

Recursion method for deriving effective interaction and its application to eigenvalue problem

九州工業大学シニアアカデミー 鈴木賢二*

九州工業大学学習教育センター 岡本良治†

福岡工業大学情報工学部 熊谷博夫‡

福岡教育大学物理学教室 松崎昌之§

(2011年12月6日受理)

概要

It is often useful to recast the full many-body problem of a quantum system described by a Hamiltonian H in the form of the effective interaction acting within a chosen model space. The central problem of the effective-interaction theory is how to calculate the so-called \hat{Q} box introduced by Kuo et al. We first show that the Hamiltonian H is transformed to a block tri-diagonal form in terms of submatrices of small dimensions. With this transformed Hamiltonian, we next show that, making use of recursion methods, the \hat{Q} box can be expressed as a continued fraction form and/or a simple perturbative form with the renormalized vertices and propagators. This procedure for the \hat{Q} box ensures the exact calculation of the \hat{Q} box if the dimension of the relevant Hilbert space is finite. We apply this approach to solving the eigenvalue problem for a given Hamiltonian H . We introduce a function $g(E)$ of an energy variable E . This function is determined by the \hat{Q} box and has a characteristic that the eigenvalues are represented as "resonance" positions of $g(E)$. We discuss a possibility of applying this method to solving an eigenvalue problem with a huge dimension.

1 はじめに

量子多体問題において、大次元行列の固有値問題の解法が重要な役割を果たすことはよく知られている [1]. 「京」に代表されるスーパーコンピュータの演算能力を最大限活用するための計算方法の開発は、物理科学と計算機科学にまたがる中心的課題の一つになりつつある [2].

*suz93@mocha.ocn.ne.jp

†okamoto@mns.kyutech.ac.jp

‡kumagai@fit.ac.jp

§matsuza@fukuoka-edu.ac.jp

量子多体問題や非摂動的場の量子論における巨大行列の固有値・固有ベクトルを求める数値計算のほとんどは、二つの一般的な技法, Monte Carlo 法または直接の行列対角化によりなされる。行列対角化, すなわち固有値と固有ベクトルを求めることは、通常、次の2つの過程からなる。(a) 対象となる行列を取扱いやすい形に相似変換する。すなわち、エルミート行列であれば三重対角型エルミート行列に変換する。この場合、Householder 法が使われることが多いが、Lanczos 法もしばしば使われる。(b) 逐次計算法により、固有値、固有ベクトルを順次求める。

行列の対角化によって固有値とそれに属する固有ベクトル(固有状態)を求める場合、その基本的目的(立場)は次の2つに分類することができよう。第一は、関連する全自由度を考慮して、全ての状態についての固有値と固有ベクトルを求めることであり、第二は必要な自由度のみを考慮し、基底状態および有限個の励起状態の固有値と固有ベクトルを求めることである。

本論文で取り上げる有効相互作用理論は、後者の立場に立つものであり、近年、原子核、原子、分子等の多体系への応用 [3, 4] のみならず、quantum dots やボソン多体系への応用研究 [5, 6] が進むなど、着実にその適用範囲を拡げている。

本論文は、有効相互作用理論の枠組みを継承しつつ、漸化式を導入することによって非摂動的な計算方法を定式化し、固有値問題に関する新しい解法を提起することを目的としている。著者らは、これまで有効相互作用理論やその応用としての原子核内有効相互作用の研究を行ってきた [7, 8, 9]。この研究領域で長年議論されてきたことは、ハミルトニアンにより記述される量子系の固有値問題を、厳密に計算可能な有限次元の模型空間内で作用する有効相互作用を導入して解くことである。これまでの有効相互作用理論のほとんどは、Kuo 等によって導入された \hat{Q} box と呼ばれる vertex function を構成要素として組み立てられてきた [10, 11]。ここでの基本的な問題は次の二つの課題である。(i) \hat{Q} box を用いて、いかにして有効相互作用や固有値を導くか、(ii) \hat{Q} box をいかに精密かつ効率的に計算するかである。

まず、課題 (i) に関して、筆者らは、特異点(発散)の存在に伴って生じる \hat{Q} box の欠点を克服すべく、 \hat{Z} box という vertex function を代替的な構成要素とする計算方法を提案してきた [12, 13]。この \hat{Z} box 法は、固有値の大きさや固有関数の性質によらない安定した数値計算を保障する。従来の Krenciglowa-Kuo の逐次代入法 [10] や Lee-Suzuki の漸化式の方法 [14, 15] は、その収束条件が固有値の大きさや固有状態に依存するため、ある特定の解しか得られないという欠点をもつ。 \hat{Z} box 法はこれらの欠点を克服する試みと言える。

次に、課題 (ii) に関して言えば、 \hat{Q} box の摂動的解法は確立していると言えるが、摂動展開の収束性といった基本的な問題は解決されていない。十分な精度を保証する \hat{Q} box の計算方法を確立することは、有効相互作用理論の発展にとって不可欠の課題であった。

本論文では、漸化式の導入による非摂動的な \hat{Q} box の計算方法を提案し、固有値問題への応用について議論する。ここで提案される方法では、模型空間の次元数と同じか、それ以下の次元数をもつ小行列により、系のハミルトニアンが三重ブロック対角化される。したがって本方法は Lanczos 法の自然な拡張と見なすことができる。

論文の構成は次のとおりである。2章では有効相互作用理論の要点を述べる。3章は \hat{Z}

box 法を要約する。\$\hat{Q}\$ box 自体の精密かつ効率的な計算方法は4章で提案される。5章では、応用例として、モデル空間が1次元のばあいについて考察し、グラフィカルな方法で固有値問題が解けることを示す。最終章において、まとめと今後の展望を述べる。

2 相似変換による有効相互作用理論

あるヒルベルト空間内で定義されたハミルトニアン \$H\$ が与えられているとする。全空間をモデル空間 (\$P\$ 空間) とその補空間 (\$Q\$ 空間) に分割する。\$P\$ 空間内で与えられる演算子 \$H_{\text{eff}}\$ があって、その固有値のすべてが \$H\$ の固有値と一致するとき、\$H_{\text{eff}}\$ を有効ハミルトニアンと呼ぶ。\$H\$ が無摂動項 \$H_0\$ と相互作用 \$V\$ とに分割され、\$H = H_0 + V\$ で、\$H_0 = PH_0P + QH_0Q\$ という性質をもつとき、\$H_{\text{eff}} = PH_0P + V_{\text{eff}}\$ と表現し、\$V_{\text{eff}}\$ を有効相互作用と呼ぶ。ここで、\$P, Q\$ はそれぞれ \$P, Q\$ 空間への射影演算子である。

以下の議論では、\$P\$ 空間に属する状態とハミルトニアン \$H\$ とに関して特に条件を課さない。\$P\$ 空間に属する状態の無摂動エネルギーが縮退しているとの仮定もしない。また、ハミルトニアンを無摂動項 \$H_0\$ と摂動項 \$V\$ とに分割することもしない。このような非縮退系に関する有効相互作用理論については、高柳の研究がある [16, 17]。

\$H_{\text{eff}}\$ の構成法は一意的ではないが、ここでは以下の標準的な方法を採用する。まず、\$P\$ 空間の状態と \$Q\$ 空間の状態の間を相互にマッピングする演算子 \$\omega\$ を導入する。\$\omega\$ は次の性質をもつ [14]。

$$\omega = Q\omega P, \quad (2.1)$$

$$\omega^n = 0 \quad (n \geq 2). \quad (2.2)$$

ここで、\$\omega\$ を用いて、次のような \$H\$ の相似変換を考える。

$$\tilde{H} = e^{-\omega} H e^{\omega}. \quad (2.3)$$

式 (2.2) の性質より、\$e^{\omega} = 1 + \omega\$、\$e^{-\omega} = 1 - \omega\$ であるから

$$\tilde{H} = (1 - \omega)H(1 + \omega) \quad (2.4)$$

となる。

変換されたハミルトニアン \$\tilde{H}\$ の \$P\$ 空間への射影 \$P\tilde{H}P\$ が有効ハミルトニアン \$H_{\text{eff}}\$ となる条件は、\$\tilde{H}\$ が \$P, Q\$ 空間の間で切断 (decoupling) されていることである。すなわち

$$Q\tilde{H}P = 0. \quad (2.5)$$

上の条件は、式 (2.1), (2.4) より

$$QHP + QHQ\omega - \omega PHP - \omega PHQ\omega = 0 \quad (2.6)$$

となる。この \$\omega\$ についての方程式は、最初に大久保 [18] により別の方法を用いて導かれた。方程式 (2.6) の解 \$\omega\$ を用いて、\$H_{\text{eff}}\$ は

$$H_{\text{eff}} = PHP + PHQ\omega \quad (2.7)$$

と与えられる.

