影響する行列要素の符号を固定することで符号調整を行うことができる。

しかしこの計算がうまくいく場合は少ない。図3にm = 150でのS = 1/2ハイゼンベルグ鎖の基 底状態( $S_{total}^{z}$  = 0最低エネルギー状態)とS = 1ハイゼンベルグ鎖の第一励起状態( $S_{total}^{z}$  = 1)の計算 例を示す。横軸はスピン鎖の長さL、縦軸は初期推定状態のエネルギー期待値 $E_{ig}$ と計算された基 底エネルギー $E_{0}$ の相対誤差の常用対数log10( $|(E_{0} - E_{ig})/E_{0}|$ )である。白丸は上記の手順で得られ た初期推定状態の相対誤差であり、青線は符号調整が限界まで行われた場合の初期推定状態の相 対誤差である。この限界符号調整状態| $\psi_{max}$ 〉は初期推定状態と各成分の絶対値は同じであるが、 符号を基底状態の成分のものと同じになるよう変えたものである。つまり真の基底状態| $\psi_{0}$ 〉=  $\sum_{i}\psi_{i}|e_{i}〉と初期推定状態|\psi_{initial}〉=\sum_{i}\psi'_{i}|e_{i}〉に対し、|<math>\psi_{max}$ 〉=  $\sum_{i}\psi^{max}_{i}|e_{i}〉$ は

$$\begin{aligned} |\psi_i^{max}| &= |\psi_i'|\\ san(\psi_i^{max}) &= san(\psi_i) \end{aligned} \tag{13}$$

を満たす。符号の任意性を考えたとき、もし完璧に符号調整ができているならば〈 $\psi_0 | \psi_{initial}$ 〉~1であり、ほぼすべての*i*に対し $\psi_i \psi'_i \ge 0$ が期待される。ゆえにこの $|\psi_{max}$ 〉の相対誤差と比較することでどれだけ符号調整ができていたか見積もることができる。



図3 *S* = 1/2反強磁性ハイゼンベルグ鎖の基底状態計算における演算子からの符号調整での初期推定誤差。 白丸は実際の初期推定状態のエネルギーの相対誤差であり、青線は限界符号調整状態のエネルギーの相対誤 差である。どちらのグラフも白丸と青線は一致しておらず、符号調整は失敗している。

グラフからこの初期推定方法の不完全さは明らかである。*S* = 1/2の場合(図3左)は約半分程の 計算では初期推定がなされているが、そうでない点も多々あり値がばらついている。このとき各 演算子の符号と計算される基底状態の間に単純な関係は存在していないと考えられる。また*S* = 1 の場合(図3右)は相対誤差の値は悪いながらもほぼ一定の値になっている。このとき演算子の符 号と基底状態の間には比較的単純な関係が成り立っているものの、単に演算子成分を正にするよ うな関係ではないと思われる。もちろんモデルや計算したい状態によってはこのアルゴリズムで も完璧に符号調整ができることもあるかもしれないが、毎回符号の関係を調べるのは手間である し簡単な関係とも限らない。ゆえに符号法則によらず適用可能な符号調整方法が求められる。

### 2.3 初期推定符号調整の改良

ー般的に適用可能な符号調整として、エネルギー期待値を利用する方法を考えた。初期推定状態  $|\psi_{initial}\rangle = \sum_i \psi'_i |e_i\rangle$ 及びその第 j 成分を反転させた状態  $|\psi_{initial}^{(j)}\rangle = \sum_i \psi'_i |e_i\rangle - 2\psi'_j |e_j\rangle = |\psi_{initial}\rangle - 2\psi'_j |e_j\rangle$ と、真の基底状態  $|\psi_0\rangle$ との内積  $(\psi_0|\psi_{initial}\rangle, (\psi_0|\psi_{initial}\rangle)$ を考えると、符号が正しいものの方が1に近くなる。例えば、第 j 成分の符号が  $|\psi_{initial}^{(j)}\rangle$ の方が正しいならば

$$|\langle \psi_0 | \psi_{initial} \rangle| < |\langle \psi_0 | \psi_{initial}^{(j)} \rangle| < 1$$
(14)

$$\langle \psi_{initial} | H | \psi_{initial} \rangle > \langle \psi_{initial}^{(j)} | H | \psi_{initial}^{(j)} \rangle \tag{15}$$

という関係が成り立つと期待される。もちろん厳密な式ではないが、変分法的に考えても(15)式の

関係が成り立つとき、 $|\psi_{initial}^{(j)}\rangle$ はより基底状態に近いだろう。

この考えを元にした改良方法の具体的な手順は次のようになる;

- 1 初期推定状態 $|\psi_{initial}\rangle$ と第j成分が反転した状態 $|\psi_{initial}^{(j)}\rangle$ のエネルギー期待値の差 $dE = \langle \psi_{initial}^{(j)} | H | \psi_{initial}^{(j)} \rangle \langle \psi_{initial} | H | \psi_{initial} \rangle$ を計算
- 2 dEが負なら $|\psi_{initial}^{(f)}$ )を新たな初期推定状態に採用
- 3 この計算を全成分に対し繰り返す
- 4 1~3の反転操作を1ループとし、ループ間で状態が変わらなくなるまで繰り返す

ここでいくつか注意事項がある。まずエネルギー差dEについて、この値を毎回内積計算で求める必要はない。 $|\psi_{initial}^{(j)}\rangle = |\psi_{initial}\rangle - 2\psi'_{j}|e_{j}\rangle$ となることに注意すれば、 $\langle \psi_{initial}^{(j)}|H|\psi_{initial}\rangle = \langle \psi_{initial}|H|\psi_{initial}\rangle - 4\psi'_{j}\langle e_{j}|H|\psi_{initial}\rangle + 4(\psi'_{j})^{2}\langle e_{j}|H|e_{j}\rangle$ より

$$dE = \langle \psi_{initial}^{(j)} | H | \psi_{initial}^{(j)} \rangle - \langle \psi_{initial} | H | \psi_{initial} \rangle$$
  
=  $-4\psi_j' \langle e_j | H | \psi_{initial} \rangle + 4(\psi_j')^2 \langle e_j | H | e_j \rangle$  (16)

となる。あらかじめ $H|\psi_{initial}\rangle$ を計算しておけば $\langle e_j|H|\psi_{initial}\rangle$ はその第j成分を呼び出すだけで済む。そして(16)式のdEが負になった時のみ反転を実行し、 $H|\psi_{initial}\rangle$ も対応したものに変化させる。反転後の $H|\psi_{initial}^{(j)}\rangle$ は

$$H|\psi_{initial}^{(j)}\rangle = H|\psi_{initial}\rangle - 2\psi_{i}'H|e_{i}\rangle$$
(17)

