

超並列密度行列繰りこみ群法の開発と 量子物性物理学への応用

Super-Parallelized Density-Matrix Renormalization-Group Method: Development and Application to Condensed Matter Physics

(独)日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター、CREST(JST)
奥村 雅彦、五十嵐 亮、山田 進、町田 昌彦

20世紀の急速な産業発展は様々な構造・機能材料の開発及び改良により成し遂げられ、固体物理学はその先導役として極めて重要な役割を果たしてきた。固体物理学の研究対象は、主に電子の固体中の振る舞いであり、電子間の相関効果が支配的にならない限り、第一原理計算手法（固体物理学の一大成果）は効果的に機能し、材料開発の指針を与えてくれる。しかし、20世紀後半に発見された銅酸化物高温超伝導体のように、第一原理計算の解析能力が及ばない新素材に対しては、電子相関効果の正確な計算が求められ、現在、その理解と応用こそが次の産業発展の原動力となると期待されている。実際、これまでに、電子相関の精密な評価手法が幾つか提案され、対応する数値シミュレーション技法が開発されている。しかし、未だ、新材料開発に役立つほど強力な計算手法は存在せず、その開発は急務である。本稿では、提案された様々な手法の中、近年急速に発達しつつある密度行列繰りこみ群法について紹介し、その研究の現状について述べる。現在、密度行列繰りこみ群法は、一次元においては、その強相関効果をほぼ正確に計算することが可能であり、2次元（高次元）への拡張が大きな期待の下、注目を集めている。特に、著者らは密度行列繰りこみ群法の2次元への拡張法の一つである、スーパーコンピュータを用いた並列密度行列繰りこみ群法を独自に開発し、様々な系への応用を試みている。本稿ではその並列密度行列繰りこみ群法の開発状況とその応用について紹介し、今後の研究開発の展望を示したい。

1. はじめに

20世紀は物理学の世紀と言われたように、近代産業社会は物理学の発展と呼応して長足の進歩を遂げた。特に、固体物理学の進展は、物質・材料という産業の骨格部分の発達に大きく貢献し、21世紀の現在もなお重要な役割を担い続けている。固体物理学の著しい数々の進展の中、20世紀に成し遂げられた理論面の特筆すべき成果の一つとして、第一原理計算の発達を挙げることができる。第一原理計算では、全ての物質・材料の性質は原子・分子とそれらが持つ電子の量子論的状態を明らかにすることで予言可能であるとする立場

に立つ。その上で、電子に対し局所密度近似という大胆な近似を採用し、その煩雑な計算の全てを計算機に任せることによって、多くの物質の電子及び格子構造等を明らかにしてきた。現在では新物質が発見されると、真っ先に第一原理計算が行われ、その大まかな電子構造が明らかにされる。しかし、第一原理計算は、あくまで近似理論に立脚しているため、電子相関効果を十分に取りこむことができず、その結果は現実の物質・材料の物性を正確に捉えている場合もあれば、そうでない場合もある。しかしながら、どちらの結果が得られるにせよ、どれだけ第一原理計算が有

効であるかを知ることができるため、研究者はその物質・材料に対し、どのような立場から解析を行うべきかといった指針を得た後、適切な研究の方向性を定めることができる。尚、本稿で述べるのは、本質的に第一原理計算でその物性を捉えることができない物質群に対する新しい理論的研究手段である。

20世紀後半に発見された銅酸化物高温超伝導は、第一原理計算では理解することのできない物質の代表例である。こうした物質は、決して少数派ではなく、極めて興味深く有用な物性を示す場合が多い。こうして、第一原理計算の射程外にある物質・材料の物性を理解し、応用する事こそが、これからの産業社会の発展を加速させる物質・材料開発に繋がると期待されている。つまり、第一原理計算にて用いた近似で取り入れる事のできなかつた電子相関をまじめに取り扱い、電子相関に起因する新物理現象を明らかにし、その知見を基に新しい物質・材料設計を進めることができないかという期待である。現在、そのような研究スタイルは固体物理学における一つの大きなトレンドとなっているが、電子相関の解析の難しさ故、未だ物質・材料開発に直接、反映可能な、第一原理計算に対応する完成度の高い計算手法は得られていない。特に、工学的材料開発のレベルに到達するためには、電子相関を正確に評価し、且つ汎用性の高い数値シミュレーション技法が必要であるが、様々な困難のために未だに有効な技法は得られていない。

本稿では、電子相関をまじめに取り扱い、その新しい物理を理解し、物質・材料の新機能を予言する手段として、一つの有力な数値計算手法である密度行列繰りこみ群 (Density-Matrix Renormalization-Group method; DMRG) 法を紹介し、著者たちのグループの研究開発の現状と世界の他の研究開発との比較、そして、今後、次世代計算機を見据えた研究開発の方向性 (期待できる成果) につい