方程式 (2.6) は ω に関する非線型の行列方程式であり, 一般解を求めることは困難である. しかし, 次のような形式解が知られており, 応用上も満足いくものである. 式 (2.7) を用いて, (2.6) を次のように変形する.

$$QHP + QHQ\omega - \omega H_{\text{eff}} = 0. \quad (2.8)$$

H_{eff} の固有値方程式を

$$H_{\text{eff}}|\phi_k\rangle = E_k|\phi_k\rangle \quad (2.9)$$

とする. $|\phi_k\rangle$ は P 空間内の状態, E_k は固有値で, H の固有値のいずれかと等しいとする. H_{eff} は一般に非エルミートであり, d を P 空間の次元数とすると, $\{|\phi_k\rangle, k=1, 2, \dots, d\}$ は互いに直交しないから, 次の条件で随伴直交系 $\{|\tilde{\phi}_k\rangle, k=1, 2, \dots, d\}$ を導入する.

$$\langle\tilde{\phi}_k|\phi_{k'}\rangle = \delta_{kk'}. \quad (2.10)$$

$|\phi_k\rangle, |\tilde{\phi}_k\rangle$ を用いると, P 空間への射影演算子 P は

$$P = \sum_{k=1}^d |\phi_k\rangle\langle\tilde{\phi}_k| \quad (2.11)$$

と表される. 式 (2.8)-(2.11) を用いて, ω は

$$\omega = \sum_{k=1}^d \frac{1}{E_k - QHQ} QHP|\phi_k\rangle\langle\tilde{\phi}_k| \quad (2.12)$$

で与えられ, 式 (2.7) の H_{eff} は

$$H_{\text{eff}} = PHP + \sum_{k=1}^d PHQ \frac{1}{E_k - QHQ} QHP|\phi_k\rangle\langle\tilde{\phi}_k| \quad (2.13)$$

となる.

Kuo 達 [10] に従って, 次の \hat{Q} box と呼ばれる P 空間内での演算子を導入する.

$$\hat{Q}(E) = PHP + PHQ \frac{1}{E - QHQ} QHP. \quad (2.14)$$

ここで, E は任意の値をとる変数である. $\hat{Q}(E)$ を用いて, H_{eff} は

$$H_{\text{eff}} = \sum_{k=1}^d \hat{Q}(E_k)|\phi_k\rangle\langle\tilde{\phi}_k| \quad (2.15)$$

となる. この表現では右辺に未知量 $E_k, |\phi_k\rangle, |\tilde{\phi}_k\rangle$ が含まれているので, あくまで形式解にとどまるが, 次のような解法が考えられる. 式 (2.9) での固有値と固有状態が, 式 (2.15)

の H_{eff} の与える $E_k, |\phi_k\rangle$ と一致していればよい. このことから, 式 (2.9) と (2.15) による自己無撞着な解は, 次の逐次方程式を満たす.

$$\widehat{Q}(E_k^{(n)})|\phi_k^{(n+1)}\rangle = E_k^{(n+1)}|\phi_k^{(n+1)}\rangle. \quad (2.16)$$

$E_k^{(n+1)}, |\phi_k^{(n+1)}\rangle$ は n 次の解 $E_k^{(n)}$ による \widehat{Q} box の $(n+1)$ 次の固有値と固有状態である. この逐次代入法による解の収束性についてはかなり多くの研究がある [10, 14, 15, 16, 17]. しかし, 収束条件はかなり厳しく, ある特定の解のみが再現されることがわかっている. さらに, 式 (2.13) の定義からわかるように, $\widehat{Q}(E)$ は

$$QHQ|q\rangle = \varepsilon_q|q\rangle \quad (2.17)$$

で求まる QHQ の固有値 $E = \varepsilon_q$ で極となる. この \widehat{Q} box での特異性は数値計算上いくつかの困難をもたらす [12, 13]. 以上のことにより, \widehat{Q} box 法は多くの応用例はありながら, さらなる改良が求められていると言えよう.

3 \widehat{Z} box の導入と有効相互作用

\widehat{Q} box 法のいくつかの難点を克服するために, 筆者らは次の \widehat{Z} box を導入した [12, 13].

$$\widehat{Z}(E) \equiv \frac{1}{1 - \widehat{Q}_1(E)} [\widehat{Q}(E) - E\widehat{Q}_1(E)]. \quad (3.1)$$

ただし,

$$\begin{aligned} \widehat{Q}_1(E) &\equiv \frac{d\widehat{Q}(E)}{dE} \\ &= -PHQ \frac{1}{(E - QHQ)^2} QHP \end{aligned} \quad (3.2)$$

である. \widehat{Z} box は次の諸性質をもつ.

- (i) $\{E_k, k = 1, 2, \dots, d\}$ が H の固有値であるとき, 式 (2.15) で $\widehat{Q}(E)$ を $\widehat{Z}(E)$ で置き換えた

$$H_{\text{eff}} = \sum_{k=1}^d \widehat{Z}(E_k) |\phi_k\rangle \langle \tilde{\phi}_k| \quad (3.3)$$

も有効ハミルトニアンになる.

- (ii) $\widehat{Z}(E)$ の微分は次式で与えられる.

$$\frac{d\widehat{Z}(E)}{dE} \equiv \frac{2}{1 - \widehat{Q}_1(E)} \widehat{Q}_2(E) [\widehat{Z}(E) - EP]. \quad (3.4)$$

ただし,

$$\begin{aligned}\widehat{Q}_2(E) &\equiv \frac{1}{2!} \frac{d^2 \widehat{Q}(E)}{dE^2} \\ &= PHQ \frac{1}{(E - QHQ)^3} QHP\end{aligned}\quad (3.5)$$

である. H_{eff} の固有値 E_k と固有状態 $|\phi_k\rangle$ について

$$\left. \frac{d\widehat{Z}(E)}{dE} \right|_{E=E_k} |\phi_k\rangle = 0 \quad (3.6)$$

が成り立つ.

(iii) 式 (2.17) で与えられる QHQ の固有値 ε_q に対し, $\widehat{Z}(\varepsilon_q)$ は次の自己無撞着方程式の解となる.

$$\widehat{Z}(\varepsilon_q) |\mu_q\rangle = \varepsilon_q |\mu_q\rangle. \quad (3.7)$$

ここで, $|\mu_q\rangle$ は P 空間に属する $\widehat{Z}(\varepsilon_q)$ の固有状態である.

(iv) $E = \varepsilon_q$ での $\widehat{Z}(E)$ の微分について次のことが導かれる.

$$\left. \frac{d\widehat{Z}(E)}{dE} \right|_{E=\varepsilon_q} |\mu_q\rangle = 2 |\mu_q\rangle. \quad (3.8)$$

以上, (i)-(iv) の性質より, 次のことが結論される. $\widehat{Z}(E)$ は $\widehat{Q}(E)$ の特異点 $E = \varepsilon_q$ においても有限, かつ微分可能である. $\widehat{Z}(E)$ による自己無撞着な方程式は, 解として $E = \varepsilon_q$ も含むが, 式 (3.6), (3.8) に見るごとく微分値が大きく異なるので, H の真の固有値 $E = E_k$ とは容易に区別される [12, 13].

4 \widehat{Q} box の漸化式による計算法

これまでになされた有効ハミルトニアンを導く理論のほとんどは, \widehat{Q} box なる演算子を基本に構成されてきた [10]. 従来, \widehat{Q} box は摂動論を用いて計算されてきたが, 摂動展開の収束性や精度についてはほとんど知られていない. Q 空間の次元数が非常に大きい場合, QHQ の固有値問題を解くことや, $(E - QHQ)$ の逆行列を求めることはほぼ不可能と考えられてきたからである. \widehat{Q} box による有効ハミルトニアンの計算法では, \widehat{Q} box 計算の精度が H_{eff} の精度を決定する. モデル空間 (P 空間) の次元数は通常非常に小さく選ばれるので, P 空間内での諸量の計算では誤差の発生する可能性はほとんど考えられないからである. したがって, \widehat{Q} box をいかに精度よく計算するかが, 有効相互作用理論へのこの種のアプローチにとって中心的な課題となる.

