

# 量子スピン系の演算子のためのインプリメンテーション

門脇 眞示

倉敷芸術科学大学産業科学技術学部

(2002年9月30日 受理)

## 1 はじめに

高温展開法は、スピン1/2ハイゼンベルク強磁性模型に対して、Opechowski<sup>1</sup>によって初めて用いられ、RushbrookeとWood<sup>2</sup>によって一般のスピンに対しても適用できるように修正された。この方法はDombとSykes<sup>3</sup>によっても研究され、以後多くの研究者によって精力的に研究が進められた。高温展開法は、Betts達<sup>4, 5</sup>によってスピン1/2XY模型に適用された。彼らは展開係数の評価に必要なトレース値を求めるために演算子の操作をグラフの問題に帰着させた。そして、後述のシャドウグラフにおける演算子の時間的順序による重みである縦の重み (vertical weight) と与えられたシャドウグラフと等価なグラフの個数である横の重み (horizontal weight) を導入した。本稿では、縦の重みを厳密に評価するために縦型探索を用いた有効なアルゴリズムを提案し、そのインプリメンテーションについて述べる。

## 2 ハミルトニアンと分配関数

零磁場におけるスピン1/2XY模型に対するハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$$

によって定義される。ただし、 $J$ は結合定数であり、総和 $\sum_{\langle i, j \rangle}$ は最近接スピン対についてとることを表す。また、 $S_i^+$ はサイト $i$ でのスピン上昇演算子であり、 $S_i^-$ はスピン下降演算子である。対演算子 $S_i^+ S_j^-$ は、サイト $i$ でのスピンの下向き状態にあり、かつサイト $j$ のスピンの上向き状態にあるときに限り互いのスピン状態を交換し、 $S_i^- S_j^+$ についてはその逆のスピン状態にあるときに限り互いのスピン状態を交換する。それ以外は、零状態に写像する。

零磁場における分配関数 $Z$ の級数展開は

$$Z = \text{tr} \exp(-\beta \mathcal{H}) = \text{tr} \{ 1 - \beta \mathcal{H} + \beta^2 \mathcal{H}^2 / 2! - \dots \}$$

で与えられる。ただし、 $\text{tr}$ はトレースを表し、 $\beta = 1/k_B T$ で、 $k_B$ はBoltzman定数、 $T$ は温度である。

上式において、第 $\ell$ 展開項における $\mathcal{H}^\ell$ は、 $S_i^+ S_j^-$ または $S_i^- S_j^+$ のタイプの双方、またはいずれか一方による $\ell$ 個の対演算子の積からなる全部で $N_0 \cdot 2^\ell$ 個の項に展開できる。ただし、 $N_0$ は与えられた格子系での最近接スピン対の総数である。相異なるサイトにおけるスピン演算子同

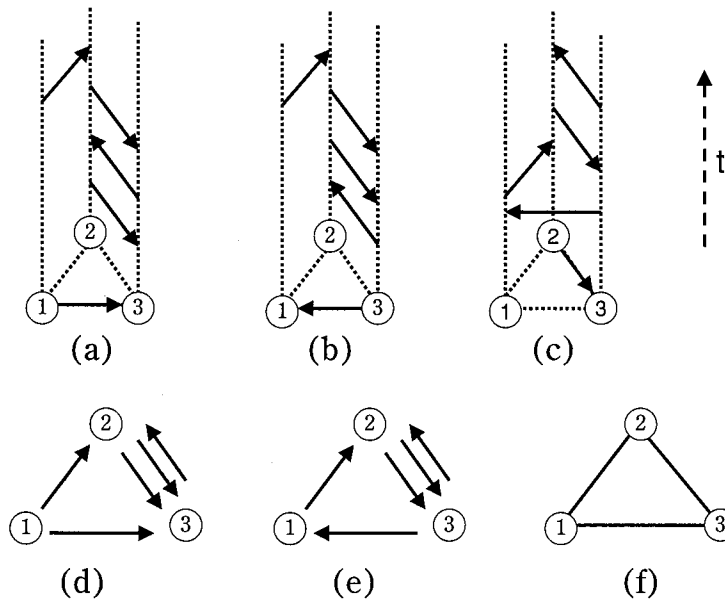
士は可換であるが、同一サイトにおいては、上昇演算子/下降演算子の性質により、続けて2回以上 $S^+$  (あるいは $S^-$ ) を作用させると常に零となるので、非零となるには各サイト毎に $S^+$ および $S^-$ の演算順序が交互になっていなければならない。Betts, ElliottおよびLeeの方法<sup>4, 5</sup>に従えば、これらの展開項をグラフ問題に帰着させることができる。