て議論する。

2. 電子相関とは

固体の物質・材料における電子相関を評価する際、単純化した格子模型を仮定し考察することが多い。格子模型とは、固体中の電子が整然と結晶格子を組んでいるその原子の間を飛び移るといった性質のみを取り出した単純化した模型である (図1)。この模型において、電子は原子と原子の間を自由に飛び移る一方、同じ原子に同時に2つの電子が飛び込む場合がある。その際、電子間にはクーロン斥力が働くため、(簡単に言うと) 電子同士の衝突が起こる。しかし、衝突を起こすとエネルギーが上がってしまうため、電子はうまく衝突を回避するように運動しなければならない。その結果として、電子の集団は、その配置や運動を最適化するように個々の電子が協力して振舞うようになる。これが、クーロン斥力による電子相関である。クーロン斥力は電子間に働く普遍的な相互作用であり、どんな物質でもその斥力により電子相関が存在することが分かる。しかし、物質により、原子の種類やその配置は異なるため、電子同士の実効的斥力の強さが異なり、物質ごとに電子相関の強さが変わる。

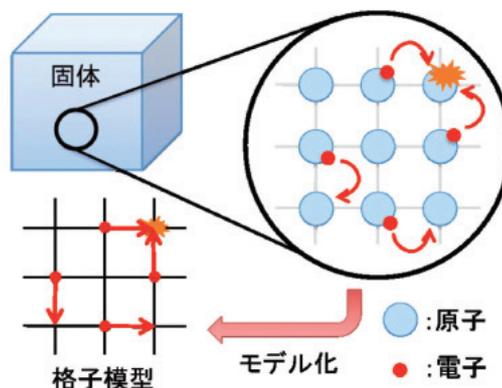


図1 固体中の原子・電子の振る舞いと格子模型。固体中の原子は結晶格子を組んでおり、電子は原子間を飛び移っている。その電子の動きだけを取り出したものが格子模型である。

例えば、物質によっては、斥力は弱く、電子相関の効果が無視できる場合もあり、個々の自由な電子の振る舞いをみれば固体全体の電氣的性質が分かる場合がある。この場合は、第一原理計算は正確にその性質を再現及び予測することが可能となる。しかし、強い斥力が働く物質では、電子相関は強まり、個々の自由な電子集団の振る舞いから固体全体の電氣的性質を知る事は不可能となってしまう。このような系は「強相関電子系」と呼ばれ、その性質を理解する事が物性物理学におけるフロンティアの一つとなっている[1,2]。

強相関電子系の最も劇的な例の一つは、電子間の強い衝突を避けようとする効果によって、結果的に電子のペアが手を取り合い、電気抵抗なしに移動する高温超伝導現象であろう。これは銅酸化物高温超伝導体において実現している超伝導現象であると考えられている。しかし、なぜ電子同士は衝突を避けようとするかと手を取り合うようになるのか？この問いは、銅酸化物高温超伝導の発現機構は何かという問いであり、銅酸化物を超える転移温度の超伝導体は可能かという問いも含んでいる。しかし、この問題は、物理学における最も難しい未解決問題の一つであり、世界中の物理学者が現在、その解明を目指している。

電子相関を理論的に研究する格子模型には、幾つかバリエーションがあり、各々、固体中の電子の本質をうまく抜き出した模型であると考えられている。代表的なものは、固体中の電子の基本模型であるハバード模型、高温超伝導体である銅酸化物の特徴を抜き出した t - J 模型、局在した電子が持つ磁性に焦点を当てたハイゼンベルグ模型などがある[1]。尚、高温超伝導が起こっているのは銅酸化物超伝導体の2次元シート構造であることから、2次元ハバード模型や2次元 t - J 模型の正確な理解が渴望されて

いる。しかし、後にみるように、これら2次元模型を十分な精度で解き、その性質を理解することは極めて困難であり、その計算手法の開発が研究の最前線である。

3. 格子模型の数値シミュレーション

上述のように、高温超伝導をはじめとする奇妙且つ有用な物性は強い電子相関に起因することが分かってきた。では、その理論的な解析はどのように行われているかについて紹介しよう。まず、伝統的な解析的手法として、摂動計算を基礎とした理論計算手法が発達してきた（解析的手段の開発・改良には膨大な研究があり、その概略すら、本稿の範囲で紹介することは不可能である。よって著者らの独断により最新の研究成果[3]のみを紹介するに留めたい）。しかし、近似計算による解析には限界があるため、強相関電子系の正確な理解のためには数値シミュレーションによる解析が必要不可欠である。しかしながら、強相関電子系の数値シミュレーションは容易ではない。その理由は、相互作用を厳密に扱うとすると、全ての出現可能な量子状態を用意し、量子力学の「重ね合わせの原理」により、エネルギーの低い“十分に重ね合わせた量子状態”を求める必要があるからである。しかし、考慮すべき量子状態の数は膨大であり、ハバード模型において20サイト程度（サイト数と同じ程度の電子数を含む）の模型を考えると、その状態の数は数千億を超えてしまう。これが強相関電子系の数値シミュレーションが難しい理由の一つである（計算に必要なメモリは格子点の数と電子数に対して指数関数的に増える）。