4.1 ハミルトニアンの三重ブロック対角化

ここで、ハミルトニアンの行列表示を与えている基底ベクトルを変更して、ハミルトニアンを取り扱いやすい形に変形することを考える。初めに、次の演算子を考えよう。

$$Y_P \equiv PHQ \cdot QHP. \quad (4.1)$$

Y_P は P 空間上の演算子であり、エルミートかつ半正定値行列である。 P 空間内の固有値方程式

$$Y_P |p_k\rangle = y_k^{(1)} |p_k\rangle \quad (4.2)$$

を考えると、 $y_k^{(1)} \geq 0$ で、かつ固有ベクトル $\{|p_k\rangle, k = 1, 2, \dots, d\}$ は互いに直交する。ここで、固有値 $\{y_k^{(1)}\}$ のうち、ゼロでないものの個数を d_1 とする。ゼロでない固有値に属する固有ベクトル $|p_k\rangle$ に対して、次のように Q 空間に属する規格化されたベクトル $|q_k^{(1)}\rangle$ を導入する。

$$|q_k^{(1)}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{y_k^{(1)}}} QHP |p_k\rangle, \quad (k = 1, 2, \dots, d_1). \quad (4.3)$$

d_1 個のベクトルは互いに直交し、 Q 空間内で d_1 次元の部分空間の基底となる。ここで、その部分空間を Q_1 とすると、 Q_1 空間への射影演算子 Q_1 は

$$Q_1 = \sum_{k=1}^{d_1} |q_k^{(1)}\rangle \langle q_k^{(1)}| \quad (4.4)$$

となる。 Q 空間内の部分空間 Q_1 の補空間を \bar{Q}_1 とすると、

$$\bar{Q}_1 = Q - Q_1 \quad (4.5)$$

である。式 (4.3) から QHP は

$$QHP = \sum_{k=1}^{d_1} \sqrt{y_k^{(1)}} |q_k^{(1)}\rangle \langle p_k| \quad (4.6)$$

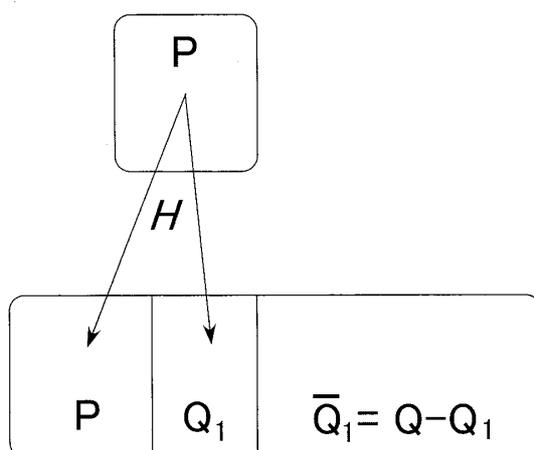
と書けることに注意すると

$$QHP = Q_1HP \quad (4.7)$$

であり、

$$\bar{Q}_1HP = 0 \quad (4.8)$$

が導かれる。すなわち、図 1 に示すように、写像 H による P 空間の像 $H(P)$ は P 空間自身と Q_1 空間の和となる。

図 1: 写像 H による P 空間の像 $H(P)$.

次に, P 空間を Q_1 空間に, Q 空間を補空間 \bar{Q}_1 に置き換えて, 同様の計算をすると, 新しい直交系が導かれる. 部分空間 Q_1 により, 次の演算子 Y_{Q_1} を定義する.

$$Y_{Q_1} = Q_1 H \bar{Q}_1 \cdot \bar{Q}_1 H Q_1. \quad (4.9)$$

Y_{Q_1} の固有値方程式を

$$Y_{Q_1} |q_k^{(1)}\rangle = y_k^{(2)} |q_k^{(1)}\rangle \quad (4.10)$$

としよう. Y_{Q_1} は Q_1 空間上の演算子であるから, その固有ベクトル $|q_k^{(1)}\rangle$ は Q_1 空間に属し, Q_1 空間の基底ベクトル $\{|q_k^{(1)}\rangle, k = 1, 2, \dots, d_1\}$ の一次結合である. 式 (4.10) の固有値 $\{y_k^{(2)}\}$ のうち, ゼロでないものの個数を d_2 とする. ゼロでない固有値をもつ d_2 個のベクトル $\{|q_k^{(1)}\rangle, k = 1, 2, \dots, d_2\}$ から, 次のような新しい正規直交系が導かれる.

$$|q_k^{(2)}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{y_k^{(2)}}} \bar{Q}_1 H Q_1 |q_k^{(1)}\rangle, \quad (k = 1, 2, \dots, d_2). \quad (4.11)$$

この直交系 $\{|q_k^{(2)}\rangle\}$ から d_2 次元の部分空間 Q_2 を定義できる. Q_2 空間への射影演算子 Q_2 は

$$Q_2 = \sum_{k=1}^{d_2} |q_k^{(2)}\rangle \langle q_k^{(2)}| \quad (4.12)$$

と書ける.

部分空間 Q_2 に対して, 次の性質が導かれる.

$$Q_2 H P = 0, \quad (4.13)$$

$$\bar{Q}_1 H Q_1 = Q_2 H Q_1, \quad (4.14)$$

$$\bar{Q}_2 H Q_1 = 0. \quad (4.15)$$

ただし, \bar{Q}_2 は Q 空間内の部分空間 $Q_1 + Q_2$ の補空間であり,

$$\bar{Q}_2 = Q - Q_1 - Q_2 \quad (4.16)$$

である.

以上の手続きを繰り返すと, 一般に次のことを示すことができる. Q 空間を部分空間に分割して

$$Q = Q_1 + Q_2 + \cdots + Q_n + \cdots \quad (4.17)$$

と書くことにする. 部分空間の一つ Q_m の基底ベクトルを $\{|q_k^{(m)}\rangle, k = 1, 2, \dots, d_m\}$ とすると, Q_m 空間への射影演算子 Q_m は

$$Q_m = \sum_{k=1}^{d_m} |q_k^{(m)}\rangle \langle q_k^{(m)}| \quad (4.18)$$

である. ここで, d_m は Q_m 空間の次元数である. 基底ベクトル $|q_k^{(m)}\rangle$ は以下の式で与えられる. まず, $Y_{Q_{m-1}}$ を

$$Y_{Q_{m-1}} \equiv Q_{m-1} H \bar{Q}_{m-1} \cdot \bar{Q}_{m-1} H Q_{m-1} \quad (4.19)$$

と定義する. ただし,

$$\bar{Q}_{m-1} = Q - (Q_1 + Q_2 + \cdots + Q_{m-1}) \quad (4.20)$$

である. $Y_{Q_{m-1}}$ の固有値方程式を

$$Y_{Q_{m-1}} |q_k'^{(m-1)}\rangle = y_k^{(m)} |q_k'^{(m-1)}\rangle \quad (4.21)$$

とする. ゼロでない固有値 $y_k^{(m)}$ に属する固有ベクトル $|q_k'^{(m-1)}\rangle$ を用いて, 新しい正規直交系

$$|q_k^{(m)}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{y_k^{(m)}}} \bar{Q}_{m-1} H Q_{m-1} |q_k'^{(m-1)}\rangle \quad (4.22)$$

を導入する. 直交系 $\{|q_k^{(m)}\rangle\}$ は部分空間 Q_m の基底ベクトルとなる. 式 (4.21) での固有値 $y_k^{(m)}$ のすべてが 0 ならば, $Q_m = 0$ として, それ以上計算を進める必要はない. 何故なら, このときは H の固有状態は $P + Q_1 + Q_2 + \cdots + Q_{m-1}$ の空間内にとどまるからである. ここでは, P 空間の状態と何ら結合しない固有状態は問題としていない.

以上のことから, 容易に次のことが結論される. 部分空間 $\{Q_1, Q_2, \dots, Q_m, \dots\}$ について

$$P H Q_m = Q_m H P = 0 \quad (m \geq 2), \quad (4.23)$$

$$Q_m H Q_{m+k} = Q_{m+k} H Q_m = 0 \quad (k \geq 2) \quad (4.24)$$

が成り立つ. このことは, 新しい基底ベクトル $\{|p_i\rangle\}, \{|q_j^{(1)}\rangle\}, \dots, \{|q_k^{(m)}\rangle\}$ により, ハミルトニアンは次のように, 高々 d 次元の小行列による三重ブロック対角行列

$$H = \begin{pmatrix} PHP & PHQ_1 & 0 & 0 & \cdots \\ Q_1HP & Q_1HQ_1 & Q_1HQ_2 & 0 & \cdots \\ 0 & Q_2HQ_1 & Q_2HQ_2 & Q_2HQ_3 & \cdots \\ 0 & 0 & Q_3HQ_2 & Q_3HQ_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

に変換されることを意味する. すなわち, 図2に示すように, 写像 H による Q_m 空間の像 $H(Q_m)$ は3つの隣り合う部分空間 Q_{m-1}, Q_m, Q_{m+1} の和となる.

