

量子可解模型に現れる非線形方程式の数値計算

常次 宏一
東京大学 物性研究所

ハバード模型と呼ばれる一次元量子系の有限温度における磁氣的揺らぎの相関長を量子転送行列法で計算した。相関長は量子転送行列の固有値から求まるが、ハバード模型を含む可解模型のクラスではこの固有値問題が自由度が大幅に減った非線形連立方程式に帰着される。この方程式の解の性質を調べ、ニュートン法を用いて数値計算を行った。その結果、従来に比べて1/10程度の低い温度まで、相関長さらには内部エネルギー・比熱などの物理量が計算できた。

NUMERICAL COMPUTATION
OF A SET OF NONLINEAR EQUATIONS
FOR AN EXACTLY SOLVABLE QUANTUM MODEL

Hirokazu Tsunetsugu

Institute for Solid State Physics, University of Tokyo
Roppongi 7-22-1, Minato-ku, Tokyo 106, Japan

The spin correlation length of the Hubbard model, a one-dimensional exactly solvable quantum system, is calculated at finite temperatures by the quantum transfer matrix (QTM) method. The correlation length is given by eigenvalues of the QTM, and its eigenvalue problem can be reduced into a set of nonlinear equations in the exactly solvable models. We have analyzed the properties of the eigenvalues and have numerically calculated these nonlinear equations. From these results, the correlation length has been obtained down to the temperature ten times lower than by the other methods.

1. はじめに

1次元量子系の統計力学に現れる非線形連立方程式の数値計算の実際を紹介する。熱平衡下の物理量の異なる2点の自己相関関数は、漸近的に2点間の距離 r の関数として指数関数的 $e^{-r/\xi}$ に減衰する。相関長 ξ は量子転送行列と呼ばれる $2^N \times 2^N$ 次元の行列の最大および2番目に大きな固有値 λ_1, λ_2 から $\xi^{-1} = \log(\lambda_1/\lambda_2)$ として計算できるが、可解模型と呼ばれる特定のクラスの系では、この固有値問題が N 自由度の非線形問題に帰着できる。本研究では、ハバード模型と呼ばれる系についてこの非線形方程式を数値的に解いた。この手法を用いることによって、従来計算できなかった低温まで（従来の $1/10 \sim 1/100$ 程度）、相関長や内部エネルギー・比熱などの物理量を計算することが可能になった。以下、前半ではより単純なスピンレスフェルミオン系を例にとり少し長くなるが問題の定式化を行い、後半で具体的な計算手法の説明といくつかの計算結果を示す。

2. 問題の定式化

まず最も単純な模型を例にとり、量子転送行列法を用いて相関関数を求める方法を説明してみよう。

2. 1 量子系の統計力学

1次元の鎖上に N_a 個の原子（以下サイトと呼ぶ）が並んでいるとする。各原子には1個しか電子が入れないとして、電子は隣接したサイトが空いていれば一定の確率で飛び移れるとする。これはスピンレス・フェルミオン模型と呼ばれる。電子は互いに区別できないのでこの系の取りうる状態の総数は $D = 2^{N_a}$ で電子数を n 個に限った部分空間は $N_a C_n$ 次元となる。各サイトに電子が居るのを1、居ないのを0で表して $|10110 \cdots 1\rangle$ などを書くことにすると、 N_a ビットの2進数 $(00 \cdots 0)_2 \sim (1 \cdots 1)_2$ で表現される基底 $\{v_\alpha\}, (\alpha = 0, \cdots, 2^{N_a} - 1)$ によってヒルベルト空間 V が張られる。量子力学的状態 ψ は $\{v_\alpha\}$ の1次結合で与えられる V 上のベクトルで、ハミルトニアンと呼ばれる自己共役演算子 $\hat{H}$ で時間発展する。

$$\psi(t) = \sum_{\alpha} a_{\alpha}(t) v_{\alpha}, \quad i \frac{d}{dt} \psi(t) = \hat{H} \psi(t) = \hat{H} \sum_{\alpha} a_{\alpha}(t) v_{\alpha}$$

ハミルトンを基底 $\{v_\alpha\}$ で表現した時の行列要素 $H_{\alpha\beta} \equiv (v_\alpha, \hat{H} v_\beta)$ は、 $H_{\alpha\alpha} = -\mu \times (\text{電子数})$ 、 v_α と v_β の2進数表示で N_a ビット中連続する2ビット以外が同じでその2ビットが片方が(10)他方が(01)になっている場合のみ $H_{\alpha\beta} = -t$ 、それ以外のすべての場合 $H_{\alpha\beta} = 0$ となる。 $|t|^2$ は単位時間中に電子が隣接するサイトに飛び移る確率である。このようにしてハミルトニアンは $D \times D$ 次元の行列で表現されるが、これを対角化して固有値 $\{\epsilon_\alpha\}$ と固有ベクトル $\{\phi_\alpha\}$ を求めると系の時間発展は完全に記述できる。ハミルトニアンはエルミート行列なので、 $\{\epsilon_\alpha\}$ は実数で固有エネルギーと呼ばれ、固有状態と呼ばれる $\{\phi_\alpha\}$ は完全正規直交系を成す。ある時間における物理量 $A(t)$ は、その物理に対応する演算子 $\hat{A}$ を用いて、内積 $A(t) = (\psi(t), \hat{A} \psi(t))$ で与えられる。

