

# DMRG 学習にお勧めの文献

神戸大学 西野友年<sup>1</sup>

(1997年12月24日受理)

「密度行列繰り込み群 (DMRG) [1] を学び、これを使いこなして研究を進めようと思っ立った方々にお勧めの文献は何ですか? 」と聞かれると、しばらく返答につまります。何よりもまず White による本論文 [2] をお勧めしたいのですが、これは解説記事ではないので、[3] 読みこなす為には多少の“数値計算の心得”が必要だからです。そういう訳で DMRG 学習の副読本を探してみました。これから、幾つか文献を挙げて行きますが、とりわけお勧めなのが最初に挙げる成島毅氏の修士論文です。[4] 和文の丁寧な解説としては、今の所これに替わり得る物はありません。幸いなことに、成島氏の論文はこの記事の直後に全文掲載されていますので、ぜひ御覧になって下さい。

## 1 成島氏の修士論文

日本で最初に DMRG を導入したのは、著者の知り得る限りでは交替ボンドスピン鎖を扱った加藤氏・田中氏、[5] です。これに続いて梯子型スピン系に対して成島氏 [6] および飛田氏 [7] が DMRG を用いた研究を行いました。成島氏が筑波大学で 1994 年に行なった研究は、修士論文として公表されました。[4] この論文は以下に挙げるように DMRG 学習の副読本としても利用できます。

- (a) 幾つかの White の論文を整理統合して、ひとつの Review にまとめてある。また、計算物理の初心者が White の論文を読めば“引っ掛かるであろう”箇所について、成島氏自身の言葉で補足説明されている。[8]
- (b) DMRG による計算プログラムを作成する際に、“計算機上に変数として持つべき量”の作り方を丁寧に解説してある。例えば「Block の端の Spin と、系の中央にある生の Spin の間の相互作用行列要素の作り方」などは、White の論文では説明が省略されている。
- (c) DMRG により得られた数値データから、システムサイズ無限大の極限 (熱力学極限) を取る方法、また俗に“m-外挿”と呼ばれる近似精度の検証方法について、研究事例を交えながら具体的に説明している。[9]
- (d) 研究の対象として、いち早く梯子型スピン系に注目し、研究の背景・研究の結果得られた成果について明解に論じてある。
- (e) 和文であるので、研究室配属直後の — まだ英文に不馴れな — 学生・院生にとって「読み始めるのに必要な心理的障壁が低い」。もちろん、母国語で読める点は (英語

<sup>1</sup> e-mail: nishino@phys560.phys.kobe-u.ac.jp, HomePage: <http://quattro.phys.kobe-u.ac.jp>

西野 友年

の苦手な) 研究者にとっても有り難い。

そういう訳で、これから研究室の論文講読の時間などに White の論文を読んで DMRG を勉強しようと思う方は、副読本として成島氏の修士論文を手元に置いて下さい。

## 2 第六回西宮湯川記念シンポジウムの記録

DMRG が世に出た背景を知り得る本を一つ紹介します。1991 年 10 月 21-23 日に、新大阪で CPCMP [10] という数値計算のワークショップがあり、引き続き 24-25 の両日、夙川 (西宮市) で第六回西宮湯川記念シンポジウムが催されました。両方の会議の公演のプロシーディングが Springer から出版されていて、[11] DMRG 出現直前の計算物理の世界を垣間見ることができます。<sup>2</sup>

この機会に White も来日して、多電子系の波動関数を近似的に取り扱う方法について講演しました。[12] White による公演録 (Proceedings の Part II, p97-p104 参照) には、密度行列を用いるに至った発想が述べられています — 波動関数の近似にあたって、行列の特異値分解を用いた点が斬新で、この時点で既に DMRG の原型が出来上がっていたようです。