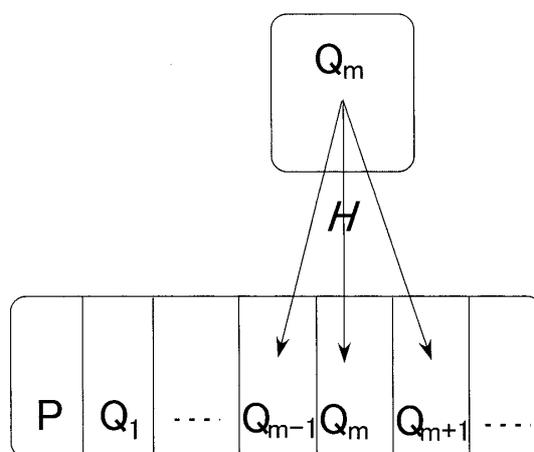


図2: 写像 H による Q_m 空間の像 $H(Q_m)$. ただし, $m \geq 2$.

4.2 ω 演算子による \hat{Q} box の表現

次の2つの演算子を定義する.

$$e(E) \equiv E - QHQ, \quad (4.26)$$

$$\omega(E) \equiv \frac{1}{e(E)} QHP. \quad (4.27)$$

演算子 $\omega(E)$ を用いて \hat{Q} box は

$$\hat{Q}(E) = PHP + PHQ\omega(E) \quad (4.28)$$

と表される. したがって, $\hat{Q}(E)$ の計算は $\omega(E)$ を求める問題に帰着される. Q 空間が式(4.17)のように部分空間に分割されていると, $\omega(E)$ も次のように分割される.

$$\omega(E) = \omega_1(E) + \omega_2(E) + \cdots + \omega_n(E) + \cdots \quad (4.29)$$

ただし

$$\omega_n(E) = Q_n \omega(E) P \quad (4.30)$$

である。式 (4.24) と式 (4.27) を用いて, $\{\omega_n(E)\}$ に関する次のような連立方程式

$$Q_1 e(E) \{\omega_1(E) + \omega_2(E)\} = Q_1 H P, \quad (4.31)$$

$$Q_2 e(E) \{\omega_1(E) + \omega_2(E) + \omega_3(E)\} = 0, \quad (4.32)$$

⋮

$$Q_n e(E) \{\omega_{n-1}(E) + \omega_n(E) + \omega_{n+1}(E)\} = 0, \quad (4.33)$$

⋮

が導かれる。性質 (4.23) により, \widehat{Q} box は

$$\widehat{Q}(E) = P H P + P H Q_1 \omega_1(E) \quad (4.34)$$

と表わされることがわかる。従って, \widehat{Q} box の計算は $\omega_1(E)$ を求める問題に帰着される。

4.3 連分数展開法

$\omega(E)$ に対する基本方程式 (4.31)-(4.33) を用いて, \widehat{Q} box は小行列による連分数によって展開されることを示そう。第1近似として, $m \geq 2$ に対して $\omega_m(E) = 0$ としてみる。式 (4.31) より $\omega_1(E)$ に対する解

$$\omega_1(E) = \frac{1}{e_1(E)} Q_1 H P \quad (4.35)$$

が得られる。ただし

$$e_1(E) = E - Q_1 H Q_1 \quad (4.36)$$

であり, 以後

$$e_m(E) = E - Q_m H Q_m \quad (4.37)$$

とする。解 (4.35) より, 第1近似の \widehat{Q} box

$$\widehat{Q}^{(1)}(E) = P H P + P H Q_1 \frac{1}{e_1(E)} Q_1 H P \quad (4.38)$$

が得られる。

次に, $m \geq 3$ に対して, $\omega_m(E) = 0$ とすると, 式 (4.32) より

$$\omega_2(E) = \frac{1}{e_2(E)} Q_2 H Q_1 \omega_1(E) \quad (4.39)$$

となる. この式を式 (4.31) に代入して

$$\omega_1(E) = \frac{1}{e_1(E) - Q_1 H Q_2 \frac{1}{e_2(E)} Q_2 H Q_1} Q_1 H P \quad (4.40)$$

となり, 第2近似の \hat{Q} box

$$\hat{Q}^{(2)}(E) = P H P + P H Q_1 \frac{1}{e_1(E) - Q_1 H Q_2 \frac{1}{e_2(E)} Q_2 H Q_1} Q_1 H P \quad (4.41)$$

が得られる. さらに近似を上げていくと, \hat{Q} box は高々 d 次元の小行列 $\{e_i(E)\}$ と $\{Q_i H Q_j\}$ により次式で与えられる連分数で表されることがわかる.

$$\hat{Q}(E) = P H P + P H Q_1 \frac{1}{e_1 - H_{12} \frac{1}{e_2 - H_{23} \frac{1}{e_3 - H_{34} \frac{1}{e_4 - \dots}} H_{32}} H_{21}} Q_1 H P \quad (4.42)$$

ただし,

$$H_{ij} = Q_i H Q_j \quad (4.43)$$

であり, $e_i(E) = e_i$ と略記した.

ここで, 考えている量子系に対する Q 空間が有限個の部分空間によって十分良く記述される場合について考えてみよう. 式 (4.17) での Q 空間の分割に対して, n の最大値を N とする. 次のように, $n = N$ から出発する降順の漸化式で与えられる $\{\tilde{e}_n(E)\}$ を考える.

$$\tilde{e}_{n-1}(E) = e_{n-1}(E) - H_{n-1,n} \frac{1}{\tilde{e}_n(E)} H_{n,n-1}. \quad (4.44)$$

n の最大値 $n = N$ のとき, $H_{N+1,N} = H_{N,N+1} = 0$ であるから,

$$\tilde{e}_N(E) = E - Q_N H Q_N \quad (4.45)$$

となる. 漸化式 (4.44) に代入して, 順次, $\tilde{e}_{N-1}(E)$, $\tilde{e}_{N-2}(E)$, \dots , $\tilde{e}_1(E)$ が求まる. \hat{Q} box は $\tilde{e}_1(E)$ を用いて

$$\hat{Q}(E) = P H P + P H Q_1 \frac{1}{\tilde{e}_1(E)} Q_1 H P \quad (4.46)$$

となる.

4.4 繰り込み逆プロパゲータ法

前節の式 (4.42) による \hat{Q} box の計算法は小行列による無限の連分数展開で与えられている。 Q 空間の次元数が無限大のとき、その計算法は必ずしも自明ではない。そこで、 $\omega_n(E)$ に対して昇順の漸化式により計算できる方法を考えてみる。

式 (4.37) と (4.43) を用いて、連立方程式 (4.31) - (4.33) を書き直すと

$$e_1(E)\omega_1(E) = H_{10} + H_{12}\omega_2(E), \quad (4.47)$$

$$e_2(E)\omega_2(E) = H_{21}\omega_1(E) + H_{23}\omega_3(E), \quad (4.48)$$

$$\vdots$$

$$e_n(E)\omega_n(E) = H_{n,n-1}\omega_{n-1}(E) + H_{n,n+1}\omega_{n+1}(E), \quad (4.49)$$

$$\vdots$$

となる。ただし、

$$H_{10} = Q_1HP \quad (4.50)$$

である。式 (4.48), (4.49) は ω_{n-1} , ω_n , ω_{n+1} の 3 項間の 1 次式で表わされている。これらの関係式を隣り合う 2 項間の関係式に書き直すことができる。式 (4.47) を

$$\alpha_1(E) = \frac{1}{e_1(E)}H_{10}, \quad (4.51)$$

$$\beta_1(E) = \frac{1}{e_1(E)}H_{12} \quad (4.52)$$

を用いて

$$\omega_1(E) = \alpha_1(E) + \beta_1(E)\omega_2(E) \quad (4.53)$$

と書く。さらにこの式を式 (4.48) に代入すると、 $\omega_2(E)$ は $\omega_3(E)$ による 1 次式

$$\omega_2(E) = \alpha_2(E) + \beta_2(E)\omega_3(E) \quad (4.54)$$

で表される。ただし、

$$\begin{aligned} \alpha_2(E) &= \frac{1}{e_2(E) - H_{21}\frac{1}{e_1(E)}H_{12}}H_{21}\frac{1}{e_1(E)}H_{10} \\ &= \frac{1}{e_2(E) - H_{21}\beta_1(E)}H_{21}\alpha_1(E), \end{aligned} \quad (4.55)$$

$$\begin{aligned} \beta_2(E) &= \frac{1}{e_2(E) - H_{21}\frac{1}{e_1(E)}H_{12}}H_{23} \\ &= \frac{1}{e_2(E) - H_{21}\beta_1(E)}H_{23} \end{aligned} \quad (4.56)$$