強相関電子系における数値シミュレーションは、この膨大な数の量子状態の重ね合わせの原理に従って得られる量子状態を、如何に数値計算アルゴリズムの改善やコンピューターパワーの増強によって乗り越え、必要とする量子状態を得るかに帰着する。実際に用

いられている格子模型の代表的な数値シミュレーション法を見ていこう。

1つ目は、「総厳密対角化法 (Full-Exact Diagonalization method; FED)」である。これは、全ての量子状態を厳密に求める方法で、その系の全ての情報を知りうるができる反面、計算量が膨大になり、とても小さな系にしか適用できない。次に、「厳密対角化法 (Exact Diagonalization method; ED)」を挙げよう。これは、その名の通り、取りうる全ての量子状態を重ね合わせて厳密な電子状態を求めるものであるが、「総厳密対角化法」のように、その系の全ての情報を求めるのではなく、興味のあるエネルギーの低い状態のみを選択して求める方法である。ただし、この方法でも必要な計算機リソースは膨大になるため、大きな系は扱えない。上述のように、これら二つの手法は、数値誤差の精度の範囲内で厳密な答えが分かるというメリットがあるが、数十格子数までの小さな系しか計算できないため、アボガドロ数 (約 10^{23} 個) の原子が集積した強相関電子系の実在の物質の物性の正確な解析・予言は難しいというデメリットがある。3つ目は「量子モンテカルロ法 (Quantum Monte-Carlo method; QMC)」である。この方法はファインマンによる量子力学の定式化である「経路積分量子化法」に基づく数値シミュレーション法である。この方法では、重ね合わせる量子状態に、状態和に寄与する割合が大きい重要な状態とそうでない状態があることに注目し、重要な状態を確率的に多く取り入れる事により物理量を求めていく。この方法を用いると、ある模型では数千格子数に及ぶ大きな系を計算することができるが、高温超伝導の舞台である2次元強相関電子系では「負符号問題」というこの方法固有の原理的問題が生じるため、現状のアルゴリズムでは、研究対象に限られるという弱点がある (超伝導転移が起こるような低温での計算も概して苦手である)。そして、

4つ目が本稿で紹介する「密度行列繰り込み群法 (DMRG)」である。

表1 格子模型の各種シミュレーション手法の特色。格子点の数はおよその数を示した。*)計算可能な模型はアルゴリズムに依存する。

	格子点数	模型の制限	次元の制限	温度
FED	10	なし	なし	任意
ED	20	なし	なし	0 K
QMC	1000	あり*	なし	高温
DMRG	1000	なし	1次元	0 K

4. 密度行列繰り込み群 (DMRG) 法

密度行列繰り込み群 (DMRG) 法は1992年にホワイトによって考案された数値シミュレーション法である[4,5]。この方法の特徴は「量子情報の圧縮」を利用している事にある。これは、厳密対角化法によって得られた量子状態をビットマップイメージに例えたとすると、DMRG法はJPEGイメージに例えられる。日頃、良く目にするJPEGイメージはビットマップイメージに比べて情報量は遥かに少ないにも関わらず、見た目はほぼ変わらない。これは、JPEGが、単純にビットマップイメージのピクセルを間引いて情報量を減らしているのではなく、いくつかのピクセルをまとめ、重要な情報だけを残して粗視化していることに起因する (つまり、情報を圧縮している)。DMRG法では同じように量子情報の圧縮を行い、量子状態の「粗視化」をすることによって、効率の良い計算を可能としている。