### 3 グラフと木

ここで便宜のために、グラフと木についての定義をまとめることにする。<sup>6, 7, 8, 9</sup> グラフ $G = (V, E)$  は、頂点 (vertex) の集合 $V$ と辺 (edge) の集合 $E$ からなる。各辺が順序付けされている対であれば、有向グラフ (directed graph) といい、順序付けされていない対であれば、無向グラフ (undirected graph) という。2頂点の順序対 $(v, w)$ を弧 (arc) といい、 $v$ を弧の始点といい、 $w$ を終点という。弧 $(v, w)$ は $v \rightarrow w$ とも表す。有向グラフ内の頂点の列 $v_1, v_2, \dots, v_n$ で、 $v_1 \rightarrow v_2, v_2 \rightarrow v_3, \dots, v_{n-1} \rightarrow v_n$ がすべて弧であるものを頂点 $v_1$ から頂点 $v_n$ への経路 (path) といい、その弧の数を経路の長さ (length) という。有向グラフ $G = (E, V)$ において、 $(v, w)$ が $E$ に含まれる辺ならば、頂点 $w$ は頂点 $v$ に隣接する (adjacent) という。隣接している点を次数 (degree) という。有向グラフ内の1頂点 $v$ に対して、辺 $(w, v)$ の数を $v$ の入次数 (in-degree) といい、辺 $(v, w)$ の数を $v$ の出次数 (out-degree) という。一方、根付き木 (rooted tree) は、根 (root) とそれ以外の任意の節点 (node) の間に丁度一つだけの経路が存在する特殊な有向グラフである。木は階層的なものであり、木における節の間には親子関係が存在する。節 $v$ から節 $w$ への枝が存在するとき、節 $v$ は節 $w$ の親 (parent) であり、節 $w$ は節 $v$ の子 (child) であるという。また、節 $u$ から節 $w$ への経路が存在するとき、節 $u$ は節 $w$ の先祖 (ancestor) であり、節 $w$ は節 $u$ の子孫 (descendant) であるという。全く子孫を持たない節を葉 (leaf) という。節 $v$ から葉までの最短経路の長さを $v$ の高さ (height)、根の高さをその木の高さ (tree height) という。また、根から $v$ までの経路の長さを $v$ の深さ (depth) という。根のレベルを0と定義すると、その子のレベルは1となり、以下その子孫の代が進むにつれて1レベルずつ高くなる。

### 4 シャドウグラフと縦の重み

本節では、Betts達の用いた用語を復習する。対演算子 $S_i^+ S_j^-$ をサイト $i$ からその最近接サイト $j$ への矢印で、 $S_i^- S_j^+$ をその逆向きの矢印で表示すると、それぞれ、弧 $(j, i)$ および弧 $(i, j)$ と対応させることができる。 $\mathcal{H}$ は $2N_0$ 本の矢印の集合とみなすことができ、第 $\ell$ 展開項における各 $\ell$ 個の対演算子の積による項は、それぞれ、その集合から重複も許して選択された $\ell$ 本の時間的順序付き (つまり、選択された順序に従った $\ell$ 本の) 矢印による有向グラフと対応付けられる。この時間的順序付き有向グラフを以後は単に順序付きグラフということにする。これらの有向グラフは、一般には幾つかの非連結な部分グラフから成っている。一般に、幾つかの順序付きグラフは、その選択の順序を無視すると、そのグラフの空間的射影となる一つの有向



[図1] グラフ (a), (b) および (c) は順位付きグラフの例である。ただし、tは時間軸を表す。(a) は2条件とも満たさない。(b) は条件2を満たさない。(c) は2条件とも満たし、トレースに非零の寄与をする。(d) は (a) のためのシャドウグラフであり、(e) は (b) および (c) のためのシャドウグラフである。(f) は (d) および (e) に対する裸グラフである。