温度 $T \equiv 1/\beta$ の熱平衡下の物理量 $\langle A \rangle$ は、同じ演算子 $\hat{A}$ を用いると

$$\langle A \rangle = \text{Tr}_V(\hat{A} e^{-\beta \hat{H}}) / Z = \sum_{\alpha} (\phi_\alpha, \hat{A} \phi_\alpha) e^{-\beta \epsilon_\alpha} / Z$$

$$Z \equiv \text{Tr}_V e^{-\beta \hat{H}} = \sum_{\alpha} e^{-\beta \epsilon_\alpha} \equiv e^{-\beta F}$$

で与えられる。 Z, F は状態和、自由エネルギーと呼ばれる量で、これらが計算できると内部エネルギーや比熱が

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z, \quad C = \frac{\partial}{\partial T} E$$

として求められる。 i サイトと j サイトに共に電子が居る確率 $C(i, j)$ は、演算子 $\hat{n}_j$ を基底 $\{v_\alpha\}$ に対して対角的で v_α の j 番めのビットが 1 の時 $(\hat{n}_j)_{\alpha\alpha} = 1$ 、それ以外の時 $= 0$ と定義すると

$$C(i, j) = \langle \hat{n}_i \hat{n}_j \rangle$$

で与えられる。これを電子密度の相関関数と呼ぶことにする。

内部エネルギー E や相関関数 $C(i, j)$ は系の大きさ N_a に依っているので、系の intrinsic な性質を調べるためには熱力学的極限と呼ばれる $N_a \rightarrow \infty$ の極限をとる必要がある。この極限で漸近的に $F \propto N_a$ となるので F, E, C などは N_a で割ってサイト当たり直した量として定義すると、熱力学的極限で一定値に収束する。 $C(i, j)$ は割らなくても $N_a \rightarrow \infty$ の極限で収束し、しかも $|i - j|$ のみの関数になる。

以上の様に熱力学は $\text{Tr}_V(\dots e^{\beta \hat{H}})$ を計算すればよく、これはハミルトニアン $\hat{H}$ が対角化されていれば容易に計算できる。

$$C(i, j) = \langle \hat{n}_i \hat{n}_j \rangle = \sum_{\alpha} (\phi_{\alpha}, \hat{n}_i \hat{n}_j \phi_{\alpha}) e^{-\beta \epsilon_{\alpha}} / \sum_{\alpha} e^{-\beta \epsilon_{\alpha}}$$

となり、すべての固有値 $\{\epsilon_{\alpha}\}$ と固有ベクトル $\{\phi_{\alpha}\}$ が必要となる。しかしハミルトニアンは $2^{N_a} \times 2^{N_a}$ 次元の行列なので N_a が大きいと ($N_a \geq 12$ 、 $D \sim$ 数千程度)、ハウスホルダー法による直接対角化はほとんど不可能である。 $T = 0$ の極限では最低固有エネルギー ϵ_0 とそれに対応する固有状態 ϕ_0 が判ればよく、これをランチョス法で計算すると、ハウスホルダー法の場合よりも N_a を大きくできるが ($N_a \sim 24$ 、 $D \sim 100$ 万程度)、もっと大きな N_a については現在のところ不可能である。ハミルトニアンを対角化する方法では、したがって小さな N_a の結果から外挿するしかないが、量子転送行列法と呼ばれる手法を用いるとこの極限を容易にとることができる。この方法は特に 1 次元系に対して有効である。

2. 2 量子転送行列

[Trotter 分解] まず 1 次元量子系を 2 次元古典系に射像する。この射像はまたモンテカルロ法で熱平衡下の物理量 $\langle A \rangle$ を計算する際にも用いられる。ハミルトニアンを解析的に対角化可能な 2 つの部分に分けると、

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2, \quad e^{-\beta \hat{H}} = (e^{\tau \hat{H}_1} e^{\tau \hat{H}_2})^N + O\left(\frac{1}{N}\right), \quad \tau \equiv \frac{\beta}{N}$$

と分割できるので、基底 $\{v_{\alpha}\}$ について対角的な物理量 A を考えると

$$\begin{aligned} \text{Tr}_V(\hat{A} e^{-\beta \hat{H}}) \sim \sum_{\alpha_1} \dots \sum_{\alpha_{2N}} & (v_{\alpha_1}, \hat{A} v_{\alpha_1}) (v_{\alpha_1}, e^{\tau \hat{H}_1} v_{\alpha_2}) (v_{\alpha_2}, e^{\tau \hat{H}_2} v_{\alpha_3}) \\ & \dots (v_{\alpha_{2N-1}}, e^{\tau \hat{H}_1} v_{\alpha_{2N}}) (v_{\alpha_{2N}}, e^{\tau \hat{H}_2} v_{\alpha_1}) \end{aligned}$$