この本には DMRG に影響を与えた数値計算の諸技法についての報告も掲載されています。例えば Hubbard 模型 [13] などの解析に用いられている BSS 形式の量子モンテカルロ法。(QMC) White も QMC に深く手を染めているのですが、[14] これは偶然ではありません。BSS 形式の QMC は幾つかの点で DMRG に影響しているのです。(Proceedings の Part II, p.53 辺りから後を参照)

- (a) QMC は計算を安定化する為に特異値分解 (及び簡易版の QR 分解) と呼ばれる行列演算を用います。これは DMRG で用いられる最も重要な行列演算の一つです。
- (b) QMC は、グリーン関数を “行列の積” として表し、個々の行列を虚時間 (~ Time Slice) 毎に更新して行きます。これは、DMRG が波動関数をテンソル積として表し、場所毎に改良して行く手続きに通じます。[15]
- (c) QMC では、計算量を減らす為に、計算の中間生成物をメモリーに格納しておいて、必要な時に取り出します。DMRG も同じように — 本当に同じように — 計算の中間生成物を格納します。

こういった類似点から BSS 型 QMC は DMRG の母体の一つと見ることができます。QMC 専門家にとって、DMRG への参入は容易だと思います。

一方、DMRG の計算手続きの一環として使用されている Lanczos 法という (大規模疎行列) 対角化法も「DMRG でうまく利用できるように」進化していました。(Part III, p.153 辺りから後を参照) それはハイゼンベルグ・スピン系など ( $S_z$  又は粒子数の) 保存則を持つ系を対角化する場合に、全系を左半分と右半分に区分して考えるプログラム技法で「副空間コーディング法」と呼ばれました。[16] 更に、左右のブロックの内部演算子をメモリーに格納して計算速度を向上する方法も考案されていました。(Part III, p.179 [17])

<sup>2</sup> この本は、副読本と言うよりは “孫引きの手がかり本” です。

このように系を左右に区切って扱う数値表現形式は、ほんの少しだけ変更すれば DMRG にそのまま応用できるのです。Lanczos 法の専門家が競って DMRG に参入した理由が、ここにあります。

### 3 Lanczos 対角化を学ぶ本

DMRG による数値計算では、行列の線形変換と対角化を多用します。特に Lanczos 法は必修の行列対角化技法です。(そして、実はとても簡単な計算方法です。) そういうわけで Lanczos 法を学べる本を幾つか紹介します。

- (a) 「マトリクスの数値計算」(戸川隼人著・オーム社): 手軽に読めて、充分実用的な行列演算座右の書として、おすすめします。3 章を読めば充分ですが、時間のある方は全体を読んで下さい。[18]
- (b) 「数値解析とその応用」(名取亮著・コロナ社) 浮動小数点演算 (= コンピューターの実数演算) では  $\min(a, b) \leq (a + b)/2 \leq \max(a, b)$  が一般には成立しないという衝撃的な記述に始まる本で、数値計算の誤差を減らす秘伝が随所に見られます。4 章に Lanczos 法を含む行列対角化のまとめがあります。
- (c) 「行列の固有値」(F. シャトラン著・Springer 東京) これは行列の固有値の理論本です。買って置いて、時間がある時に勉強すると良いでしょう。速効性はないですが、「なぜ Lanczos 法の収束が異様に速いのか?」 [19] といった疑問は晴れることでしょう。
- (d) 「TITPACK Ver.2 解説書」(西森秀稔著) これはプログラム・パッケージの使用説明書なのですが、Lanczos 法による対角化の「実用上必要な部分」について充分詳しい記述があります。[20]

DMRG に使う目的で Lanczos 法を学習するならば、Lanczos 法がレイリー商を最小化する変分法である点に注目して下さい。DMRG もレイリー商を一般化した形式の変分法から出発しますので。