であるので、ハミルトニアン行列の第*j*列目のみを呼び出し、それを2ψ'f倍したものを*H*|ψ<sub>initial</sub>)から引けばよい。これらのことに注意すれば、1 ループあたりの計算量はハミルトニアン行列と状態ベクトルの積の計算1回分以下となる。

またループの終了条件も重要になる。厳密に状態が変わらなくなるまでループ計算を繰り返し ていては計算時間がかかりすぎてしまう。初期推定状態はあくまで前ステップからの推定であり、 数値計算誤差や有限サイズ効果により厳密には真の基底状態に一致しない。ゆえにある程度符号 調整を行い、ループ間であまり状態が変わらなくなれば処理を終えてよい。具体的には以下のど ちらかの条件を満たした時ループを終了するよう設定した;

$$1 - \langle \psi_{initial}(l) | \psi_{initial}(l-1) \rangle < e_s \tag{18}$$

 $|(\langle E_{initial}(l) \rangle - \langle E_{initial}(l-1) \rangle) / \langle E_{initial}(l) \rangle| < e_s \tag{19}$ 

ここでψ<sub>initial</sub>(l)はl回目のループ終了時の初期推定状態であり、(E<sub>initial</sub>(l))はそのエネルギー期待 値、またe<sub>s</sub>は符号調整の設定誤差である。このe<sub>s</sub>を適切な値に設定することでほとんど計算コス トをかけずに符号調整を行うことができる。(18)式の条件はループ間で状態が変わらない場合の 式であるが、(19)式はあまり基底状態にかかわらない基底まで保持されている場合を考えての条 件式である。密度行列固有値の大きな基底は対応する初期推定状態の成分も大きく、符号反転に よってエネルギーも大きく変化する。しかし固有値の小さな基底に対応する成分は反転エネルギ ー差が小さくループを繰り返してもなかなか符号が決定されないため、(18)式の条件に引っかか りづらい。そのような場合でもエネルギー期待値はほとんど同じ値になっており、状態だけでな く(19)式のようにエネルギー期待値についても条件を課すことで効率的に計算できる。



図4 S = 1/2ハイゼンベルグ鎖の基底状態計算における1成分毎の期待値調整。期待値調整の みでは初期推定は不完全だが(左)、演算子からの調整と併用することで完璧に調整される(右)。

図3で見たように演算子からの調整は不完全であるが、期待値からの調整も単体ではうまくい かない。図4はm=150 でのS = 1/2ハイゼンベルグ鎖の基底状態の初期推定計算における演算子 からの調整の適用・非適用時の比較である。これからわかるように、期待値からの符号調整のみ でも初期推定ができていない点が散見される(図4左)。これは各成分を反転させ状態を変えてい く中で、基底状態から離れているがどの1成分を反転させてもそれ以上エネルギーが下がらない 極小点に陥ってしまったためと思われる。一方、両方の調整を共に適用した場合(図4右)は、すべ ての点で限界符号調整状態の誤差と一致しており完璧に符号調整ができていることがわかる。演 算子調整のみ、あるいは期待値調整のみでの計算で初期推定ができていない点は一致してはいな い。つまり両者の方法を同時に適用することでお互いに調整ができない場合を補い合い、すべて の点で完璧に符号調整ができたといえる。なお誤差が大きくなっている点がいくつか見られるが、 符号調整とは別の原因によるものであり、これについては2.5 で詳しく述べる。

このように演算子からの調整と期待値からの調整を併用すれば完璧に符号調整ができるが、極 まれに失敗してしまうこともある。事実、我々が行った計算のうち 4.2 の*S* = 1ハイゼンベルグ鎖 の高磁場領域の計算において 1,2 点そのような場合が存在した。もちろんほとんどの点では失敗 していないため、1,2 点符号調整ができておらずとも全体の計算時間にはほとんど影響しない。し かしこの改良を施しても初期推定を失敗することがあるという実証であり、他のモデルでは頻繁 に起こることもあるかもしれない。そこでさらに安定的に符号調整ができる方法を考えた。

上記の改良方法は初期推定状態のある1成分のみに着目しエネルギー期待値から符号調整を行っている。しかし問題なのは初期推定状態成分の符号ではなくブロックの基底の符号であるため、 エネルギー期待値からの符号調査もブロックの基底毎に行う方が趣旨に沿っている。ただし、そ

8

のような計算を行うには1度に初期推定状態の複数の成分を反転させてエネルギー差を調べる必要がある。その場合のアルゴリズムについて考えよう。あるブロック基底 $|j\rangle_b$ を反転させたとき符号が反転する全系の基底の集合を $A_i$ をする。つまり、 $|\psi_{initial}\rangle = \sum_i \psi'_i |e_i\rangle$ に対し $|j\rangle_b$ を反転させた 状態 $|\psi_{initial}^{(j)b}\rangle$ は

$$|\psi_{initial}^{(j)_b}\rangle = |\psi_{initial}\rangle - \sum_{i \in A_j} 2\psi_i'|e_i\rangle$$
(20)

となる。
$$|\psi_{initial}^{(j)b}\rangle$$
のエネルギー期待値は  
 $\langle \psi_{initial}^{(j)}|H|\psi_{initial}^{(j)}\rangle = \langle \psi_{initial}|H|\psi_{initial}\rangle - 4\sum_{i\in A_j}\psi_i'\langle e_i|H|\psi_{initial}\rangle + 4\sum_{i,k\in A_j}\psi_i'\langle e_i|H|e_k\rangle$   
 $= \langle \psi_{initial}|H|\psi_{initial}\rangle - 4\sum_{i\in A_j}\psi_i'\langle e_i|H|\psi_{initial}\rangle + 4\sum_{i\in A_j}\psi_i'\langle e_i|H|e_i\rangle + 8\sum_{i< k\in A_j}\psi_i'\langle e_i|H|e_k\rangle$ 

$$(21)$$

となる。1行目から2行目にはハミルトニアンのエルミート性を利用した。上式の2段目4項に ハミルトニアンの非対角成分が現れるが、ハミルトニアンの疎行列性を利用することでこの計算 量を減らすことができる[3]。これよりエネルギー差dEは

$$dE = -4\sum_{i \in A_j} \psi'_i \langle e_i | H | \psi_{initial} \rangle + 4\sum_{i \in A_j} \psi'_i \langle e_i | H | e_i \rangle + 8\sum_{i < k \in A_j} \psi'_i \langle e_i | H | e_k \rangle$$
(22)

となる。dE < 0のとき $|\psi_{initial}^{(j)_b}$ )を新たな初期推定状態に採用し、 $H|\psi_{initial}^{(j)}$ )の計算を行う;

$$H|\psi_{initial}^{(j)}\rangle = H|\psi_{initial}\rangle - \sum_{i \in A_j} 2\psi_i' H|e_i\rangle$$
(23)