となる。分割数 N は Trotter 数と呼ばれている。 $\{v_{\alpha}\}$ は 1 次元の N_a 個のサイトの状態の全てであったので、上式の和 $\sum_{\alpha_1} \dots \sum_{\alpha_{2N}}$ は、 $(2^{N_a})^{2N}$ 個の項から成っている。このことは 2 次元の $N_a \times 2N$ の格子の全ての状態について和を取ることと見なすことができる。

今のスピンレスフェルミオン系の場合に便利なハミルトニアン分割の方法は、 $(\hat{H}_1)_{\alpha\beta} = -t$ となるのを $(\hat{H})_{\alpha\beta}$ と同じ条件でしかも v_α と v_β が異なる箇所が 0-1, 2-3, 4-5, ... などの小さい方が偶数番のビットの場合に限り、1-2, 3-4 など小さい方が奇数番のビットに限った場合を $(\hat{H}_2)_{\alpha\beta} = -t$ とする。このように分割した利点は $BW \equiv (v_{\alpha 1}, e^{\tau \hat{H}_1} v_{\alpha 2}) \cdots (v_{\alpha 2N}, e^{\tau \hat{H}_2} v_{\alpha 1})$ が 2 次元格子上的局所的な重みの積として書けることである。(図 1 参照)。灰色で示した四角の頂点上の 4 個の点 $(r, m), (r+1, m), (r+1, m+1), (r, m+1)$ の状態に応じて決まる局所的な重み $w(r, m)$ を用いると

$$BW = \prod_{r+m=\text{even}} w(r, m)$$

の形になる。2 次元座標 (r, m) における値 0 あるいは 1 を $n_{r,m}$ とすると $n_{r,m} + n_{r+1,m} = n_{r,m+1} + n_{r+1,m+1}$ の時のみ $w(r, m) \neq 0$ となることを注意しておく。 $\Pi w(r, m) \neq 0$ となるのは $\sum_r n_{r,m}$ が m にらず一定の時のみで、これはハミルトニアンが電子数を保存することに対応している。

今度は見方を変えて、状態が r :一定の時の縦軸上の 1 と 0 の並び方で表されたとする。この時状態の総数は 2^{2N} 個である。図 1 から判るように $\sum_m n_{r,m}$ は r に依存するので、便宜上 $\tilde{n}_{r,m} \equiv n_{r,m} (r+m=\text{even}), \equiv 1 - n_{r,m} (r+m=\text{odd})$ と変数変換すると $\sum_m \tilde{n}_{r,m}$ は r に依らずに一定になる。 $(\tilde{n}_{r,1}, \dots, \tilde{n}_{r,2N})$ を 1 つの状態 u_{ω_r} と見ると

$$BW = (u_{\omega_1}, \hat{R}_1 u_{\omega_2})(u_{\omega_2}, \hat{R}_2 u_{\omega_3}) \cdots (u_{\omega_{N_a-1}}, \hat{R}_2 u_{\omega_{N_a}})$$

の形に書ける。ただし、今 N_a が奇数とした。ただし

$$(u_{\omega_1}, \hat{R}_1 u_{\omega_1}) = \prod_{m:\text{odd}} w(r=1, m), \quad (u_{\omega_2}, \hat{R}_2 u_{\omega_3}) = \prod_{m:\text{even}} w(r=2, m), \text{ etc.}$$

である。 $\hat{T}$ を u_{ω} の 1, 0 の配置を 1 ビット rotate する演算子だとすると

$$\hat{R}_2 = \hat{T} \hat{R}_1 \hat{T}^{-1}, \quad \hat{T}^2 \hat{R}_1 = \hat{R}_1 \hat{T}^2, \quad \hat{T}^2 \hat{R}_2 = \hat{R}_2 \hat{T}^2,$$

の性質を持つ 2^{2N} 次元の状態空間 $\tilde{V}$ 上の線型演算子である。 $\hat{R}_1, \hat{R}_2$ は自己共役で、量子転送行列と呼ばれる。

この表示を用いると熱力学極限が容易にとれる。例えば、 N_a :奇数の時状態和 Z は

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\omega_1} \cdots \sum_{\omega_{N_a}} (u_{\omega_1}, \hat{R}_1 u_{\omega_2})(u_{\omega_2}, \hat{R}_2 u_{\omega_3}) \cdots (u_{\omega_{N_a-1}}, \hat{R}_2 u_{\omega_{N_a}}) \\ &= \text{Tr}_{\tilde{V}} [(\hat{R}_1 \hat{R}_2)^{(N_a-1)/2} \hat{P}] = \text{Tr}_{\tilde{V}} [(\hat{R}_1 \hat{T} \hat{R}_1 \hat{T}^{-1})^{(N_a-1)/2} \hat{P}] \\ &= \text{Tr}_{\tilde{V}} [(\hat{R}_1 \hat{T})^{N_a-1} \hat{T}^{-N_a+1} \hat{P}] \end{aligned}$$