グラフに対応する。このグラフを、特に、シャドウグラフ (shadow graph) と呼ぶ。また、シャドウグラフにおける各最近接サイト間の接続性のみを示す無向グラフ (undirected graph) を裸グラフ (bare graph) と呼ぶ。これらのグラフの例として、展開項 $\mathcal{H}^3$ に含まれる演算子列の中から代表として3つの演算子列

$$S_1^- S_3^+ S_2^- S_3^+ S_2^+ S_3^- S_2^- S_3^+ S_1^- S_2^+, \quad S_1^+ S_3^- S_2^+ S_3^- S_2^- S_3^+ S_2^- S_3^+ S_1^- S_2^+$$

および  $S_2^- S_3^+ S_1^+ S_3^- S_1^- S_2^+ S_2^- S_3^+ S_2^+ S_3^-$

について図1に示す。

交換関係とトレースの性質により、各サイト (つまり、シャドウグラフの各頂点) において、以下の2条件を満たすグラフのみが、分配関数に非零の寄与をする。

条件1: 矢印の頭と矢印の尾の数が同数個 (つまり、その頂点における辺の入次数と出次数が等しい) であり、

条件2: 矢印の頭と矢印の尾の入出順序が交互となる

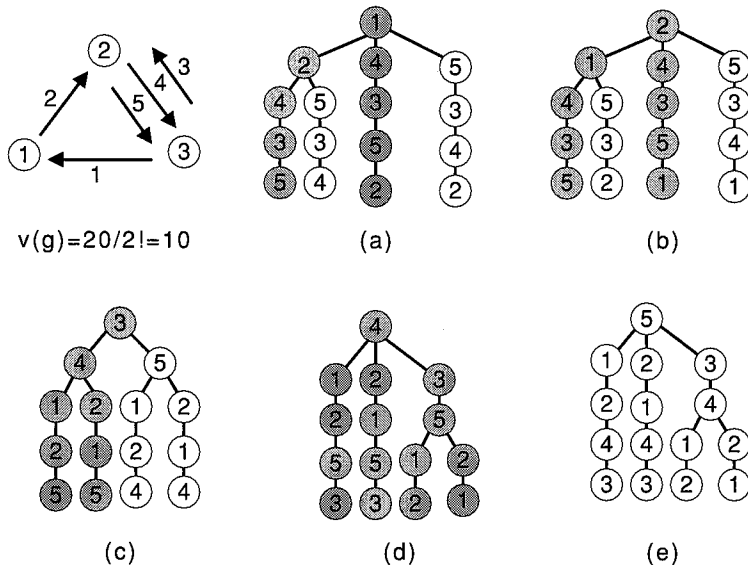
これら2条件を満たすグラフを認可グラフ (allowed graph) という。各認可グラフの分配関数における係数  $K'/\ell!$  への寄与は、 $2^{N-s}$  である。ただし、 $K=J/k_s T$  であり、 $s$  は対応する裸グラフのサイトの数である。

$\mathcal{H}'$  に含まれる項の中で条件2を満たし、それらの対演算子の順序のみが互いに異なるメンバーによる部分集合が存在する。同一のシャドウグラフ  $g'$  に属し、各頂点の縦方向において、矢印の頭と矢印の尾の入出順序が交互で、それらの矢印の全体に渡った縦方向の順序において、他のものと時間的順位で異なる  $v(g')$  個の有向グラフ  $g''$  が存在する。この  $v(g')$  をグラフ  $g'$  の縦の重み (vertical weight) という。

### 5 縦の重みの評価法

与えられたシャドウグラフに対する縦の重みを評価する方法を以下に提案する。具体例として、図2に示したシャドウグラフを用いる。このシャドウグラフは条件1を満たしている。

このシャドウグラフの各矢印に一意的にラベルを付ける (シャドウグラフはラベルなしの有向グラフであるが、順位付きグラフを数え上げるためにはラベルを付ける必要がある)。手続きとしては、まず最初に順位付きグラフの根としてラベル1をもつ矢を指定し、以後は条件2を満足する矢印のラベル番号を要素とした節を順次選択し、経路を生成しつつ木を作っていく。各節の深さに1を足した値が、条件2を満足した回数となる。トレースに非零の寄与をする経路は、葉の深さがシャドウグラフの矢印の総数より1小さい4に等しいものである。図2の各木において根から葉への各経路は、それぞれトレースに非零の寄与をする順位付きグラフに対