以上の計算をすべてのブロック基底に対して行い、それを1ループとして(17)(18)式の条件に引っ かかるまで繰り返せばよい。

1成分毎の計算と比べると1度に多くの成分を変化させており、また反転の自由度が全系の状態数から保持基底数mに減少しているため、極小点に陥りづらくなると期待される。図5はm=150でのS = 1/2ハイゼンベルグ鎖の基底状態計算において、演算子からの調整を行わずにこちらの方法のみで初期推定を行った場合のグラフである。1成分毎の場合とは異なり、演算子からの調整を行わずとも完璧に符号調整がされている。このようにブロック基底毎に反転調査を行うことで高い精度で符号調整ができるが、演算子からの符号調整を共に適用することでさらに安定するだろう。またブロック基底毎の符号調整は1成分毎の場合より計算量が多いため、これ単体で調整が可能な場合でも演算子からの符号調整をしておくことで計算時間の短縮につながる。完璧に符号調整ができる3つの初期推定計算

- I 演算子からの調整+1成分毎の調整
- Ⅱ ブロック基底毎の調整
- Ⅲ 演算子からの調整+ブロック基底毎の調整

での計算時間はおおよそ  $\Pi > \Pi \ge I$  となった。I の調整で初期推定に失敗することがよくある場合では  $\Pi$ ,  $\Pi$ の方が速くなることもあるかもしれないが、今回行った計算ではほとんどが I で調整できたため、特別の断りがない限り初期推定とは I の計算を指していると注意されたい。



図5 *S* = 1/2ハイゼンベルグ鎖の基底状態計算におけるブロック基底毎の調整に よる初期推定誤差。演算子からの調整を行わずとも完璧に符号調整がされる。

## 2.4 近似推定による初期推定状態の改良

ここまで初期推定の符号問題を取り扱ってきたが、ここでは符号調整を行った上で初期推定状態成分の絶対値を変化させ、より基底状態に近い状態を作ることを考える。3章で示すが、初期推定誤差は有限サイズ効果と同じL依存性を持ち $L \to \infty(1/L \to 0)$ で0になる。つまり真の基底状態| $\psi_0$ \_Lと初期推定状態| $\psi_{initial}$ \_Lの差| $\Delta\psi_1$ \_LはL<sup>-1</sup>の関数で表され、L<sup>-1</sup>が十分小さければ線形近似が成り立つと考えられる;

$$|\Delta\psi_{1}\rangle_{L} = |\psi_{0}\rangle_{L} - |\psi_{initial}\rangle_{L} \cong \frac{|\psi_{0}\rangle_{L'} - |\psi_{initial}\rangle_{L'}}{{L'}^{-1} - {L''}^{-1}} \left(L^{-1} - {L'}^{-1}\right) = \frac{|\Delta\psi_{1}\rangle_{L'}}{\Delta{L'}^{-1}} \Delta L^{-1}$$
(24)

ここで $|\psi_0\rangle_{L'}$ は $|\psi_{initial}\rangle_L$ の元になるサイト数L'での基底状態であり、 $\Delta L^{-1}$ は初期推定元の状態のサイト数との逆数の差 $L^{-1} - L'^{-1}$ 、 $\Delta L'^{-1}$ はL'での推定元状態のサイト数L''との逆数の差 $L'^{-1} - L''^{-1}$ である。この式から改良初期推定状態 $|\psi_{imp1}\rangle_L$ 

$$|\psi_{imp1}\rangle_{L} = |\psi_{initial}\rangle_{L} + \frac{|\Delta\psi_{1}\rangle_{L'}}{\Delta{L'}^{-1}}\Delta{L}^{-1}$$
(25)

を考えると、 $|\psi_0\rangle_L$ のテイラー展開と $\Delta L^{-1}$ の1次まで一致する。つまり $|\psi_{imp1}\rangle_L$ は $\Delta L^{-1}$ の1次近似であり、この観点では $|\psi_{initial}\rangle_L$ は0次近似であるといえる。また $|\psi_0\rangle_L$ と $|\psi_{imp1}\rangle_L$ の差 $|\Delta\psi_2\rangle_L$ 

$$|\Delta\psi_2\rangle_L = |\psi_0\rangle_L - |\psi_{imp1}\rangle_L \tag{26}$$

を考え、これの線形近似からさらに改良した $|\psi_{imp2}\rangle_{L}$ 

$$|\psi_{imp2}\rangle_{L} = |\psi_{initial}\rangle_{L} + \frac{|\Delta\psi_{1}\rangle_{L'}}{\Delta{L'}^{-1}}\Delta{L}^{-1} + \frac{|\Delta\psi_{2}\rangle_{L'}}{\Delta{L'}^{-1}}\Delta{L}^{-1}$$
(27)

を作ることもできる。このとき $|\psi_0\rangle_L$ と $|\psi_{imp2}\rangle_L$ はLが十分大きければ $\Delta L^{-1}$ の2次まで一致する。同様の手順で次々に高次の改良初期推定状態を作ることができるが、ある程度のオーダーになると数値計算誤差の影響で推定精度は上がらなくなるだろう。

図6はm=150でのS = 1/2ハイゼンベルグ鎖の基底状態計算における改良初期推定誤差である。 非改良状態(0次推定)に比べ改良推定(1次推定)は明らかに誤差が小さくなった。切り捨て 誤差は $10^{-10}$ 程であったが、同じオーダー程の初期推定ができている。多少値がばらついているの は何らかの原因で非改良推定状態や基底状態に誤差が出ると改良初期推定状態もそれを引き継い で誤差が生じるためである。このばらつきの原因やその改良については 2.5 で述べる。1次推定 の時点で値がばらつき $L^{-1}$ にあまり依存しなくなっているため、2次推定の計算では誤差はさらに 大きくばらつきあまり計算量は減らなかった。系によっては0次推定の時点で値がばらつくこと もあるだろう。その場合は1次推定を行っても改良されないと思われる。



図6 *S* = 1/2ハイゼンベルグ鎖の基底状態計算における近似改良初期推定誤差。非改良初期推定(白丸)に対し、1次推定(四角)は誤差が減っているが、2次推定(三角)は大きくばらついている。

#### 2.5 基底対応付けの改良

図4,5で符号調整は完璧にされているのにもかかわらず、誤差が大きくなる点がいくつかある。 この異常性の原因は単なる数値計算誤差ではない。もし数値計算誤差により異常な基底状態や密 度行列固有状態が計算されたとすれば、その状態から初期推定を行う点でも誤差は大きくなるは ずである。しかし実際には異常点は独立しており、その前後で初期推定誤差のL依存性はなめらか に変化している。詳しく調べてみると初期推定での基底の対応付けが問題であるとわかった。2.2 で説明したように初期推定は保持基底及びエネルギー固有状態が繰り込みの固定点へ向かうこと を利用しており、密度行列の各固有値も一定値に収束してゆく。しかし収束値や収束速度はそれ ぞれ異なり、徐々に系を大きくしてゆく中で固有値の大きさが入れ替わることがある。すると初 期推定での基底の対応付けは密度行列固有値の大きさ順で行うため、本来対応していない基底同 士が対応付けられてしまいこのような異常性が現れたのである。