と書ける。但し、 $\hat{P}$ はすべての要素が 1 の行列であり、 $\hat{T} \hat{P} = \hat{P} \hat{T} = \hat{P}$ したがって $\hat{R} \equiv \hat{R}_1 \hat{T}$ の最大固有値を λ_1 とすると N_a が大きい時漸近的に

$$Z \sim (\zeta_1, \hat{P} \eta_1) \lambda_1^{N_a-1} \propto \lambda_1^{N_a-1}$$

となる。 ζ_1, η_1 は $\hat{R}$ の左、右固有ベクトルで、 $\hat{R}$ はエルミート行列ではないので一致しない。定義 $Z = e^{-\beta F}$ を用いると、1サイト当たりの自由エネルギー f は

$$f = \lim_{N_a \rightarrow \infty} \frac{F}{N_a} = -\frac{1}{\beta} \log \lambda_1$$

として熱力学的極限の値を求めることができる。

相関関数 $C(i, j)$ の計算も同様に定式化できる。

$$\begin{aligned} C(i, j) &= Z^{-1} \sum_{\text{configuration}} n_{i1} n_{j1} \prod_{r+m=\text{even}} w(r, m) \\ &= Z^{-1} \text{Tr}_{\hat{V}} [(\hat{R}_1 \hat{R}_2)^{(i-1)/2} \tilde{n}_1 (\hat{R}_1 \hat{R}_2)^{(j-i)/2} \tilde{n}_1 (\hat{R}_1 \hat{R}_2)^{(N_a-j)/2} \hat{P}] \\ &= Z^{-1} \text{Tr}_{\hat{V}} [\hat{R}^{i-1} \tilde{n}_1 \hat{R}^{j-i} \tilde{n}_{1+j-i} \hat{R}^{N_a-j} \hat{P}] \end{aligned}$$

今、 i, j を共に奇数、 N_a も奇数としたが他の場合も同様である。 $\tilde{n}_m$ は $(u, \tilde{n}_m u)$ がベクトル u の m 番目の成分に応じて1または0になるような行列である。 $\hat{R}$ の固有値 $\{\lambda_\omega\}$ と左、右固有ベクトル $\{\zeta_\omega\}$ 、 $\{\eta_\omega\}$ を用いると、 $N_a \rightarrow \infty, j-i$ を一定に保ち $i \propto N_a$ にして $i \rightarrow \infty$ にする極限で（これは系の端の影響を受けないようにすることに対応している。）

$$\begin{aligned} C(i, j) &\sim Z^{-1} \lambda_1^{N_a-j+i-1} (\zeta_1, \hat{P} \eta_1) \sum_{\omega} \lambda_{\omega}^{j-i} (\zeta_1, \tilde{n}_1 \eta_{\omega}) (\zeta_{\omega}, \tilde{n}_{1+j-i} \eta_1) \\ &\xrightarrow{N_a \rightarrow \infty} \sum_{\omega} \left(\frac{\lambda_{\omega}}{\lambda_1} \right)^{j-i} (\zeta_1, \tilde{n}_1 \eta_{\omega}) (\zeta_{\omega}, \tilde{n}_{1+j-i} \eta_1) \end{aligned}$$

となる。 $|j-i| \ll N_a$ の条件を保ったまま $|j-i| \rightarrow \infty$ とすると相関関数は指数関数的減衰をすることがわかる。

$$C(i, j) \sim \text{const.} \times e^{-|i-j|/\xi}$$

$$\xi \equiv \left(\log \frac{\lambda_1}{\lambda_2^*} \right)^{-1}$$

λ_2^* は上式で $(\zeta_1, \tilde{n} \eta_{\omega}) \neq 0$ 、 $(\zeta_{\omega}, \tilde{n} \eta_1) \neq 0$ の中の最大固有値である。 ξ は相関長と呼ばれる。

このようにして相関関数の漸近形を決める相関長 ξ は、量子転送行列 $\hat{R}$ の最大固有値 λ_1 と（前述の条件を満たす）最大固有値 λ_2^* を求めればよい。相関長はいろんな物理量の自己相関関数について同様に定義されるが、最も相関長が長い物理量では λ_2^* は $\hat{R}$ の2番めに大きな固有値 λ_2 に等しい。