[図2] 木 (a) から (e) における根から葉への全部で20個の経路が、与えられたシャドウグラフから生成される2条件を満たす順序付きグラフに対応している。シャドウグラフでの矢の重複度を考慮すれば、図の根から葉への影付き経路の個数10を得る。

応しているものだけを表示し、トレースに零の寄与をする経路はすべて木の表示から省いてある。これら5本の木(図2の(a)から(e))において、深さ4を持つ葉の総数は20である。しかしながら、シャドウグラフはラベルなしの有向グラフであるから、ラベル4とラベル5の矢印はラベルを無視すると識別できなくなるので、 $20/2! = 10$ である。この数(トレースへ非零の寄与をする経路の個数)が与えられたシャドウグラフの縦の重みである。

以下に、シャドウグラフ $g'$ の縦の重み $v(g')$ を必要最少の探索回数で評価するための手順を示す。

1. 任意の一つのシャドウグラフ $g'$ を指定する手順。
  - (a)  $g'$ に含まれる全ての頂点(サイト)に一意的に番号を付ける。
  - (b)  $g'$ に含まれる全ての矢印に一意的に番号を付ける。ただし、重複している矢印は連番にする。
  - (c)  $g'$ に対する隣接行列をつくる。
  - (d) この隣接行列を用いて、条件1を満たすかどうかチェックする。
  - (e) 条件1を満たさないときは縦の重み0であるので終了する。そうでなければ次のステップを実行する。
2.  $g'$ に対する縦の重み $v(g')$ を評価する手順。
  - (a) ステップ1.(b)で番号付けされた全ての矢印を含み、矢印の重複も考慮した、条件2を満足する経路(順位付きグラフに対応)を生成し、先ず1本目の木を生成する。
  - (b) すでに得られた木の根に用いた矢印とは異なる矢印を根とした木をステップ2.(a)と同様な手順で順次可能な限り生成する。
  - (c) すべての木において、葉の深さが矢印の総数-1である葉の総数(条件2を満足する全ての順位付きグラフの個数)を求める。この値が求める縦の重み $v(g')$ である。

## 6 インプリメンテーション

以上の手順に則りそのインプリメンテーションを示すことにする。まず、第1ステップとして、任意の1つのシャドウグラフを登録するために必要となるデータ構造を図3に示す。

与えられたシャドウグラフに属する全ての矢印の頭と尾に対応する頂点の番号を登録するために2つの配列 head および tail を用いる。それらの配列のインデックスは矢印のラベルに対応する。この登録に際して重複した矢印には一括して連番を付ける。また、そのグラフの隣接行列を作るために2次元配列 adj\_mat を用いる。配列 adj\_mat の第  $(i, j)$  要素の内容は頂点 $j$ から頂点 $i$ への矢印の個数を与える。以上の配列の内容は、任意の一つのシャドウグラフを指定する度に登録し、登録後は縦の重みの評価終了まで変更しない。与えられたシャドウグラフが条件1を満たすかどうかの判定は、作成された隣接行列において各 $i (= 1, \dots, d)$  に対して第 $i$ 行の要素の総和と第 $i$ 列の要素の総和が等しいことをチェックすればよい。ただし、 $d$ は与えられたシャドウグラフを登録するために必要とされる隣接行列の次元数である。

第2ステップにおいては、図4のようなデータ構造を考えれば十分である。

与えられたシャドウグラフ内の全ての矢印のラベル（正の整数値）を配列 `used_arrows` に登録しておく。各レベルにおいて条件2をチェックするため、各サイト（つまり、頂点）での現スピン状態を保持する配列 `spin_state` の内容を確認しながら、図2に示されたような各枝をなぞっていく。その進行中、現在すでに使用済みとなっている矢印を示すために配列 `used_arrows` を用いる。その内容が正数であればその矢印が未使用であることを示し、負数であれば使用済みであることを示す。そのなぞりの進行状況は配列 `allowed_arrows` とその各レベルでの現使用矢印を指示するためのポインタ `p` を用いて管理することにより一意的に識別できる。これらの配列の内容は、すべて、ステップが進むにつれ動的に変更されていく。