この異常性を解消するには基底の対応付けを修正する必要がある。そこで対応付ける基底間で 内積計算を行うことを考えた。保持基底 $|S^z_{block}, n\rangle_L$ は密度行列固有状態であり1ステップ前のブロ ック基底 $|i1'\rangle_{L-2}$ と system のスピン基底 $|i2'\rangle$ を用いて

$$|S_{block}^{z}, n\rangle_{L} = |i1\rangle_{L} = \sum_{i1', i2'} C_{i1'i2'}^{(i1,L)} |i1'\rangle_{L-2} |i2'\rangle$$
(28)

と表現される。同じく対応付け候補の基底 $|S_{block}^z, n\rangle_{L'}$ も

$$|S_{block}^{z}, n\rangle_{L'} = |i1\rangle_{L'} = \sum_{i1', i2'} C_{i1'i2'}^{(i1,L')} |i1'\rangle_{L'-2} |i2'\rangle$$
(29)

と表される。そして各成分の絶対値 $|C_{i1'i2'}^{(i1,L)}|$ , $|C_{i1'i2'}^{(i1,L')}|$ をその大きさ順に並べ替え、その内積

$$P(|S_{block}^{z}, n\rangle_{L}, |S_{block}^{z}, n\rangle_{L'}) = \sum_{i} \left| C_{(i)}^{(i1,L)} \right| \left| C_{(i)}^{(i1,L')} \right|$$
(30)

を計算した。ここで $C_{(i)}^{(i1,L)}$ は $C_{i1'i2'}^{(i1,L)}$ のうち絶対値がi番目に大きい成分である。もし $|S_{block}^{z},n\rangle_{L}$ と $|S_{block}^{z},n\rangle_{L'}$ が対応付けるべき基底同士なら、 $C_{i1'i2'}^{(i1,L)}$ の絶対値の分布は一致するはずなので、(30)式の内積をとれば非常に1に近くなると予想される。実際に計算してみたところ、絶対値順内積の値は対応付けるべき基底間では0.9999程、そうでないときには0.8~0.9程になり、対応付けるべき基底かどうかを判定することができた。

以上の計算を基にした基底対応付けの改良手順は次のようになる;

- 1 非改良時と同じく保持基底を固有値の大きさ順に対応付け
- 2  $|S_{block}^z, n\rangle_L$ に対し $|S_{block}^z, n\rangle_{L'}$ 及び $|S_{block}^z, n+1\rangle_{L'}$ との絶対値順内積 $P(|S_{block}^z, n\rangle_L, |S_{block}^z, n\rangle_{L'}), P(|S_{block}^z, n\rangle_L, |S_{block}^z, n+1\rangle_{L'})$ を計算
- 3 もし $P(|S_{block}^{z}, n\rangle_{L}, |S_{block}^{z}, n+1\rangle_{L'})$ の方が1に近ければ $|S_{block}^{z}, n\rangle_{L}$ は $|S_{block}^{z}, n+1\rangle_{L'}$ と対応付け、  $|S_{block}^{z}, n+1\rangle_{L}$ は $|S_{block}^{z}, n\rangle_{L'}$ と対応付けるように修正
- 4 以上の修正をn = 1から順に実行

この計算で対応付けの修正候補基底は $|S^z_{block}, n+1\rangle_{L'}$ のみだが、系によっては $|S^z_{block}, n+2\rangle_{L'}$ と対応付ける必要が出てくることも考えられる。しかし今回行った計算では上記の改良対応付けによってすべての場合で修正できた。



図7 *S* = 1/2ハイゼンベルグ鎖の基底状態計算における対応付け改良初期推定誤差。 すべての計算で誤差のばらつきが改善されている。

図7は基底対応付け改良を施した場合のm=150でのS = 1/2ハイゼンベルグ鎖の基底状態計算 における初期推定誤差である。図6がこの改良を行わない場合であるのでそちらも参照されたい。 0次近似では誤差が大きくなる点が全て消え、確かに改良することができた。また0次近似で完 壁に初期推定できているため1次近似でもばらつきが抑えられ、その結果2次近似でさらに誤差 を減らすことができた。しかし $L\sim170$ で誤差が大きくなり近似推定があまりうまくいっていない 点が存在する。これは系を大きくしていったときの状態の変化が原因であると思われる。誤差が 大きくなる点では基底状態計算での $S_{total}^{z}$ 一定の状態数が変化していて、また初期推定時の(30)式 の内積計算で突出して1に近い値を示す対応基底が存在しない基底が現れた。密度行列固有値の 大きさの入れ替えが保持されていた基底と切り捨てられていた基底の間で起こったり、あるいは 系を大きくしていくとエネルギー固有状態のL依存性が変化したりする場合、初期推定状態と真の 状態の差を $L^{-1}$ の線形近似で表すことはできないため、誤差が大きくなったと考えられる。このよ うな異常性は DMRG 法の特性と系の性質に由来するため、単なる初期推定計算の工夫では改善 は難しいだろう。

なお密度行列固有値の入れ替わりは*S* = 1/2ハイゼンベルグ鎖の基底状態では頻繁に起こるが、 第一励起や*S* = 1の場合にはあまり起こらず上記の修正を行ってもほとんど改良されない。ゆえに 以下の計算で基底対応付けの改良を行っているのは 3.1 の基底状態計算のみである。

13

#### 2.6 高磁場領域計算時の初期推定

2.1 で述べたように DMRG 法によって高磁場領域の基底状態、つまり大きな $S_{total}^z$ での最低エ ネルギー状態を計算したい場合には、(10)式の様にサイト数を増やしてゆく中で $S_{total}^z$ も大きくし ていく必要があるが、そのような場合に初期推定は行えないだろうか。計算途中で $S_{total}^z$ が変わる ということは保持基底を決めるためのターゲット状態が変化するということである。そうすると 2.2 の冒頭で述べた固定点への漸近という考え方が成り立たなくなるように思われる。また初期 推定状態は推定元の状態と同じ $S_{total}^z$ となるため、そもそも $S_{total}^z$ が変化した初期状態を作ることが できない。しかし熱力学的極限で考えると、磁化曲線が滑らかになるなら $S_{total}^z$ が1や2違っても 状態は同じであり、また磁化 $M = S_{total}^z/L$ が一致するならば同じ性質を持った状態が実現するはず である。そこで高磁場領域での初期推定に利用できる状態が存在するのか調べてみた。