である．一般に，次の昇順の漸化式で与えられる $\alpha_n(E)$ と $\beta_n(E)$ を考えてみる．

$$\alpha_n(E) = \frac{1}{e_n(E) - H_{n,n-1}\beta_{n-1}(E)} H_{n,n-1}\alpha_{n-1}(E), \quad (4.57)$$

$$\beta_n(E) = \frac{1}{e_n(E) - H_{n,n-1}\beta_{n-1}(E)} H_{n,n+1}. \quad (4.58)$$

これから， $\omega_n(E)$ と $\omega_{n+1}(E)$ の関係式

$$\omega_n(E) = \alpha_n(E) + \beta_n(E)\omega_{n+1}(E) \quad (4.59)$$

が得られる．式 (4.51), (4.52) で与えられる初期値 $\alpha_1(E)$, $\beta_1(E)$ から始めて，漸化式 (4.57), (4.58) は $\{\alpha_n(E), \beta_n(E), n = 1, 2, \dots\}$ を与える．式 (4.59) から $\omega_1(E)$ に対する解は $\{\alpha_n(E)\}$, $\{\beta_n(E)\}$ のみで表わされ，

$$\begin{aligned} \omega_1(E) &= \alpha_1(E) + \beta_1(E)\alpha_2(E) + \dots + \beta_1(E)\beta_2(E)\dots\beta_{n-1}(E)\alpha_n(E) + \dots \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \prod_{m=1}^{k-1} \beta_m(E) \right\} \alpha_k(E) \end{aligned} \quad (4.60)$$

となる．したがって， \widehat{Q} box は

$$\widehat{Q}(E) = PHP + PHQ_1 \left[\sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \prod_{m=1}^{k-1} \beta_m(E) \right\} \alpha_k(E) \right] \quad (4.61)$$

と表される．

$\{\alpha_n(E)\}$ と $\{\beta_n(E)\}$ ，さらに \widehat{Q} box を $\{e_i(E)\}$ と $\{H_{ij}\}$ を用いて表現してみよう．まず，次の式で逆プロパゲータ $\bar{e}_m(E)$ を導入する．

$$\bar{e}_m(E) = e_m(E) - H_{m,m-1} \frac{1}{\bar{e}_{m-1}(E)} H_{m-1,m}. \quad (4.62)$$

ただし，

$$\begin{aligned} \bar{e}_1(E) &= e_1(E) \\ &= E - Q_1 H Q_1 \end{aligned} \quad (4.63)$$

とする．

$\{\alpha_n(E)\}$ と $\{\beta_n(E)\}$ は漸化式 (4.62) で与えられる $\{\bar{e}_i(E)\}$ を用いて，式 (4.57) と式 (4.58)

より

$$\alpha_1(E) = \frac{1}{\bar{e}_1(E)} H_{10}, \quad (4.64)$$

$$\alpha_2(E) = \frac{1}{\bar{e}_2(E)} H_{21} \frac{1}{\bar{e}_1(E)} H_{10}, \quad (4.65)$$

⋮

$$\alpha_n(E) = \frac{1}{\bar{e}_n(E)} H_{n,n-1} \frac{1}{\bar{e}_{n-1}(E)} H_{n-1,n-2} \cdots H_{21} \frac{1}{\bar{e}_1(E)} H_{10}, \quad (4.66)$$

⋮

$$\beta_1(E) = \frac{1}{\bar{e}_1(E)} H_{12}, \quad (4.67)$$

$$\beta_2(E) = \frac{1}{\bar{e}_2(E)} H_{23}, \quad (4.68)$$

⋮

$$\beta_n(E) = \frac{1}{\bar{e}_n(E)} H_{n,n+1}, \quad (4.69)$$

⋮

となる。したがって、式 (4.61) より \hat{Q} box は

$$\begin{aligned} \hat{Q}(E) = & PHP + H_{01} \frac{1}{\bar{e}_1(E)} H_{10} + H_{01} \frac{1}{\bar{e}_1(E)} H_{12} \frac{1}{\bar{e}_2(E)} H_{21} \frac{1}{\bar{e}_1(E)} H_{10} + \cdots \\ & + H_{01} \frac{1}{\bar{e}_1(E)} H_{12} \cdots H_{n-1,n} \frac{1}{\bar{e}_n(E)} H_{n,n-1} \cdots H_{21} \frac{1}{\bar{e}_1(E)} H_{10} + \cdots \end{aligned} \quad (4.70)$$

となる。

より簡単な表式は次のようにして得られる。次の漸化式で与えられる $\{\bar{H}_k(E)\}$ を導入する。

$$\begin{aligned} \bar{H}_k(E) &= H_{01} \frac{1}{\bar{e}_1(E)} H_{12} \frac{1}{\bar{e}_2(E)} H_{23} \cdots \frac{1}{\bar{e}_{k-1}(E)} H_{k-1,k} \\ &= \bar{H}_{k-1}(E) \frac{1}{\bar{e}_{k-1}(E)} H_{k-1,k}. \end{aligned} \quad (4.71)$$

ただし、この漸化式の初期値は

$$\bar{H}_1(E) = PHQ_1 \quad (4.72)$$

である。式 (4.71) で定義されている $\bar{H}_k(E)$ は P 空間と Q_k 空間を結びつける演算子で、 $(d \times d_k)$ 行列である。 $\{\bar{H}_k(E)\}$ を用いると、式 (4.70) で与えられる $\hat{Q}(E)$ は

$$\begin{aligned} \hat{Q}(E) &= PHP + \bar{H}_1 \frac{1}{\bar{e}_1(E)} \bar{H}_1^\dagger + \cdots + \bar{H}_n \frac{1}{\bar{e}_n(E)} \bar{H}_n^\dagger + \cdots \\ &= PHP + \sum_{k=1}^{\infty} \bar{H}_k \frac{1}{\bar{e}_k(E)} \bar{H}_k^\dagger \end{aligned} \quad (4.73)$$

と表される。ただし、 $\overline{H}_k(E) = \overline{H}_k$ と略記した。摂動論的に解釈すると、図3に示すように、

$$\widehat{Q}(E) = \begin{array}{c} \text{P} \\ \uparrow \\ \bullet \\ \downarrow \\ \text{P} \end{array} H + \sum_{k=1}^{\infty} \begin{array}{c} \text{P} \\ \uparrow \\ \bullet \\ \overline{H}_k \\ \downarrow \\ \bullet \\ \overline{H}_k \\ \downarrow \\ \text{P} \end{array} Q$$

図3: $\widehat{Q}(E)$ のダイアグラムの表現。太線はプロパゲータ $(\overline{e}_k(E))^{-1}$ を表わす。

\widehat{Q} box は $\{\overline{e}_k(E)\}$ と $\{\overline{H}_k\}$ を用いて2次項までの和で表わされる。 $\{\overline{e}_k(E)\}$ は 'renormalized inverse propagator' であり、 $\{\overline{H}_k\}$ は 'renormalized vertex' であるとみなされる。これらはいずれも、漸化式 (4.62) と (4.71) を用いて計算できる。

\widehat{Z} box を計算するには、式 (3.1), (3.4) で与えられているように $\widehat{Q}(E)$ の1階と2階の微分項が必要となる。 \widehat{Q} box が与えられていれば、微分項は数値的に計算することも可能であるが、以下のように、漸化式を用いて計算することもできる。式 (4.73) より、 $\widehat{Q}(E)$ の1階、2階の微分は次のようになる。

$$\frac{d\widehat{Q}(E)}{dE} = \sum_{k=1}^{\infty} \{(\overline{H}'_k(E)\lambda_k(E)\overline{H}_k^\dagger(E) + \text{h.c.}) + \overline{H}_k(E)\lambda'_k(E)\overline{H}_k^\dagger(E)\}, \quad (4.74)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2\widehat{Q}(E)}{dE^2} = & \sum_{k=1}^{\infty} \{2\overline{H}'_k(E)\lambda_k(E)\overline{H}_k^\dagger(E) + (\overline{H}''_k(E)\lambda_k(E)\overline{H}_k^\dagger(E) + \text{h.c.}) \\ & + 2(\overline{H}'_k(E)\lambda'_k(E)\overline{H}_k^\dagger(E) + \text{h.c.}) + \overline{H}_k(E)\lambda''_k(E)\overline{H}_k^\dagger(E)\}. \end{aligned} \quad (4.75)$$