以下に、第2ステップの操作について具体的に示す。

ステップ2.(a)では、配列 `allowed_arrows` の第0行に、すべての矢印の番号を昇順に代入し、最後に番兵として終端子0を付加する。ただし、重複している矢印を考慮するために矢印の番号を連番で登録していたが、その中で最も若い番号の矢印のみをこの配列の行に登録する。この配列の第0行の各要素がそれぞれの木の根となり、レベルは0である。ポインタ `p(0)` により指示された配列要素 `allowed_arrows(0, p(0))` が現在探索中の木の根で、ある順位付きグラフにおける第1位の矢印に対応している。最初、配列 `spin_state` の各要素に `EMPTY`（図4で\*）

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
head	1	2	2	3	3							
tail	3	1	3	2	2							

adj_mat	1	2	3	4	5	6
1	0	0	1			
2	1	0	1			
3	0	2	0			
4						
5						
6						

[図3] シャドウグラフ登録用のデータ構造

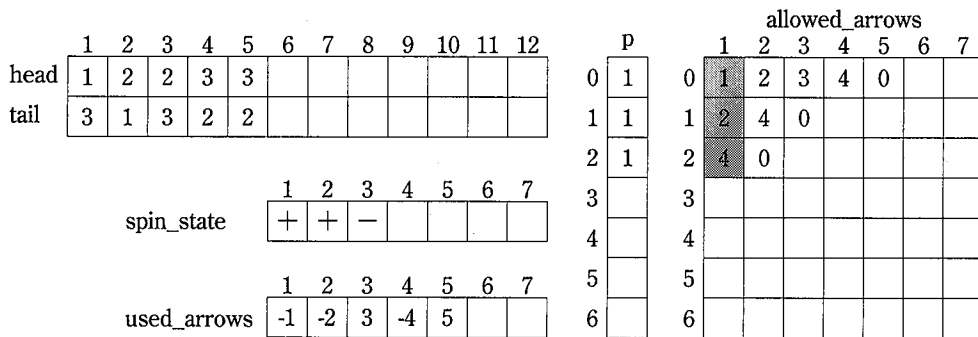
	p		1	2	3	4	5	6	7
0		0							
1		1							
2		2							
3		3							
4		4							
5		5							
6		6							

spin_state	1	2	3	4	5	6	7
	*	*	*				

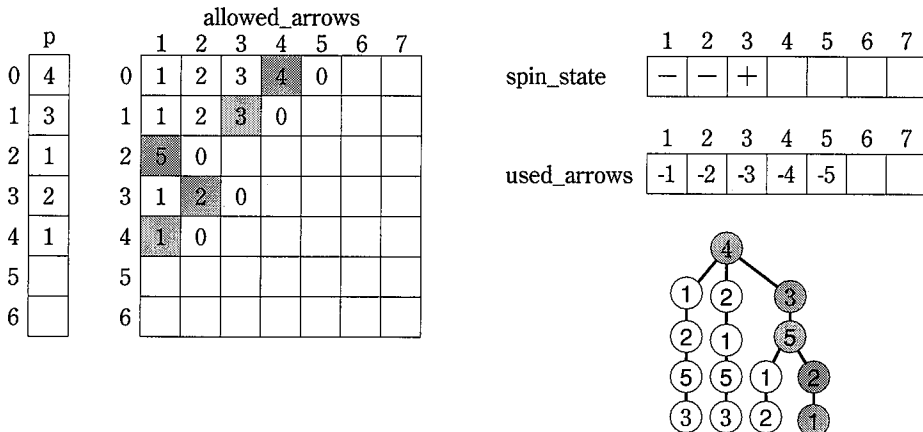
used_arrows	1	2	3	4	5	6	7
	1	2	3	4	5		

[図4] 縦の重みの評価用のデータ構造

を代入し、空状態にしておく。また、配列 `used_arrows` にすべての矢印の番号を昇順に代入しておく。第1位の矢印として、`used_arrows(1)` をラベルにもつ矢印を選択したことを表すために、その内容の符号を反転し負数にしておく。ラベル1の矢印はサイト `head(1)` が上向きスピン状態で、サイト `tail(1)` が下向きスピン状態であるので、次回はその逆のスピン状態でなければ条件2を満足することができない。したがって、`spin_state(head(1))` に MINUS (図5で-) を、`spin_state(tail(1))` に PLUS (図5で+) を代入しておく。以下、レベルを1だけ進め、`used_arrows` から条件2を満たし、かつ未使用の矢印をすべて `allowed_arrows` の対応するレベル行に登録し、最後に終端子0を付加しておく。ただし、ここでも、重複している矢印は其中で最も若い番号の矢印のみを登録する。`allowed_arrows(level, 1)` が0であれば、すべての矢印を選択し尽くさない中に、条件2を侵してしまったので、バックトラックを行う。ただし、`level` は現在なぞっている木の節のレベルである。それ以外は、`allowed_arrows` の現在行の第1要素を番号に持つ矢印を使用することを示すために、`used_arrows` の対応する要素の値を符号反転しておくとともに、`spin_state` も状態に応じて (PLUSならMINUSに、MINUSならPLUSに、