初期推定状態は初期推定元の状態を各成分の絶対値はそのままに符号を適切に変化させたもの である。高磁場領域の初期推定計算で問題なのは基底の対応付けの仕方であり、初期推定ができ るならば推定元と推定対象の基底状態の成分の絶対値の分布は一致するはずである。そこで(30) 式の保持基底の内積計算と同様に、DMRG 計算で得られる各基底状態に対する絶対値順内積計算 をしてみた。表1は $L_{last} = 200$ 、 $S_{total}^{z}(L_{last}) = 10$ のS = 1/2ハイゼンベルグ鎖での計算結果であ る。この計算では $S_{total}^{z}(L = 4) = 1$ から $S_{total}^{z}(L = 22) = 2$ ,  $S_{total}^{z}(L = 42) = 3$ , …,  $S_{total}^{z}(L = 182) = 3$ 10と 20 サイト大きくなる毎に $S_{total}^z$ を 1 ずつ上げてゆく。L = 178は $S_{total}^z = 9$ となってから 9 ス テップ目の計算であり、同じくS<sup>z</sup><sub>total</sub> = 9のL = 174から初期推定をしている。このとき表1の178 -174の値(青文字)はほぼ1になっており、初期推定ができるならばこの計算で1に近い値が 得られることが分かる。 $S_{total}^{z} = 10$ となった直後のL = 182の行を見ると、通常の初期推定で利用 する 4 サイト小さいL = 178の基底状態との値は178-174の時ほどは 1 に近くない。いろいろな 状態との内積計算を行ってみたところ、L=142との値が1に近く(赤文字)、この状態から初期 推定ができる可能性があることが分かった。これらの状態をより詳しく調べると、中心2スピン の対応はそのままに、ブロック基底の対応が $|S_{block}^z, n\rangle_{L=142} \leftrightarrow |S_{block}^z + 1, n\rangle_{L=182}$ となっていた。 これは全系の状態はほとんど同じであり、ブロック基底も類似しているが、サイト数が増えた分  $S^{z}_{block}$ の値が一様に大きくなったのであろう。また $S^{z}_{total} = 8$ となってから 9 ステップ目の計算で あるL = 158からは初期推定ができそうにないのは、基底の違いが原因であると思われる。

	L = 178	L = 174	L = 162	L = 158	L = 142
			$(S_{total}^{z} = 9$ 第1step)		$(S_{total}^{z} = 8 $ 第 1step)
L = 178	1	0.99999	0.90756	0.98046	0.93389
$(S_{total}^{z} = 9$ 第 9step)					
L = 182	0.92513	0.92534	0.98027	0.92293	0.99927
$(S_{total}^{z} = 10$ 第 1step)					

表1 様々な状態間の絶対値順内積計算。初期推定ができる178-174間の値はほとんど1になっている(青文字)。L = 182は $S_{total}^{z} = 10$ になってから1ステップ目の計算であるが、 $S_{total}^{z} = 8$ になってから1ステップ目の計算であるL = 148との値が他のものに比べ1に近い(赤文字)。

L = 182,142はどちらも $S_{total}^{z}$ 増加直後であり、この時のブロック基底は1ステップ前の異なる  $S_{total}^{z}$ での基底状態から決められているため、このステップの基底状態を計算するのに最適化され ていない。対してL = 158のブロック基底は同じ $S_{total}^{z}$ の基底状態から計算されたものであり、この 基底状態を計算するのに適切なものになっている。このように高磁場領域の初期推定では推定対 象の状態がどのような基底で計算されるかも重要になる。

以上より、高磁場領域の初期推定では $S_{total}^{z} - 2$ の状態の中で $S_{total}^{z}$ 増加後ステップ数が同じもの から基底の対応付けを $|S_{block}^{z} + 1, n\rangle_{L} \leftrightarrow |S_{block}^{z}, n\rangle_{L'}$ として初期推定状態を作ればよいと思われる。 もちろん $S_{total}^{z}$ が変化せず通常の初期推定が適用できる部分はそちらを使えばよい。図8は $L_{last} = 200$ 、 $S_{total}^{z}(L_{last}) = 100S = 1/2$ ハイゼンベルグ鎖の初期推定誤差である。保持基底数m = 200で 切り捨て誤差は10<sup>-11</sup>であった。20 サイト大きくなる毎(DMRG10 ステップ毎)に $S_{total}^{z}$ を1 ず つ上げてゆくが、 $S_{total}^{z}$ 増加後の3ステップは推定元との $S_{total}^{z}$ の違いや基底の違いから通常の初 期推定ができない。ゆえにこれらに対しては $S_{total}^{z} - 2$ の状態からの推定法を適用した。グラフか らわかるように、 $S_{total}^{z}$ が変化する点においてもそうでない点ほどではないが初期推定ができてい る。同一の $S_{total}^{z}$ での推定はL - 4の状態から計算しており、異なる $S_{total}^{z}$ での推定はL - 40の基底状 態から初期推定状態を求めている。有限サイズ効果等を考えれば推定誤差は前者の方が小さくな るのは理解できよう。



図8 S = 1/2ハイゼンベルグ鎖の高磁場領域の初期推定誤差。m = 200、切り捨て誤差は $10^{-11}$ だった。白丸は通常の初期推定時、バツは高磁場初期推定時の誤差、青線は符号調整が限界まで行われた場合の誤差である。 $S_{total}^{z}$ が増加した点においてもある程度初期推定ができている。

このようにして高磁場領域でも確かに初期推定を行うことができた。なお、図8の計算では $L_{last}$ と $S_{total}^{z}(L_{last})$ の値により常に $S_{total}^{z} - 2$ の状態から初期推定ができたが、磁化曲線を求める場合は すべての $S_{total}^{z}$ での最低エネルギー固有値が必要であり、必ずしも $S_{total}^{z} - 2$ の状態から推定できる とは限らない。スピンが半整数の場合、 $S_{total}^{z} - 2$ の状態のブロックのサイト数が異なっていると 基底の対応付けができないこともある。その場合には $S_{total}^{z} - 4$ など $S_{total}^{z} - 2n$  ( $n = 1, 2, \cdots$ )で表さ れる状態のなかでブロックのサイト数の偶奇が一致するものから初期推定状態を作ればよい。

なお、この方法はあくまで高磁場領域計算時の無限系法を高速化する方法であり、途中でS<sub>total</sub>を変化させている以上、無限系法のみではその結果は信頼できないことに注意されたい。きちんと性質等を議論するには DMRG 有限系法[1]による精度の向上が不可欠であるが、そちらの計算においても別の初期推定方法[4]が考案されており、大きな成功を収めている。