3. ハバード模型とベレー仮説方程式

本研究で扱うハバード模型が前節で例に出したスピンレスフェルミオン系と異なる点は、現実の電子と同じように電子が1つのサイトのなかで $\uparrow, \downarrow$ の2つのスピン状態を取れるとする点である。したがって取り得る状態の総数は前より増えて $D \equiv 4^{N_a}$ となる。電子が隣接するサイトに飛び移るときにはスピンは変わらないとして、1つのサイトに $\uparrow$ と $\downarrow$ のスピン電子が両方入っている時にはクーロン力によって U だけエネルギーが上がるとする。このような模型を（1次元）ハバード模型と呼ぶが、特にパラメータが $\mu = U/2$ の場合には、電子数の熱平衡値が N_a に等しく、平均して1サイトに電子が1個入った状態なので特にhalf-filled caseと呼ばれる。以下ではこの場合を扱う。したがって系は $T = 1/\beta, t, U$ の

3 個のパラメータで指定できるが、 $t=1$ として T, U の値を t をユニットとして測ることにする。

ハバード模型の量子転送行列 $\hat{R}$ は、 $\{u_\omega\}$ を基底にして Trotter 数 N とすると、 $4^{2N} \times 4^{2N}$ 次元の実非対称行列となる。具体的な行列要素を与える規則はかなり複雑なので、ここでは省略する。 $\hat{R}$ の固有値 λ は次のベーテ仮説方程式の解 $\{p_j\}$ から求めることができる。

$$\lambda = a^{2N-n} \exp\left(-\frac{n}{4N}\beta U\right) \prod_{j=1}^n e^{-ip_j} \left[b \cos p_j + \sqrt{c^2 - b^2 \sin^2 p_j}\right],$$

$$\exp(2iNp_j) = (-1)^{n_1-1} \prod_{\gamma=1}^{n_1} \frac{\sin(M(p_j) - \Lambda_\gamma + iu)}{\sin(M(p_j) - \Lambda_\gamma - iu)}, \quad (j=1, \dots, n),$$

$$\prod_{j=1}^n \frac{\sin(M(p_j) - \Lambda_\alpha + iu)}{\sin(M(p_j) - \Lambda_\alpha - iu)} = \prod_{\gamma=1}^{n_1} \frac{\sin(\Lambda_\gamma - \Lambda_\alpha + 2iu)}{\sin(\Lambda_\gamma - \Lambda_\alpha - 2iu)}, \quad (\alpha=1, \dots, n_1),$$

$$a \equiv \sinh \frac{\beta t}{N}, \quad b \equiv 1, \quad c \equiv \cosh \frac{\beta t}{N}, \quad M(p) \equiv \sin^{-1}\left(\frac{b}{c} \sin p\right), \quad u \equiv \frac{\beta U}{4N}.$$

n, n_1 は $n \leq 2N, n_1 \leq \frac{1}{2}n$ を満足する整数である。 n 個の変数 $\{p_j\}$ は n_1 個の変数 $\{\Lambda_\alpha\}$ と結合しているので、ベーテ仮説方程式は $n+n_1$ 次元の超越連立方程式になる。両辺で対数を取ると次の形に変形できる。

$$2Np_j = 2\pi I_j + \sum_{\gamma=1}^{n_1} \Theta_u(M(p_j) - \Lambda_\gamma), \quad (j=1, \dots, n),$$

$$\sum_{j=1}^n \Theta_u(M(p_j) - \Lambda_\alpha) = 2\pi J_\alpha + \sum_{\gamma=1}^{n_1} \Theta_{2u}(\Lambda_\gamma - \Lambda_\alpha), \quad (\alpha=1, \dots, n_1),$$

$$\Theta_u(x) \equiv -i \log \left[-\frac{\sin(x+iu)}{\sin(x-iu)} \right].$$

関数 $\Theta_u(x)$ は $\Theta_u(0) = 0$ でしかも x について連続になるように $\log$ の branch cut が選ばれているものとする。 $\{I_j\}, \{J_\alpha\}$ は Θ_u, Θ_{2u} の $\log$ の不定性からくる部分で、 $\{I_j\}$ は半整数、 $\{J_\alpha\}$ は n_1 が偶数なら半整数、 n_1 が奇数ならは整数になる。 $n, n_1, \{I_j\}, \{J_\alpha\}$ の組を与えて上のベーテ仮説方程式を解くと、それに応じて $\hat{R}$ の固有値 λ が 1 個求められる。一般には $\{p_j\}, \{\Lambda_\alpha\}$ は複素数になることを注意しておく。

いま求めたいのは $\hat{R}$ の最大固有値 λ_1 と 2 番目に大きな固有値 λ_2 であるが、これらがどの $n, n_1, \{I_j\}, \{J_\alpha\}$ の組に対応しているか調べる必要がある。物理的な議論を行うと λ_1, λ_2 および対応する固有ベクトルは U に関して連続であることがわかるので、電子間に相互作用の無い $U=0$ の場合を考えれば良い。 $U=0$ の場合は解析的にハミルトニアンが対角化でき、したがって相関関数も解析的表式が得られるので、それらと比較することで $n, n_1, \{I_j\}, \{J_\alpha\}$ がわかる。その結果、 N が偶数の時には、最大固有値 λ_1 に対しては、 $n=2N, n_1=N, I_j = -N + \frac{1}{2} + j, (j=1, \dots, 2N), J_\alpha = -\frac{N}{2} + \frac{1}{2} + \alpha, (\alpha=1, \dots, N)$ 、2 番目に大きな固有値 λ_2 に対しては λ_1 の選択で $J_\alpha \rightarrow J_\alpha + 1$ と変更すれば良いことがわかる。この 2 つの固