[図5] 縦の重みの評価過程の一例



[図6] ラベル4を根とした一経路 (図の影付きの枝) の作成例

EMPTYならPLUSかMINUSかの適合する方に) 変更しておく。図5は、ステップ2.(a)の途中段階を示している。ラベルが $level = \text{矢印の総数} - 1$ で、 $\text{allowed\_arrows}(level, 1) = 0$ となる時は、すべての矢印を使い尽くし、1つの順位付きグラフを得る。そうでないときは、レベル $level$ を1下げ、ポイント $p(level)$ を1増やし $\text{allowed\_arrows}(level, p(level))$ の番号をもつ矢印について条件2の確認をするようなバックトラッキングを実施していく。

ステップ2.(b)では、第0行の第2要素以降に登録されている矢印を根として、上と同様な手順を実行していけば、取り得るすべての順位付きグラフを数え上げることができる。一例として、図2(d)の最右端の経路に対する実行状態を図6に示す。

このアルゴリズムを実施した後は、与えられたシャドウグラフの重複度も考慮した所望の「縦の重み」をすべての木の葉の総数(図2においては木(a)から木(e)における影付き経路の葉の総数)として得ることができる。

## 7 分配関数の級数展開

さて、Betts<sup>4, 5</sup>によれば、分配関数を評価するには、必要なシャドウグラフに対する縦の重みが得られた後、以下の手続きが必要となる。一般に、一つの裸グラフに、いくつかのシャドウグラフが対応する。複数のシャドウグラフにおいて、それらの頂点のラベル付けのみが異なるものを、等価なシャドウグラフという。与えられたシャドウグラフに等価なシャドウグラフの数 $h(g')$ を、グラフ $g'$ の横の重み(horizontal weight)という。基礎となる裸グラフ $g$ の対称数を $s(g)$ で示し、シャドウグラフの対称数を $s(g')$ で示すとき、グラフ $g'$ の横の重みは、

$$h(g') = \epsilon(g')s(g)/s(g')$$

で与えられる。ただし、 $g'$ がすべての矢印の向きを反転しても不変であるとき $\epsilon(g') = 1$ 、その他は $\epsilon(g') = 2$ である。

最後に、非等価なシャドウグラフの組に対して、対応する裸グラフ $g$ の弱い格子定数を知る必要がある。N個のサイトの格子Lに埋め込まれたグラフ $g$ の弱い格子定数 $(g; L)$ は、多項式 $\mathcal{N}(g; L)$ でのNの係数である。ただし、 $\mathcal{N}(g; L)$ はLでの $g$ の弱い埋め込みの数である。<sup>10-15</sup>

零場分配関数は、以下のように級数展開できる。

$$Z_N^1(T) = \sum_{\ell=0}^{N_0} \frac{K^\ell}{\ell!} \sum_{s=2}^{\ell} 2^{N-s} \sum_i \mathcal{N}(g_{si}, L) \sum_j h(g_{si}^{(j)}) v(g_{s\ell}^{(j)})$$

ただし、 $g_{si}$ はs個の頂点を持つi番目の裸グラフであり、 $g_{si}^{(j)}$ は $g_{si}$ に対応する非等価なj番目のシャドウグラフである。第一Mayer定理<sup>10</sup>の格子バージョンを用いれば、

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{N} \ln Z_N^1 \right) = \ln 2 + \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{K^\ell}{\ell!} \sum_{s=2}^{\ell} 2^{-s} \sum_i (g_{si}, L) \sum_j h(g_{si}^{(j)}) v(g_{s\ell}^{(j)})$$