## 3 基底·低励起状態計算

## 3.1 S = 1/2ハイゼンベルグ鎖

S = 1/2 ハイゼンベルグ鎖(1)式での基底状態( $S_{total}^{z} = 0$ )と第一励起状態( $S_{total}^{z} = 1$ )の計算を行った。ここではL - 4での状態から初期推定を行った。図9はm = 200, L = 400での計算結果であり、上図は横軸を線形軸、下図は対数軸にとったものである。(5)式の切り捨て誤差 $e_{tr}$ の最大値はどちらもおおよそ10<sup>-10</sup>であった。基底状態も第一励起状態も初期推定誤差(白丸)と最大推定誤差(青線)は一致しており完璧に符号調整ができている。この系はギャップレスで基底状態も第一励起状態も Tomonaga-Luttinger (TL)状態だが、それを反映してか推定誤差のL依存性はどちらも同じであった。またグラフは横軸を対数軸にすると線形になり(下図)、初期推定誤差はLのべき乗で表されることがわかる。S = 1/2 反強磁性ハイゼンベルグ鎖のエネルギーやその他の物理量の多くはLに対しべき乗型の依存性を示すことが知られているが[7][8]、初期推定誤差の依存性



図9 *S* = 1/2 ハイゼンベルグ鎖の基底状態(左図)と第一励起状態(右図)での初期推定誤差。白丸は0次、 四角は1次の初期推定状態のエネルギーの相対誤差であり、青線は限界符号調整状態の誤差である。

また1次近似での初期推定誤差(□)はほぼすべての点で減少しており、ばらつきはあるがこちらもべき乗的な依存性を示した。*L*~200の時点で切り捨て誤差と同じオーダーになり、さらに大きくなると対角化計算にほとんどコストがかからなくなった。また 2.4 でも述べたが、1次推定の時点ですでにばらつきがあり誤差を*L*<sup>-1</sup>の関数で表すことができないため、グラフにはしていないが2次推定を行ってもあまり改良されなかった。

### 3.2 S = 1ハイゼンベルグ鎖

S = 1反強磁性ハイゼンベルグ鎖の場合、初期推定誤差のL依存性は各 $S_{total}^{z}$ で大きく異なる。図 10は基底状態( $S_{total}^{z} = 0$ )と第一励起状態( $S_{total}^{z} = 1$ )、図11は第二励起状態( $S_{total}^{z} = 2$ )の初期 推定誤差である。m = 150, L = 200、切り捨て誤差はそれぞれ10<sup>-10</sup>,10<sup>-12</sup>,10<sup>-10</sup>であった。L - 2の状態から推定を行ったが、すべての場合で完璧に符号調整されている。図10左の基底状態に ついて、初期推定誤差は特殊な振る舞いをしている。S = 1/2も含め他の状態ではなめらかに変化 しているのに対し、この状態では少なくとも2つのkinkが存在し、 $L \sim 100$ で収束しかけるがその 後再び減少してゆく。このような異常性は縮退が原因と思われる。S = 1反強磁性ハイゼンベルグ 鎖の基底状態は Valence Bond Solid(VBS)状態であり、OBC では疑似四重縮退を持つ。これは端 のスピンの自由度に由来するものであり、バルク極限ではどれも VBS 状態になるため、本来  $S_{total}^{z} = 0 \geq S_{total}^{z} = 1$ の振る舞いは一致するはずである。しかし四重縮退のうち $S_{total}^{z} = 0$ に2つ、  $S_{total}^{z} = \pm 1$ にそれぞれ1つ準位が存在するため、 $S_{total}^{z} = 0$ の計算ではLが大きくなると縮退してい る 2つの状態が混ざってしまい、このような異常性が現れたと考えられる。



第一励起状態(図10右)の場合、推定誤差のlogはL~150まで線型的に減少したのち一定値を とる。これはVBS状態がLに対し指数的な依存性で特徴付けられること[9]と一致しており、一定

図10 S = 1ハイゼンベルグ鎖の基底状態(左)と第一励起状態(右)計算での初期推定誤差。L - 2の状態 から推定を行った。基底状態では異常な振る舞いを見せるが、第一励起状態では誤差は指数的に減少してゆく。



図11 S = 1ハイゼンベルグ鎖の第二励起状態計算での初期推定誤差。 $L \sim 70$ に kink があり (左)、対数軸にするとその前後でL依存性が異なることが分かる(右)。

値になるのは切り捨て誤差や数値計算誤差などによる推定精度の限界に達したためと考えられる。
 また第二励起状態(図11左)では一見滑らかだが、L~70でkinkが存在しその前後で依存性が変化している。横軸を対数にとると(図11右)その振る舞いから推定誤差のL依存性はL ≤ 70では指数的、L ≥ 70ではべき乗的になると予想される。この状態は連続準位の底にあたり、第一励起状態とのエネルギー差はLが大きい時にはL<sup>-2</sup>に依存することが分かっている[9]。またLが小さい時には上で述べた指数的な依存性が残っているだろう。つまり、各Lでのエネルギー依存性と初期推定誤差の依存性は見事に一致しており、その振る舞いを説明付けることができる。

図12はL-4の状態から推定を行った時の初期推定誤差である。比較のためL-2の状態からの 推定誤差も載せた。 $S_{total}^{z} = 0$ では図10と同様に異常な振る舞いを示し、改良推定ができなかっ たため除いた。非改良時(0次推定)ではL-4とL-2の推定で値が異なっている。有限サイズ効 果を考えれば誤差はL-4の方が大きくなりそうだが、 $S_{total}^{z} = 1$ では逆に小さくなっている。詳し く調べると基底状態 $|\psi_{0}\rangle_{L}$ の各成分は振動しながら固定点に漸近していた。このときLとL-2は逆 位相、LとL-4は同位相になっており、L-4では振動による誤差が消え推定誤差が小さくなった と思われる。 $S_{total}^{z} = 2$ では誤差はスピン鎖が短いときはL-4の方が小さいが、長くなるとL-2の 方が小さくなる。またL-4の誤差は常にべき乗的な依存性を示した。つまり $S_{total}^{z} = 2$ においても 振動が存在するが、振動による誤差は指数的であり振動を除いた誤差はべき乗的と考えられる。 サイト数Lが小さいときは振動による指数的な誤差が大きく、それを除去できるL-4の方が良い 推定ができ、Lが大きい時には有限サイズ効果が小さくなるL-2の方が良くなるのであろう。

L-401次近似による改良推定誤差は特に $S_{total}^{z} = 2$ で小さくなった。つまり $S_{total}^{z} = 2$ の推定誤 差は $\Delta L^{-1}$ の依存性が強いが、 $S_{total}^{z} = 1$ は高次の項の影響が強いと思われる。 $S_{total}^{z} = 1$ の有限サイズ効果が指数的であることを考えれば妥当であり、これゆえ2次の推定を行ってもさらに高次の項の影響であまり改善されなかった。なおL-2での近似推定では上記の振動性により線形近似が成り立たずまったく改良されなかった。



図12 S = 1ハイゼンベルグ鎖のL - 4の状態からの初期推定誤差。L - 2からの推定と比べ $S_{total}^{z} = 1$ (左図)ではすべてのLで誤差が減るが、 $S_{total}^{z} = 2$ (右図)ではLが大きい時は悪化する。1次近似を行えばこちらもすべてのLで誤差が減る。