有値の場合には $\{p_j\}$, $\{\Lambda_\alpha\}$ はすべて実数で、しかも実軸上で対称的な分布を持つことがわかる。 λ_1 に関しては原点について対称的に分布し ($p_j = -p_{2N-j+1}$, $\Lambda_\alpha = -\Lambda_{N-\alpha+1}$)、 λ_2 に関しては、 $p_{2N} = \pi$, $p_N = 0$, $\Lambda_N = \pi/2$, $\Lambda_{N/2} = 0$ で残りが原点について対称的に分布する ($p_j = -p_{2N-j}$, $\Lambda_\alpha = -\Lambda_{N-\alpha}$)。この対称性を用いると未知数の個数を λ_1 の場合には $3N/2$ 、 λ_2 の場合には $3N/2 - 1$ に減らすことができる。

4. 数値計算とその結果

このように決めた n , n_1 , $\{I_j\}$, $\{J_\alpha\}$ を用いてベーテ仮説方程式を数值的に解いて、量子転送行列 $\hat{R}$ の固有値 λ_1 , λ_2 を計算する。本研究で扱いたいのは相関長 $\xi = [\log(\lambda_1/\lambda_2)]^{-1}$ の温度変化であるので、 U を固定したまま $\beta = 1/T$ を変化させていったときの λ_1 , λ_2 の β 依存性を求めれば良い。実は $\beta = 0$ の極限 (高温極限) では、 λ_1 に対する解は解析的に

$$p_{2k-1}^{(0)} = p_{2k}^{(0)} = \Lambda_k^{(0)} = \frac{\pi}{N} J_k, \quad (k = 1, \dots, N),$$

と求められ、しかも β の変化に対して $\hat{R}$ の固有値 λ は解析的に振る舞うことが判っているので、 $\beta = 0$ の解を初期値にして少しずつ β を大きくしながら方程式を解くことにする。

解法としてはニュートン法を用いた。最大固有値 λ_1 に対しては $3N/2$ 個の変数からなるベクトル $\mathbf{x}$, $[x_j = p_j, (j = 1, \dots, N), x_j = \Lambda_{j-N}, (j = N, \dots, 3N/2)]$ に対して、解の対称性を用いて、

$$\begin{aligned} f_i(\mathbf{x}) &= x_i - \frac{\pi}{N} I_i - \frac{1}{2N} \sum_{j=N+1}^{3N/2} \{ \Theta_u(M(x_i) - x_j) + \Theta_u(M(x_i) + x_j) \}, \quad (i = 1, \dots, N) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \{ \Theta_u(M(x_j) - x_i) + \Theta_u(M(-x_j) + x_i) \} - \frac{2\pi}{N} J_{i-N} \\ &\quad - \frac{1}{N} \sum_{j=N+1}^{3N/2} \{ \Theta_u(M(x_i) - x_j) + \Theta_u(M(x_i) + x_j) \}, \quad (i = N+1, \dots, 3N/2) \end{aligned}$$

で評価関数 $\mathbf{f}(\mathbf{x})$, ($i = 1, \dots, 3N/2$) を定義した。 λ_2 についても同様に定義する。前の式に比べて両辺が $2N$ あるいは N で割ってあるのは、 $\{p_j\}$, $\{\Lambda_\alpha\}$ が N^0 の量であるので f_i を N^0 のオーダーにするためである。 β を固定して、その前に計算した小さな β に対する解を初期値 $\mathbf{x}^{(0)}$ として、通常のニュートン法のアルゴリズムにしたがって、まずヤコビアン $J(\mathbf{x})$, ($J_{i,j} \equiv \partial f_i / \partial x_j$) を計算し、

$$\mathbf{x}^{(l+1)} = \mathbf{x}^{(l)} - J(\mathbf{x}^{(l)})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(l)})$$

の iteration を、収束判定条件 $\|\mathbf{f}(\mathbf{x}^{(l)})\| < \epsilon$ が満足されるまで繰り返した。ノルムとしては、 $\|\mathbf{f}\| \equiv \text{Max}_i |f_i|$ 、許容誤差の大きさとしては $\epsilon = 10^{-12}$ を用いた。ヤコビアン $J_{i,j}$ は数値微分ではなく、解析的に微分して求めた関数に $\mathbf{x}$ を代入して計算した。