となる。

零場分配関数に対する級数から、エントロピー、内部エネルギーおよび比熱などの熱力学的



諸量に対する高温展開級数を得ることができる。

## 8 おわりに

量子スピン系のための高温展開法は初項から10数項までのキュムラント展開係数を厳密に求めて熱力学的諸量を評価することができ、高温領域において信頼できる結果がえられる。低温領域における熱力学的諸量を評価するためには、パデ近似による外挿値が用いられる。

著者達<sup>16</sup>は低温領域においても量子スピン系の熱力学的諸量を評価できるモンテカルロ法を提案し、一次元および二次元スピン1/2ハイゼンベルク強磁性体に適用し、一次元系では低温領域で信頼できるスピン波理論に基づくTakahashi<sup>17</sup>の結果とよい一致を得た。更に、著者達の方法をスピン1/2量子XY模型に適用するためにBetts<sup>4, 5</sup>の方法に基づき改良し、1次元系において適用した。この方法の開発中に、本稿で述べた縦の重みを厳密に求めるアルゴリズムを提案した。ここに、そのアルゴリズムとインプリメンテーションを述べた。

## 参考文献

- [ 1 ] W.Opechowski, *Physica* **4** (1937) . 181.
- [ 2 ] G.S. Rushbrooke and P.J. Wood, *Proc. Phys. Soc., Lond. A* **68** (1955) ,1161.
- [ 3 ] C. Domb and M.F. Sykes *Proc. Phys.Soc.,Lond.B*, **69** (1956) ,486.
- [ 4 ] D.D. Betts, C.J. Elliott and M.H. Lee, *Can.J.Phys.* **48** (1970) ,1566.
- [ 5 ] D.D. Betts, *Phase Trasition and Critical Phenomena*  
ed. Domb and Green (Academic Press, London, 1974) ,vol.3 pp.569-652.
- [ 6 ] R. Sedgewick, *Algorithms* (Addison-Wesley, Reading, Mass.,1988) .  
野下浩平他共訳 “アルゴリズム 第1巻,第2巻,第3巻” (近代科学社) .
- [ 7 ] R.E. Tarjan, *Data Structures and Network Algorithms* (SIAM,1983)) .  
岩崎和生訳 “データ構造とネットワークアルゴリズム” (マグロウヒル,1989) .
- [ 8 ] A.V.Aho,J.E.Hopcroft and J.D.Ullman, *Data Structure and Algorithms* (Addison-Wesley,Reading Mass,1983) .大野義男訳 “データ構造とアルゴリズム” (培風館,1987) .
- [ 9 ] A.V.Aho,J.E.Hopcroft and J.D.Ullman, *The Design and Analysis of Computer Algorithms* (Addison-Wesley,Reading Mass.,1974) .  
野崎昭弘,野下浩平訳 “アルゴリズムの設計と解析I,II” (サイエンス社,1977) .
- [10] C.Domb, *Phase Transition and Critical Phenomena*  
ed.Domb and Green (Academic Press,London,1974) ,vol.3 pp.1-95.
- [11] C.Domb, *Advance in Physics* **9** (1960) ,149.
- [12] J.L.Martin, *Proc. Cambridge Phil.Soc.* **92** (1962) ,92.
- [13] J.L. Martin, *Phase Transition and Critical Phenomena*  
ed.Domb and Green (Academic Press,London,1974) ,vol.3 pp.97-112.
- [14] J.L.Martin, *J.Stat.Phys.* **58** (1990) ,749.
- [15] D.C.Rapaport, *Computer Physics Reports* **5** (1987) 265-350.
- [16] S.Kadowaki and A.Ueda, *Prog.Theor.Phys.* **75** (1986) 451, **78** (1987) 224, **82** (1989) 493.
- [17] M.Takahashi, *Prog.Theor.Phys.Suppl.* **87** (1986) 233.

# An Exact Computation of Vertical Weights in Quantum Spin Systems

Shinji KADOWAKI

*College of Science and Industrial Technology*

*Kurashiki University of Science and the Arts,*

*2640 Nishinoura, Tsurajima-cho, Kurashiki-shi, Okayama 712-8505, Japan*

(Received September 30, 2002)

The high temperature series expansion of the partition function of the nearest neighbor spin  $1/2$  XY model in zero field was carried out by Betts et al<sup>4,5</sup>. Vertical weights and horizontal weights were introduced in the series expansion by them. In the present paper I propose an algorithm and its implementation of exact computation of vertical weights. This useful procedure is based on a depth-first search. The resulting exact values were used in our previous paper partially.