## 3.3 *S* = 1/2ジグザグ鎖

S = 1/2ジグザグ鎖(2)式の基底状態計算での初期推定を行った。この系の相図は調べられており[10]、図13左のようになる。J2/J1 = 0では系は1本のハイゼンベルグ鎖と一致するが、  $J2/J1 \sim 0.27$ 付近でTL相からdimer相へ転移する。またJ2/J1 = 0.5のとき系はMajumdar-Ghosh model と呼ばれ、基底状態は図13右のように1つ飛ばしの最隣接ボンドでシングレットを組む 厳密なDimer状態になる。さらにJ2/J1を大きくすると並進対称性の破れが現れ[11]、 $J2/J1 \rightarrow \infty$ の極限では2本の独立なハイゼンベルグ鎖となる。今回、J2/J1 = 0.2, 0.4, 1.0, 10.0およびJ2/J1 =0.5の5点において初期推定を行った。J2/J1 = 0.5以外の4つの保持基底数mは全て200、サイト 数はL = 400、切り捨て誤差はそれぞれ10<sup>-10</sup>, 10<sup>-11</sup>, 10<sup>-9</sup>, 10<sup>-6</sup>であった。J2/J1 = 0.5を除いているのはDMRG計算と初期推定が特殊な振る舞いを示すためであり、その原因も含め後に説明する。



図13 S = 1/2ジグザグ鎖の基底状態の相図と Majumdar-Ghosh model の基底状態(右図)。右図の実線は 最隣接ボンド、点線は次隣接ボンドである。赤丸で示したペアがシングレットを組む。

図14に上記の4つの計算における初期推定誤差を示す。まずJ2/J1 = 0.2(左上)について、系は ハイゼンベルグ鎖と同じTL状態であり、初期推定誤差も同じ振る舞いを示す(初期推定誤差は べき乗的な依存性を持つ)。J2/J1 = 0.4(右上)では系は dimer 状態でありギャップを持つ。このと きS = 1 ハイゼンベルグ鎖と同じくエネルギーのL依存性は指数的になる[11]が、初期推定誤差も 同様に指数的に振る舞う。J2/J1 = 1.0(左下)も同じく dimer 状態であり、限界精度まで指数的に 減少している。しかしJ2/J1 = 0.4よりがたつきが大きい。これは並進対称性の破れが原因と思わ れる。S = 1/2ジグザグ鎖ではJ2/J1が大きくなると並進対称性が破れスピン相関などで数十サイ トの周期の大きな振動が現れる[11]。DMRG 無限系法では2サイトずつ増やしてゆくが、このよ うな大きな周期性により計算される状態が少しずつ変わってくる。これによる初期推定誤差がが たつきとなって表れたと考えられる。J2/J1 = 10.0となると相図上では dimer だが、実際にはほ とんど独立な2本のハイゼンベルグ鎖と見なせるだろう。この時L = 4からの初期推定(右下)では ほとんど初期推定ができていない。スピンが半整数のとき初期推定状態はブロック部分のサイト





数の偶奇性が一致している必要があるが、2本鎖であることを考えるとL-4からの推定ではスピン鎖1本あたりの偶奇性は異なってしまっている。そこで図15のようにL-8からの推定を行ったところ、計算誤差や並進対称性の破れが原因と思われるばらつきがあるものの、ある程度初期 推定をすることができた。

最後にJ2/J1 = 0.5の場合について言及しておく。この場合の初期推定誤差はゼロ、つまり初期 推定状態が真の基底状態と厳密に一致した。上で述べたようにこの系の基底状態 $|\psi_d\rangle$ は図13右 のようにサイト2*i* – 1と2*i*がシングレットを組む;

$$\begin{split} |\psi_d\rangle &= 2^{-L/2} (|+\rangle_1 |-\rangle_2 - |-\rangle_1 |+\rangle_2) \otimes \cdots \otimes (|+\rangle_{L-1} |-\rangle_L - |-\rangle_{L-1} |+\rangle_L) \tag{31} \\ \text{このとき DMRG 計算では保持基底数} m \geq 2 \end{tabular} constant & 2 \end{tabular} constant &$$

 $|b\rangle_{+} = 2^{-L/4} (|+\rangle_{1}|-\rangle_{2} - |-\rangle_{1}|+\rangle_{2}) \otimes \cdots \otimes (|+\rangle_{L/2-3}|-\rangle_{L/2-2} - |-\rangle_{L/2-3}|+\rangle_{L/2-2}) \otimes |+\rangle_{L/2-1}$   $|b\rangle_{-} = 2^{-L/4} (|+\rangle_{1}|-\rangle_{2} - |-\rangle_{1}|+\rangle_{2}) \otimes \cdots \otimes (|+\rangle_{L/2-3}|-\rangle_{L/2-2} - |-\rangle_{L/2-3}|+\rangle_{L/2-2}) \otimes |-\rangle_{L/2-1}$ (32)

の2つを保持していれば次ステップでの厳密な基底状態を表現できるためである。そしてこの直 積性によりL-4とLの基底状態はこれらのブロック基底と中心2スピン基底の全く同じ結合で表 されるので、初期推定状態が基底状態と一致するのである。



図15 *J2/J1* = 10.0におけるジグザグ鎖基底状態計算の初期推定誤差。*L* - 8の基底状態から初期推定を行った。

22

### 4 高磁場領域計算

## 4.1 S = 1/2ハイゼンベルグ鎖

この系の計算では $S_{total}^{z}$ が増加してから3ステップは2.6の $S_{total}^{z}$ が異なる場合の、それ以外は2.2の $S_{total}^{z}$ が同じ場合の初期推定を行った。2.6で説明したように $S_{total}^{z}$ 増加後1,2ステップ目は推定元状態と $S_{total}^{z}$ が異なり、3ステップ目は基底を決める状態の $S_{total}^{z}$ が異なる。図16はL = 400, $S_{total}^{z}$  = 50,100,150の計算結果である。保持基底数は $S_{total}^{z}$  = 50ではm = 200(左上)と50(右上)の2通り、 $S_{total}^{z}$  = 100,150ではそれぞれm = 200(左下),150(右下)である。切り捨て誤差は順に10<sup>-11</sup>, 10<sup>-11</sup>, 10<sup>-11</sup>であった。また $S_{total}^{z}$  = 20の計算が図8なのでそちらも参照されたい。

 $S_{total}^{z} = 50, m = 50$ 以外の結果について、図8のように $S_{total}^{z}$ が小さく初期推定元の状態が何十サ イトも小さいと推定誤差は明らかに大きいが、 $S_{total}^{z} = 50(L - 16$ から推定)や100(L - 8から推定) になるとあまり変わらなくなる。しかし $S_{total}^{z} = 150$ になるとむしろ悪化する。これはターゲット 状態の $S_{total}^{z}$ が頻繁に変化し、適切な基底があまり残されていないためと思われる。