ただし、

$$\overline{H}'_k(E) = \frac{d\widehat{H}_k(E)}{dE}, \quad (4.76)$$

$$\overline{H}''_k(E) = \frac{d^2\widehat{H}_k(E)}{dE^2}, \quad (4.77)$$

$$\lambda_k(E) = \frac{1}{\bar{e}_k(E)}, \quad (4.78)$$

$$\begin{aligned} \lambda'_k(E) &= \frac{d\lambda_k(E)}{dE} \\ &= -\frac{1}{\bar{e}_k(E)} \frac{d\bar{e}_k(E)}{dE} \frac{1}{\bar{e}_k(E)}, \end{aligned} \quad (4.79)$$

$$\begin{aligned} \lambda''_k(E) &= \frac{d^2\lambda_k(E)}{dE^2} \\ &= 2\frac{1}{\bar{e}_k(E)} \frac{d\bar{e}_k(E)}{dE} \frac{1}{\bar{e}_k(E)} \frac{d\bar{e}_k(E)}{dE} \frac{1}{\bar{e}_k(E)} - \frac{1}{\bar{e}_k(E)} \frac{d^2\bar{e}_k(E)}{dE^2} \frac{1}{\bar{e}_k(E)} \end{aligned} \quad (4.80)$$

である。

$\hat{Q}(E)$ の微分項の計算は、式 (4.74), (4.75) で与えられるように、 $\{\bar{H}_k(E)\}$, $\{\lambda_k(E)\}$ とそれらの微分項の計算に帰着される。 $\{\bar{H}_k(E)\}$ は式 (4.71) の漸化式で与えられるが、その微分項は次の漸化式で計算される。

$$\bar{H}'_k(E) = \{\bar{H}'_{k-1}(E)\lambda_{k-1}(E) + \bar{H}_{k-1}(E)\lambda'_{k-1}(E)\}H_{k-1,k}, \quad (4.81)$$

$$\bar{H}''_k(E) = \{\bar{H}''_{k-1}(E)\lambda_{k-1}(E) + 2\bar{H}'_{k-1}(E)\lambda'_{k-1}(E) + \bar{H}_{k-1}(E)\lambda''_{k-1}(E)\}H_{k-1,k}. \quad (4.82)$$

$\{\lambda_k(E)\}$ は式 (4.62) と (4.78) より

$$\lambda_k(E) = \{e_k(E) - H_{k,k-1}\lambda_{k-1}(E)H_{k-1,k}\}^{-1} \quad (4.83)$$

で与えられ、その微分項は次の漸化式に従う。

$$\lambda'_k(E) = -\lambda_k^2(E) + \lambda_k(E)H_{k,k-1}\lambda'_{k-1}(E)H_{k-1,k}\lambda_k(E), \quad (4.84)$$

$$\begin{aligned} \lambda''_k(E) &= -(\lambda'_k(E)\lambda_k(E) + \text{h.c.}) + \{\lambda'_k(E)H_{k,k-1}\lambda'_{k-1}(E)H_{k-1,k}\lambda_k(E) + \text{h.c.}\} \\ &\quad + \lambda_k(E)H_{k,k-1}\lambda''_{k-1}(E)H_{k-1,k}\lambda_k(E). \end{aligned} \quad (4.85)$$

$\{\bar{H}_k(E)\}$ に対する初期値 $\bar{H}_1(E)$ は式 (4.72) で与えられ、その微分項に対しては $\bar{H}'_1(E) = \bar{H}''_1(E) = 0$ である。 $\{\lambda_k(E)\}$, $\{\lambda'_k(E)\}$, $\{\lambda''_k(E)\}$ に対する初期値は式 (4.78) より

$$\begin{aligned} \lambda_1(E) &= \frac{1}{e_1(E)} \\ &= (E - Q_1HQ_1)^{-1}, \end{aligned} \quad (4.86)$$

$$\lambda'_1(E) = -(E - Q_1HQ_1)^{-2}, \quad (4.87)$$

$$\lambda''_1(E) = 2(E - Q_1HQ_1)^{-3} \quad (4.88)$$

である。

\hat{Q} box の微分項の計算手続きをまとめると次のようになる。まず、式 (4.83) で $\{\lambda_k(E)\}$ が計算され、式 (4.84) により $\{\lambda'_k(E)\}$ が計算される。これらを用いて式 (4.85) より $\{\lambda''_k(E)\}$ が計算される。 $\{\lambda_k(E)\}$, $\{\lambda'_k(E)\}$, $\{\lambda''_k(E)\}$ が求まると、式 (4.81), (4.82) より $\{\bar{H}'_k(E)\}$, $\{\bar{H}''_k(E)\}$ が求まり、式 (4.74), (4.75) に代入して、 \hat{Q} box の微分項が計算される。部分空間 Q_k の次元数を d_k とすると、 \hat{Q} box とその微分項の計算に必要な演算子 $\lambda_k(E)$, $\lambda'_k(E)$, $\lambda''_k(E)$ は $(d_k \times d_k)$ 行列であり、 $\bar{H}_k(E)$, $\bar{H}'_k(E)$, $\bar{H}''_k(E)$ は $(d \times d_k)$ 行列で表現される。ただし、 d は P 空間の次元数である。

5 1次元モデル空間での固有値問題

これまでの議論では、モデル空間の次元数 d は任意である。しかし、議論をハミルトニアンの固有値問題の解法という点にしよれば、モデル空間の次元数を $d = 1$ とすることが問題を単純化する。この場合、 $\{e_k(E)\}$, $\{\bar{e}_k(E)\}$, $\{H_{ij}\}$, さらには \hat{Q} box 自身も単なる c -数となる。ここでは、前章の 4.3, 4.4 で示した \hat{Q} box の 2 つの計算法により、 \hat{Q} box とその微分項がどのように与えられるかを述べる。さらに、 \hat{Z} box とそれを用いた固有値問題の解法について議論する。

5.1 1次元モデル空間での連分数展開法

式 (4.42) で与えられる \hat{Q} box は、 $d = 1$ の場合は通常の連分数で表わされ、

$$\hat{Q}(E) = H_0 + \frac{|H_{01}|^2}{e_1 - \frac{|H_{12}|^2}{e_2 - \frac{|H_{23}|^2}{e_3 - \dots}}} \quad (5.1)$$

となる。ただし、 $PHP = H_0$ とした。これは、Lanczos 法で用いられるスペクトル関数の表現 [1] と同形である。さらに、 $\hat{Q}(E)$ を変形して、

$$\hat{Q}(E) = H_0 + \frac{(|H_{01}|^2/e_1)}{1 - \frac{(|H_{12}|^2/e_1e_2)}{1 - \frac{(|H_{23}|^2/e_2e_3)}{1 - \dots}}} \quad (5.2)$$

と表わすことができる。ここで、式 (4.42) と同様に $e_k(E) = e_k$ と略記した。この連分数は次式のように計算される [19]。

$$\hat{Q}(E) = H_0 - \frac{A_\infty}{B_\infty}. \quad (5.3)$$

A_∞ , B_∞ は次の漸化式を用いて計算される数列 $\{A_k\}$, $\{B_k\}$ の極限值である。

$$X_n = X_{n-1} + a_n X_{n-2}. \quad (5.4)$$

数列 $\{A_n\}$, $\{B_n\}$ は初期値が異なる同じ漸化式で計算される。 $X_{-1} = 1$, $X_0 = 0$ としたとき $A_n = X_n$ であり、また $X_{-1} = 0$, $X_0 = 1$ としたとき $B_n = X_n$ となる。ただし、 $a_1 = -|H_{01}|^2/e_1$ であり、 $n \geq 2$ に対して

$$a_n = -\frac{|H_{n-1,n}|^2}{e_{n-1}e_n} \quad (5.5)$$

である。

\hat{Z} box による計算では、 \hat{Q} box の微分が必要となる。式 (5.3) により、

$$\hat{Q}'(E) = -\frac{A'_\infty B_\infty - A_\infty B'_\infty}{B_\infty^2}, \quad (5.6)$$

$$\hat{Q}''(E) = -\frac{A''_\infty B_\infty^2 - A_\infty B_\infty B''_\infty - 2A'_\infty B_\infty B'_\infty + 2A_\infty B_\infty'^2}{B_\infty^3} \quad (5.7)$$