### 4 El Escorial サマースクールの記録

この本には、1996 年 8 月にスペインで開催されたサマースクール 'Strongly Correlated Magnetic and Superconducting Systems' において White が行った講義ノートが収録されています。英文で書かれた解説記事の中では (今の所) 最も読み易く、DMRG に至る発想から始まって、1996 年の時点の成果 — 2 次元 t-J 模型のキャリア間相互作用の計測 — まで幅広く知ることができます。余談ながら、この本には G. Sierra と M. A. Martin-Delgado による、DMRG を射影変換から見直した (そして幾つか新しい提案を行った) 記事や、A. W. Sandvik によるモンテカルロ法のレビューなどが含まれています。[22]

## 5 おわりに

以上いくつか文献を挙げて来ましたが、まずは“一押し”の成島氏の修士論文を読んでみて下さい。(皆様さあページをめくりましょう!!)

## 参考文献

- [1] S. R. White: Phys. Rev. Lett. 69 (1992) 2863.
- [2] S. R. White: Phys. Rev. B48 (1993) 10345.
- [3] “Physical Review” という名前なのに Review Article は掲載されない。
- [4] 成島毅: 修士論文 (筑波大学 1995 年度)。
- [5] Y. Kato and A. Tanaka: J. Phys. Soc. Jpn **63** (1994) 1277.
- [6] T. Narushima, T. Nakamura and S. Takada: J. Phys. Soc. Jpn **64** (1995) 4322.
- [7] K. Hida: J. Phys. Soc. Jpn **64** (1995) 4896.
- [8] 論文に「容易に次の関係が示せる」という表現があれば「これは難しい計算だから理解できないかもネ」という事を意味する場合もある。
- [9] モンテカルロ計算を行っている人々は、一般に外挿手続きに明るい。成島氏に外挿の重要性を説いたモンテカルロ・スペシャリストが居たと伝え聞きました。
- [10] Computational Physics for Condensed-Matter Phenomena の略称。数値計算メーリングリスト `cpcomp` (`cpcomp@issp.u-tokyo.ac.jp`) の名前は、これに由来します。
- [11] Springer Proceedings in Physics 70: Computational Approaches in Condensed-Matter Physics (eds. S. Miyashita, M. Imada, H. Takayama, Springer 1991.) 入手先は.... 図書館に無かったら、`cpcomp` メーリングリスト参加者に聞くのが早道でしょう。
- [12] この時点では White の発案はあまり注目されていませんでした。本質的に新しいものを人々が受け入れるまでには、時間がかかるものです。(自戒を込めて)
- [13] 猫も杓子も Hubbard Model に RVB で Hight-Tc な時期でしたので、2次元 Hubbard を取り扱える BSS 形式の QMC は非常に注目されていたのです。
- [14] S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, E. Y. Loh, J. E. Gubernatis and R. T. Scalettar: Phys. Rev. **B40** (1989) 506.
- [15] QMC において温度 Green 関数を更新する方法はとても巧妙で、この計算アルゴリズムには DMRG の演算高速化につながる技術が眠っていると思われます。
- [16] H. Q. Lin: Phys. Rev. **B42** (1990) 6561.
- [17] この方法は、鏑木・利根川両氏によって refine され、対角化プログラムパッケージ ‘Kobe Pack’ として公開されました。
- [18] この本には、珍しく磁気テープを使用する計算方法が収録されています。磁気テープ自体は過去の物となったのですが、磁気テープを使う技法は、スパコンのベクトル化技術や、ワークステーションのキャッシュ・メモリ使用技術として受け継がれていますので、読んでいて興味深いものがあります。
- [19] 「なぜ Lanczos 法の収束は異様に遅いのか? 」という場合もあります。

- [20] 詳しくは作成者の Home Page <http://www.stat.phys.titech.ac.jp/hp/nishi/titpack2/index.html> を御覧下さい。
- [21] Springer Lecture Note in Physics 478: Strongly Correlated Magnetic and Superconducting Systems (eds. G. Sierra and M. A. Martin-Delgado, Springer 1997.)
- [22] 著者の古典系 DMRG に関する解説記事も、少しだけ掲載されています。