図16 S=1/2ハイゼンベルグ鎖の高磁場領域計算の初期推定誤差。

 $S_{total}^{z} = 50, m = 50$ の振る舞いは奇妙なものとなった。 $S_{total}^{z}$ 増加時の推定誤差は指数的に減少し、 L~100程で $S_{total}^{z}$ 一定時の初期推定より誤差が小さくなる。有限サイズ効果を考えればLが近い状態からの推定の方が誤差は小さくなるはずだが、実は初期推定誤差は他の要因で振る舞いが変化することが分かった。図17はS = 1/2ハイゼンベルグ鎖の基底状態計算をあえて小さな保持基底数mで行った時の初期推定誤差であるが、このときも誤差減少が起こっている。m = 100(白丸)では誤差の減少はだんだん緩やかになるが、m = 20(青三角)ではL  $\geq$  50から指数的に減少している。mが小さい時に DMRG 計算がどうなるか考えてみよう。保持基底は密度行列固有値の大きなものから採用するので、mが小さいとどの基底も大きな固有値を持つことになる。このとき密度行列(4)式から分かるように、これらの基底を用いて計算される全系の基底状態はどの成分も大きな値を持つだろう。もし有限サイズ効果による変化より十分大きな値ならば、初期推定状態は真の基底状態と非常に近くなるため、mが大きい時より誤差が減少したと考えられる。これと同じことが $S_{total}^{z}$ が変化する部分の初期推定でも起こったのだろう。 $S_{total}^{z}$ が増加し DMRG 法のターゲット状態が変わると、その状態を計算するのに適切でない基底が保持されることになり、実質的な保持基底数が小さくなる。ゆえに高磁場推定部分のみが図17と同じように減少していったと思われる。



図17 S = 1/2 ハイゼンベルグ鎖の基底状態計算における初期推定誤差。 保持基底数mが小さいほど誤差が小さくなっている。

#### 4.2 S = 1ハイゼンベルグ鎖

S = 1ハイゼンベルグ鎖の高磁場領域初期推定計算は、 $S_{total}^{z}$ が大きい時のばらつきやmが小さい 時の誤差減少などS = 1/2とほぼ同じ振る舞いを示した。この項では唯一異なった $S_{total}^z/L = 0.5$ で の計算について述べる。図18はL = 200,m = 150,S<sup>z</sup><sub>total</sub> = 100での初期推定誤差である。この時 切り捨て誤差は10-9であった。左図は 2.2 の演算子からの調整と 2.3 前半の1 成分毎の期待値か らの調整で初期推定計算を行ったものである。このときL = 130において符号調整に失敗していた。 この計算を詳しく調べると、演算子からの調整のみでも8割方の点で符号調整ができており、そ うでない点も初期推定誤差は小さくなっていて基底状態に近い状態が得られていたが、L = 130で は全く調整ができていなかった。また1成分毎の調整のみを適用してみると半数以上の点で符号 調整ができなかった。ある程度調整できていて基底状態に近い状態になっていれば1成分毎の調 整でも正しい初期推定状態を得ることができるため、演算子からの調整が全くうまくいかなかっ たL = 130では期待値からの調整を行っても符号は間違ったままだったのであろう。そこで演算子 からの調整と 2.3 の後半で述べたブロック基底毎の調整で初期推定を行ったところ、すべての点 で符号調整ができた(右図)。もし基底毎の調整でなければ符号調整ができない系であれば計算の 高速化になると思われるが、今回は符号調整に失敗した点が1つだけだったため、計算量の多い こちらの方法では数%~10数%程計算時間が増えてしまった。一般的に利用するなら計算量を減 らす改良が必要であろう。



図18 *S* = 1ハイゼンベルグ鎖の高磁場領域計算での初期推定。1 成分毎の調整(左図)では矢印で示した*L* = 130において符号調整を失敗しているが、ブロック基底毎の調整(右図)ではすべての点で調整がされている。

#### 5 まとめ

本論文では無限系法初期推定の改良と各種モデルへの適用を行った。2章ではこれまでの初期 推定法の不完全性を示したのち、エネルギー期待値による符号調整や初期推定状態の近似推定、 および密度行列固有値の入れ替えを考慮した基底対応付けなどの改良を行った。またこれまで行 われていなかった高磁場領域の初期推定について考察した。3・4章では実際の系への適用を通 じ、確かに初期推定計算が改良されることを示したほか、ここで現れる現象から初期推定計算の 性質について調査した。推定誤差は系のサイズ依存性と関連しているほか、保持基底数mが小さ いときは DMRG の性質に由来する誤差減少が起こることが分かった。*S* = 1ハイゼンベルグ鎖の 高磁場領域の計算では改良初期推定でも失敗することがあり、2.3 後半のブロック基底毎の調整 方法を用いることで完璧な符号調整ができた。

このようにさまざまな改良を行うことで、DMRG 無限系法でも有限系法での初期推定計算[4] と同等まで計算時間を減らせる。無限系法初期推定の原理的に系が大きくなるほど有限サイズ効 果が抑えられ対角化の計算量が劇的に少なくなる。特に近似推定による改良の効果は大きいが、 これを行うには基底の符号調整が完璧でなければならない。しかし1成分毎の符号調整では失敗 することがある一方、ブロック基底毎では完璧に調整できるが計算時間が増えてしまう。また DMRG 法の特性や系の性質など、初期推定とはあまり関係のない部分が原因で誤差が出てしまう こともある。更なる計算時間の短縮には、初期推定計算だけでなく DMRG 法の計算にも踏み込ん だ改良が必要である。

## 参考文献

[1] S.R. White, Phys. Rev. Lett. 69, 2863 (1992); Phys. Rev. B 48, 10345 (1993).

- [2] 山田進, 五十嵐亮, 奥村雅彦, 今村俊幸, 町田昌彦, 応用数理 20(2), 132-147 (2010).
- [3] S. Qin and J. Lou, Commun. Theor. Phys. **36**, 635 (2001).
- [4] S. R. White, Phys. Rev. Lett. 77, 3633 (1996).
- [5] U. Schollwöck, Phys. Rev. B 58, 8194 (1998); 59, 3917(E) (1999).
- [6] L. Sun, J. Zhang, S. Qin, and Y. Lie, Phys. Rev. B 65, 132412 (2002).
- [7] K. Nomura, Phys. Rev. B 48, 16814 (1993).
- [8] H. W. J. Blöte, J. L. Cardy, and M. P. Nightingale, Phys. Rev. Lett. 56, 742 (1986).
- [9] S. Qin, Y. Liu, and L. Yu, Phys. Rev. B 55, 2721 (1997).
- [10] K. Okunishi, T. Tonegawa, J. Phys. Soc. Jpn. 72, pp. 479-482 (2003)
- [11] S. R. White, I. Affleck, Phys. Rev. B 54, 9862 (1996).