となる. $A'_\infty, A''_\infty, B'_\infty, B''_\infty$ はそれぞれ次の漸化式により計算される数列 $\{A'_n\}, \{A''_n\}, \{B'_n\}, \{B''_n\}$ の極限值である.

$$X'_n = X'_{n-1} + a'_n X_{n-2} + a_n X'_{n-2}, \quad (5.8)$$

$$X''_n = X''_{n-1} + a''_n X_{n-2} + 2a'_n X'_{n-2} + a_n X''_{n-2}. \quad (5.9)$$

ただし, $X_{-1} = 1, X_0 = 0, X'_{-1} = X'_0 = 0, X''_{-1} = X''_0 = 0$ としたとき $A'_n = X'_n, A''_n = X''_n$, また $X_{-1} = 0, X_0 = 1, X'_{-1} = X'_0 = 0, X''_{-1} = X''_0 = 0$ としたとき $B'_n = X'_n, B''_n = X''_n$ である. $a'_1 = |H_{01}|^2/e_1^2, a''_1 = -2|H_{01}|^2/e_1^3$ で, $n \geq 2$ に対しては式 (5.5) より

$$a'_n = \frac{da_n}{dE} = |H_{n-1,n}|^2 \frac{e_{n-1} + e_n}{(e_{n-1}e_n)^2}, \quad (5.10)$$

$$a''_n = \frac{d^2a_n}{dE^2} = -2|H_{n-1,n}|^2 \frac{e_{n-1}^2 + e_{n-1}e_n + e_n^2}{(e_{n-1}e_n)^3} \quad (5.11)$$

となる.

5.2 1次元モデル空間での繰り込み逆プロパゲータ法

\hat{Q} box とその微分項は 4.4 で与えた繰り込み逆プロパゲータ法により, 次のように計算される. $\hat{Q}(E)$ に対する式 (4.73), $\hat{Q}'(E)$ に対する式 (4.74), $\hat{Q}''(E)$ に対する式 (4.75) の計算に必要な $\{\bar{H}_k\}, \{\bar{H}'_k\}, \{\bar{H}''_k\}, \{\lambda_k\}, \{\lambda'_k\}, \{\lambda''_k\}$ は全て c -数となるから, $\hat{Q}(E), \hat{Q}'(E), \hat{Q}''(E)$ はそれぞれ

$$\hat{Q}(E) = PHP + \sum_{k=1}^{\infty} |\bar{H}_k|^2 \lambda_k, \quad (5.12)$$

$$\hat{Q}'(E) = \sum_{k=1}^{\infty} \{(\bar{H}'_k \bar{H}_k^* + \text{c.c.}) \lambda_k + |\bar{H}_k|^2 \lambda'_k\}, \quad (5.13)$$

$$\hat{Q}''(E) = \sum_{k=1}^{\infty} \{2|\bar{H}'_k|^2 \lambda_k + (\bar{H}''_k \bar{H}_k^* + \text{c.c.}) \lambda_k + 2(\bar{H}'_k \bar{H}_k^* + \text{c.c.}) \lambda'_k + |\bar{H}_k|^2 \lambda''_k\} \quad (5.14)$$

と表わされる. ただし, $\bar{H}_k(E) = \bar{H}_k, \lambda_k(E) = \lambda_k$ と略記した.

$\{\bar{H}_k\}, \{\bar{H}'_k\}, \{\bar{H}''_k\}, \{\lambda_k\}, \{\lambda'_k\}, \{\lambda''_k\}$ に対する漸化式は, 式 (4.71), 式 (4.81) - (4.88) を用いて次のようになる.

$$\bar{H}_k = \bar{H}_{k-1} \lambda_{k-1} H_{k-1,k}, \quad (5.15)$$

$$\bar{H}'_k = (\bar{H}'_{k-1} \lambda_{k-1} + \bar{H}_{k-1} \lambda'_{k-1}) H_{k-1,k}, \quad (5.16)$$

$$\bar{H}''_k = (\bar{H}''_{k-1} \lambda_{k-1} + 2\bar{H}'_{k-1} \lambda'_{k-1} + \bar{H}_{k-1} \lambda''_{k-1}) H_{k-1,k}, \quad (5.17)$$

$$\lambda_k = \{e_k - \lambda_{k-1} |H_{k-1,k}|^2\}^{-1}, \quad (5.18)$$

$$\lambda'_k = -\lambda_k^2 + \lambda_k^2 \lambda'_{k-1} |H_{k-1,k}|^2, \quad (5.19)$$

$$\lambda''_k = -2\lambda'_k \lambda_k + \lambda_k^2 \lambda''_{k-1} |H_{k-1,k}|^2 + 2\lambda_k \lambda'_k \lambda'_{k-1} |H_{k-1,k}|^2. \quad (5.20)$$

ただし、初期値は $\overline{H}_1 = PHQ_1$, $\overline{H}'_1 = \overline{H}''_1 = 0$ であり、

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= (E - Q_1 H Q_1)^{-1} \\ &= (E - H_{11})^{-1},\end{aligned}\tag{5.21}$$

$$\lambda'_1 = -(E - H_{11})^{-2},\tag{5.22}$$

$$\lambda''_1 = 2(E - H_{11})^{-3}\tag{5.23}$$

である。

5.3 \widehat{Z} box 法による固有値問題の解法

5.1 または 5.2 節で与えられた $\widehat{Q}(E)$, $\widehat{Q}'(E)$, $\widehat{Q}''(E)$ を用いて、式 (3.1), (3.4) より $\widehat{Z}(E)$ と $\widehat{Z}'(E)$ が計算される。式 (3.3) の H_{eff} は $\widehat{Z}(E_k)$ に等しく、 H の固有値は

$$\widehat{Z}(E) = E\tag{5.24}$$

の解として求まる。式 (3.7) で示したように、方程式 (5.24) は QHQ の固有値 $E = \varepsilon_q$ も解として持つ。ただし、 H の固有値 $E = E_k$ と $E = \varepsilon_q$ のときは、 $\widehat{Z}(E)$ の微分係数が異なるので区別される。

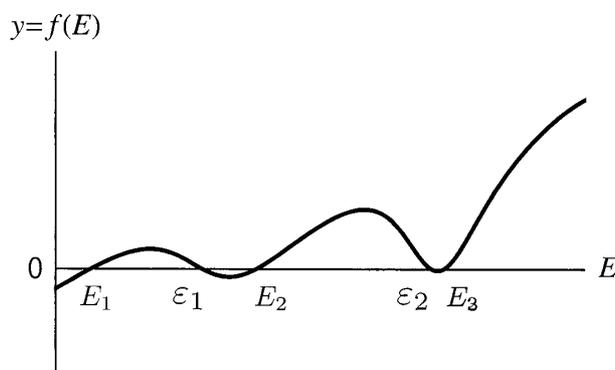


図 4: $y = f(E)$ と $y = 0$ の交点が $\widehat{Z}(E) = E$ の解となる。

次の関数 $f(E)$ を

$$f(E) = E - \widehat{Z}(E)\tag{5.25}$$

と導入すると、 $f(E)$ の微分は

$$f'(E) = 1 - \widehat{Z}'(E)\tag{5.26}$$

であるから、式 (3.6), (3.8) より

$$f'(E) = \begin{cases} 1 & E = E_k \text{ のとき,} \\ -1 & E = \varepsilon_q \text{ のとき} \end{cases}\tag{5.27}$$

となる. $d = 1$ の場合, 縮退がなければ, QHQ の固有値 $\{\varepsilon_q\}$ は H の次元数より 1 だけ小さな行列の固有値となり, H の固有値 $\{E_k\}$ との大小関係は $E_1 < \varepsilon_1 < E_2 < \varepsilon_2 \cdots < E_n < \varepsilon_n < \cdots$ となる. $y = f(E)$ のグラフは図 4 のようになるので, $y = 0$ との交点として $\{E_k\}$, $\{\varepsilon_q\}$ の近似値が求まる. その近傍で $f(E) = 0$ を数値的に解くことにより解の精度を上げることができる.