前に示した定義からも明らかのように、1 サイトあたりの内部エネルギーや非熱は、 $E = -\lambda_1' / \lambda_1$, $C = \beta^2 [\lambda_1'' / \lambda_1 - (\lambda_1' / \lambda_1)^2]$, ($'$ は β についての微分) であるが、 λ_1' や λ_1'' を数値微分で求めることは誤差の点からみて望ましくない。 λ_1 は $\{p_j\}$ の関数であるため $\{p_j'\}$, $\{p_j''\}$ が求まれば λ_1' , λ_1'' は直ちに計算できる。元の方程式 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ を β で微分すると、 $\{p_j'\}$,

$\{\Lambda_\alpha'\}$ に対する線形の連立方程式が得られる。その係数は $\{p_j\}$, $\{\Lambda_\alpha\}$ の関数になっているが、これらは既にニュートン法で求められているので、その値を代入する。この線形連立方程式を LU 分解法で解いて $\{p_j'\}$, $\{\Lambda_\alpha'\}$ を計算した。同様にして $\{p_j''\}$, $\{\Lambda_\alpha''\}$ も計算できるので、これらを用いて λ_1' , λ_1'' を計算すれば、 E , C が精度良く計算できる。

図 3 に iteration 回数による残差, $R_l \equiv ||f(\mathbf{x}^{(l)})||$, の減り方の例を示す。最初は残差の減り方は遅いが、 $10^{-3} \sim 10^{-4}$ 程度に小さくなるとニュートン法で期待されるように 2 次収束する。 $(R_{l+1} \sim R_l^2)$ 残差が 10^{-12} 程度にまで小さくなると横ばいになるが、これは丸め誤差の影響と考えられる。表 1 に $U = 8$ の場合の各 β の値に対して収束に要したステップ数をまとめた。左側が λ_1 、右側が λ_2 の結果である。

iteration 1 回当たりの計算時間のシステムサイズ N に対する依存性を図 4 に示した。これは日立のスーパーコンピュータ S820/80E を利用した結果である。残差 $f(\mathbf{x})$ の計算量は N^2 、ヤコビアン $J(\mathbf{x})$ は N^3 、逆行列 J^{-1} の計算量は N^3 のオーダーである。

物理量を計算する際には $N \rightarrow \infty$ の極限を取る必要がある。さまざまな物理量は N を大きくすると、漸近的に $a_N = a_\infty + b_2/N^2 + b_4/N^4 + \dots$ と N^{-2} の級数の有限サイズ補正がつくことが判っているので、 $N = 2^l$ に選んでロンバーク・リチャードソン補外によって極限値を求めることにした。 β が小さいときには $N = 64, 128, 256, 512, 1024$, の 5 つのシステムサイズで計算した結果、 N に対する収束は非常に速く、 $\beta \leq 10, U \leq 8$ では $N = 512$ に選べば補外値と最悪でも 1 % 程度の誤差しかない。 β と U が小さいほど誤差は小さい。 $\beta \sim 100$ まで計算するにはもっと大きな N まで計算する必要があるが、1 回の iteration に N^3 のオーダーの計算が必要なため、1 つの U に対して 1 時間程度の CPU 時間内で $\beta = 100$ まで計算できるサイズとしては、 $N \sim 2000$ (行列としては 3000 次元) 程度が上限となってしまう。ロンバーク・リチャードソン補外を行う場合には $N = 2^l$ (l : 整数) の形にしか選べないが、ほぼ中間の値を取って $N = 512, 724, 1024, 1448, 2048$ の 5 つのシステムサイズで計算を実行した。 $N = 724$ と 1448 が 2^l の形になっていないので、ロンバーク・リチャードソン補外をそのまま用いると誤差が大きくなったので、以下のような補外法を適用してみた。 j 番目のシステムサイズを N_j 、そのサイズでの物理量を A_j とする。

$$A_j^{(1)} = A_j,$$

$$A_j^{(l)} = A_j^{(l-1)} + \frac{N_{j-l+1}}{N_j - N_{j-l+1}} \{A_j^{(l-1)} - A_{j-1}^{(l-1)}\}, \quad (l \geq 2)$$

この変換を行うと、 $A^{(l)}$ では有限サイズ補正が N^{-2l} の項まで消去されていることが簡単な計算で判る。 $U = 8, \beta = 100$ の時の内部エネルギーについてのこの補外法による収束のしかたを表 2 に示す。

最後にスピンについての相関長, $\xi = [\log(\lambda_1/\lambda_2)]^{-1}$ の温度変化の結果を図 5 に示す。

文献

- [1] H. Tsunetsugu, submitted to J. Phys. Soc. Jpn.
- [2] R. Z. Bariev, Teor. Mat. Fiz. 49 (1981) 261 [Theor. Math. Phys. 49 (1982) 1021.
- [3] T. Koma, Prog. Theor. Phys. 83 (1990) 655.
- [4] M. Yamada, J. Phys. Soc. Jpn. 59 (1990) 848.