$f(E) = 0$ の解から解 $E = \varepsilon_q$ が自動的に排除され, かつ H の真の固有値 $\{E_k\}$ の近似解のみが得られる方法を考えてみよう. 一例として, 次の関数 $g(E)$ を導入してみる.

$$g(E) = \frac{1}{\left(\frac{E - \widehat{Z}(E)}{F_0}\right)^2 + \widehat{Z}'(E)^2 + \Delta^2}. \quad (5.28)$$

ここで, Δ は適当にとられた小さな数で, F_0 は $(E - \widehat{Z}(E))/F_0$ が微分項 $\widehat{Z}'(E)$ と同じ程度の量になるようにとられた定数である. F_0 は固有値を求める範囲内で, $|E - \widehat{Z}(E)|$ の最大値に近い値をとっておけばよい. 関数 $g(E)$ は, H の固有値 $E = E_k$ に対しては分母の第 1, 第 2 項とも 0 となるので

$$g(E_k) = \frac{1}{\Delta^2}, \quad (5.29)$$

QHQ の固有値 $E = \varepsilon_q$ に対しては

$$g(\varepsilon_q) = \frac{1}{4 + \Delta^2} \quad (5.30)$$

となる. したがって, $g(E)$ のグラフは $E = E_k$ の点で共鳴型の鋭いピークをもち, 図 5 のようになる. このグラフにより $\{E_k\}$ に対する近似値が求まれば, 数値的に必要な桁数ま

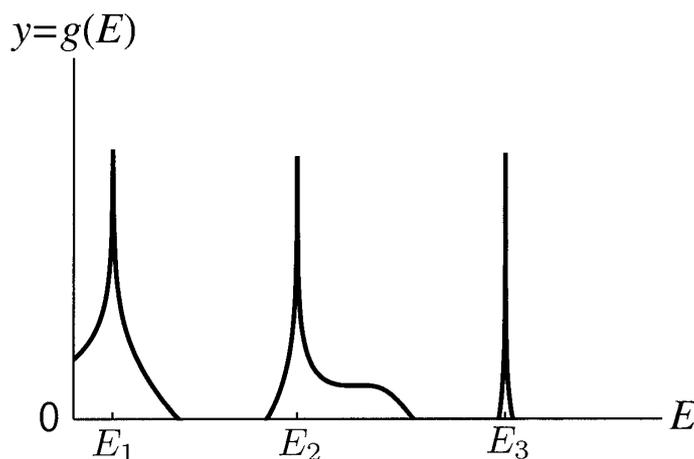


図 5: $y = g(E)$: 共鳴型で与えられる真の固有値. 縦軸は対数目盛りである.

で精度を上げる方法はいくつか考えられる.

6 結論

ここで議論されてきた問題は、ハミルトニアンにより記述される量子系の固有値問題を、有効相互作用理論の枠組みの中で解くことである。これまでの有効相互作用理論のほとんどは、Kuo 達による \hat{Q} box を構成要素として組み立てられてきた。ここでの問題は次の2つにある。

- (a) \hat{Q} box をいかに精密、かつ効率よく計算するか、
- (b) \hat{Q} box を用いていかにして有効相互作用や固有値を導くか。

問題 (a) に関して、我々は以下の処方方を定式化した。はじめに、モデル空間 (P 空間) の次元数と同じか、それ以下の次元数を持つ小行列により、ハミルトニアンを三重ブロック対角化する。このハミルトニアンの変換は、 P 空間が与えられると一意的に決定される。この処方方はよく知られた Lanczos 法の自然な拡張と考えられる。 \hat{Q} box はハミルトニアンを構成する小行列により、次の2つの方法で与えられることが示された。

- (i) 三重ブロック対角行列を構成する小行列による連分数展開。この連分数は、ある漸化式により計算できることが示される。
- (ii) 繰り込まれた vertex と inverse propagator による表現。この方法では三重ブロック対角化されたハミルトニアンをもとに、ある漸化式によって、繰り込まれた vertex と inverse propagator が導入される。このとき、 \hat{Q} box は摂動展開の1次と2次項のみの和で与えられることが示される。

問題 (b) に関しては、筆者らは \hat{Z} box 法なる方法を提案してきた。この方法は、 \hat{Q} box が持つ特異点を解消する試みであり、安定した数値計算を保証するものである。ただし、 \hat{Z} box によるハミルトニアンの固有値を求める方程式は、その解として、 \hat{Q} box の特異点 (極) を含むことが示される。その”余分な解”を排除するため、 \hat{Z} box から導かれる新しい関数 $g(E)$ を導入した。 $g(E)$ は、そのグラフがハミルトニアンの真の固有値に対してのみ”共鳴”のごとき、狭い幅を持つように定義されている。このことにより、固有値問題をグラフによる共鳴曲線の表示の問題に置き換えることができる。

以上のことをまとめると、計算の処方方は次のようになる。

- (1) ハミルトニアンを三重ブロック対角化する。
- (2) \hat{Q} box を計算する。
- (3) \hat{Z} box を計算する。
- (4) 関数 $g(E)$ を求めてグラフに表示する。固有値はグラフの”共鳴”位置として与えられる。
- (5) グラフで求められた近似解から、さらに精度を上げたいときは、通常の方程式の解法である Newton-Raphson 法や、bisection 法などを用いればよい。

この方法の応用例として、モデル空間が1次元の場合を考察した。この場合は、一般論で計算の基本となった小行列は全て c -数に置き換えられ、計算手続きは非常に簡素化される。この場合のハミルトニアン三重対角化の手続きは、通常の Lanczos 法と本質的に同じである。ここで、我々は簡単なモデルハミルトニアンによる関数 $g(E)$ を計算し、”共鳴”曲線による固有値問題の解法について考察した。

ここで議論した方法は巨大行列の固有値問題にも適用し得る可能性を持つ。与えられた行列の次元数を N とするとき、 N^3 に比例する計算量は必要としない。また、この方法では問題に応じた精度の範囲内で適当な数の分点 $\{E_i\}$ をとって $g(E)$ のグラフを描けばよい。分点 $\{E_i\}$ について $\{g(E_i)\}$ の計算は独立にできるので、並列処理に適しているといえる。この方法による数値計算上の諸問題として、このアルゴリズムによる最適プログラムの作成、必要とされるメモリー量、計算にかかる時間等に関する検討が必要になる。これらは今後の課題としたい。

参考文献

- [1] 夏目雄平, 小川健吾, 鈴木敏彦, 計算物理学 III -数値磁性体物性入門- (朝倉書店, 2002) .
- [2] 山田進, 今村俊幸, 町田昌彦, 量子多体問題における自由度の壁とそれを越える並列対角化アルゴリズムの開発: 地球シミュレータ上での超並列量子計算の現状 (数値シミュレーションを支える応用数理), 数理解析研究所講究録 (2007), 1573: 53-62, URL <http://hdl.handle.net/2433/81322> .
- [3] T. T. S. Kuo, E. Osnes, *Lecture Notes in Physics* Vol. 364 (Springer-Verlag, New York, 1990).
- [4] M. Hjorth-Jensen, T. T. S. Kuo, E. Osnes, *Phys. Rep.* **261**, 125 (1995).
- [5] M. Pedersen Lohne, G. Hagen, M. Hjorth-Jensen, S. Kvaal, F. Pederiva, *Phys. Rev. B* **84**, 115302(2011).
- [6] J. Christensen, C. Forssén, S. Åberg, S. M. Reimann, *Phys. Rev. A* **79**, 012707(2009).
- [7] K. Suzuki, R. Okamoto, H. Kumagai, *Phys. Rev. C* **36**, 804 (1987).
- [8] S. Fujii, R. Okamoto, K. Suzuki, *Phys. Rev. C* **69**, 034328 (2004).
- [9] S. Fujii, R. Okamoto, K. Suzuki, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 182501 (2009).
- [10] E. M. Krenciglowa, T. T. S. Kuo, *Nucl. Phys. A* **235**, 171(1974).
- [11] J. Shurpin, T. T. S. Kuo, D. Strottman, *Nucl. Phys. A* **408**, 310(1983).
- [12] R. Okamoto, K. Suzuki, H. Kumagai, S. Fujii, *J. Phys. G. Conf. Ser.* **267**, 012017(2011).

- [13] K. Suzuki, R. Okamoto, H. Kumagai, S. Fujii, Phys. Rev. C **83**, 024304(2011).
- [14] K. Suzuki, S. Y. Lee, Prog. Theor. Phys. **64**, 2091(1980).
- [15] K. Suzuki, R. Okamoto, P. J. Ellis, T. T. S. Kuo, Nucl. Phys. A **567**, 570(1994).
- [16] K. Takayanagi, Nucl. Phys. A **852**, 61(2011).
- [17] K. Takayanagi, Nucl. Phys. A **864**, 91(2011).
- [18] S. Okubo, Prog. Theor. Phys. **12**, 603(1954).
- [19] W. B. Jones, W. J. Thron, *Continued Fractions*, Encyclopedia of Mathematics and its Applications, Vol. 11, Addison-Wesley Publishing Company, 1980.