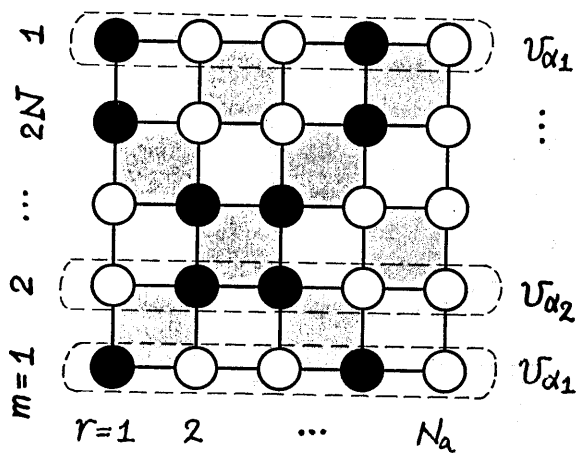


图 1

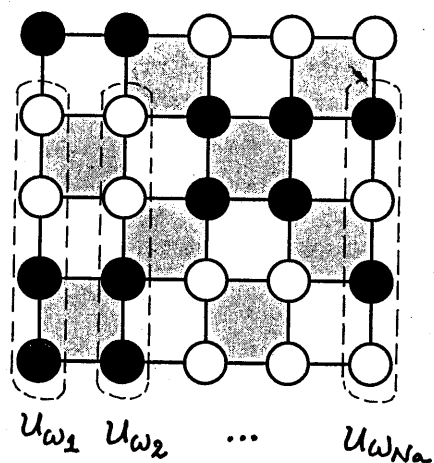


图 2

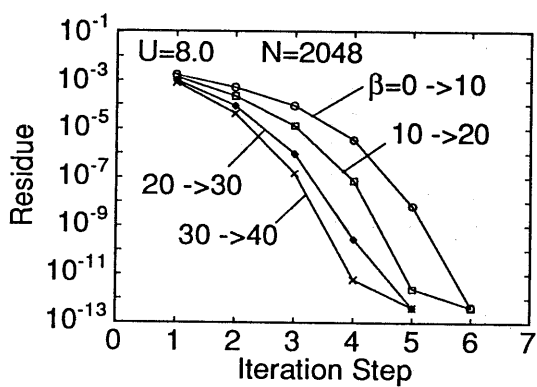


图 3

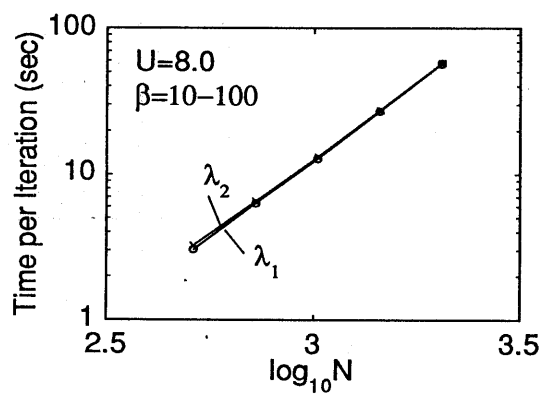


图 4

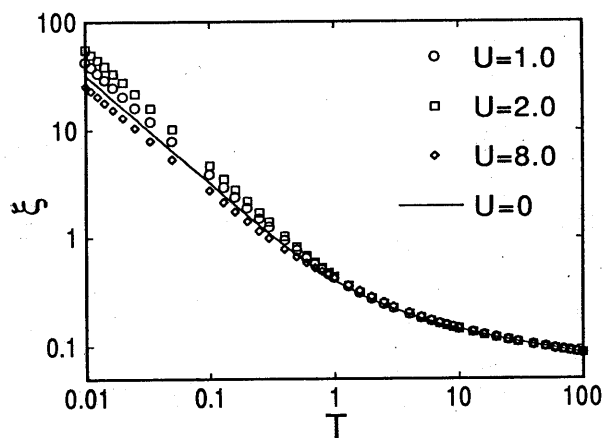


図 5

表 1

β	N= 512	N= 724	N=1024	N=1448	N=2048
0 → 10	6 6	6 6	6 6	6 5	6 5
10 → 20	6 6	6 5	6 5	6 5	6 5
20 → 30	5 5	5 5	5 5	5 5	5 5
30 → 40	5 5	5 5	5 5	5 5	5 5
40 → 50	5 4	5 4	4 4	4 4	4 4
50 → 60	5 4	4 4	4 4	4 4	4 4
60 → 70	4 4	4 4	4 4	4 4	4 4
70 → 80	4 4	4 4	4 4	4 4	4 4
80 → 90	4 4	4 4	4 4	4 4	4 4
90 → 100	4 4	4 4	4 4	4 4	4 4

表 2

Internal Energy / beta= 100

(l=1)

N= 512 / -4.0154605

(l=2)

N= 724 / -3.6359326

-3.2562426

(l=3)

N= 1024 / -3.4533295

-3.2708044

-3.2756583

(l=4)

N= 1448 / -3.3635419

-3.2737159

-3.2746864

-3.2745475

N= 2048 / -3.3189497

-3.2743766

-3.2745969

-3.2745841