DMRG法は、1次元で相互作用が短距離的できさえあれば、量子モンテカルロ法と異なり、模型の種類に制限なく、数千格子サイト

程度の格子模型の基底状態の物理量を10桁の精度で計算可能な手法である。このように、DMRG法は非常に精度が高く、且つ効率的な手法であるため、従来手法では莫大な計算機リソースが必要であった計算も、パソコンを使って計算する事が可能である。また、近年では動的DMRG法という、スペクトル関数や遅延グリーン関数など、強相関電子系の動的性質を反映する物理量の計算を可能にする手法も開発され[6]、更に、強相関電子系の非平衡時間発展を計算することができる時間依存DMRG法という手法も開発されてきた[7,8]。特に、後者の手法は、強相関非平衡状態の数値シミュレーションという殆ど未踏の研究領域を切り開く大事な計算手法の一つと考えられる(表2)。但し、DMRG法は、本来、1次元系の特徴を利用して精度を上げるように考案されたものであり、2次元以上の系に適用するためには何らかの工夫が必要である。それには現在、以下のように二つの流れがある。一つはPEPS[9]やMERA[10]など、量子情報理論の発達を背景としたDMRG法自体の拡張、もう一つは超並列スーパーコンピュータを使った並列化DMRG法[11]である。前者はDMRG法を原理的に高次元へ拡張する手法の開発であり、現在発展中の新しいシミュレーション法であるが、現在のところ適用例が少なく、今後、数値計算の精度や計算量の見積もりなどの様々なチェックを積み重ねていくことが必要とされている。一方、本稿で紹介する並列化DMRG法は、これまで様々な例で検証されてきたDMRG法を超並列計算機の計算パワーで(n -leg系(図2参照)に制限されるが)2次元方向に拡張するものであり、高い信頼性に支えられた数値シミュレーション技法と言える。但し、その並列化には高度な並列化技術が必要である(一見すると並列性が乏しく、それを見出すのが困難だが、後で記すように隠れた並列性がある)。

表2 DMRGの種類と計算可能な物理量

	物理量
DMRG	粒子分布 相関関数
動的DMRG	遅延グリーン関数 スペクトル関数
時間依存DMRG	非平衡状態 (粒子分布・相関関数)

表3 PEPSなどと並列化DMRGの比較

	PEPSなど	並列化DMRG
次元	任意	n -leg系
信頼性	未知数	高い

5. 密度行列繰込み群法 (DMRG) コード開発の現状

ここでは、4. で紹介したDMRG法を用いた研究の現状と、DMRGコード開発の現状について述べる。上述のように、DMRG法は強相関格子模型に対する有力なシミュレーション手法として重要な位置を占めており、実際に多くの研究者が利用し、数々の物理的成果を得ることに成功している。

DMRG法は、1992年の発明以来の総引用回数は1400を超えており、一次元格子模型のシミュレーションの手法としてはスタンダードな座を獲得している。また、DMRG法を利用した論文数の推移を見てみると、1998年から2007年までは年間100報前後で停滞していたが、2008年には150報を超えるなど、最近、利用が拡大しつつある[12]。これは、近年の計算機の計算能力の向上に加えて、後述するように、ソースコードが容易に手に入りやすくなったこと、これまでの計算結果によるDMRG法自体の信頼性の高さが評価されつつあるなどの要因が考えられる。

次に、開発状況であるが、DMRG法は格子模型の違いによらず、ほぼ正確に量子状態が計算できることから、世界中の多くの研究室で、

研究者個人によりコードが開発されてきた。その一方、近年、汎用性や並列化による計算の高速化を求めて、数人～十数人のグループによる開発が盛んになってきている。ソースコードを公開している開発プロジェクトとしては、i) ALPS (<http://alps.comp-phys.org/>) [13,14]、ii) POWDER with Power (<http://qti.sns.it/dmrg/>) [15]、iii) DMRG++ (<http://www.ornl.gov/~gz1/dmrgPlusPlus/>) [16] などがあり、一般の研究者でもDMRGコードを容易に利用することが可能となっている。ここでは、これらのプロジェクトの中、著者の一人（五十嵐）が参加しているALPSプロジェクトについて紹介する。ALPSプロジェクトでは、格子模型のシミュレーションを行う際に必要となるライブラリ群と、それらを利用して作られたアプリケーションの両面から統合的に開発を行っている。公開されているアプリケーションとしては、DMRG法だけでなく、総厳密対角化法、厳密対角化法、量子モンテカルロ法などのソフトウェアがあり、格子模型の数値シミュレーションのための統合パッケージを提供している。このパッケージは現在も拡張が進んでおり、さらに動的平均場理論のソフトウェアも加わる予定である。このALPSプロジェクトのアプリケーション・パッケージはソフトウェアの汎用性と高速性が両立されていることが評価されて世界中で利用が広がっており、ALPSプロジェクトの論文の引用件数は2年で60を超え現在も拡大している [17]。しかし、ALPSプロジェクトのDMRG法のプログラムを含め、公開されているDMRG法のプログラムのほとんどは1次元モデルか梯子型 (2-leg) モデルの解法であり、そのままでは図2のような2次元(n -leg) ハバード模型を高精度で計算することはできない。2次元への拡張は、未だ最先端の研究開発課題なのである。以下では、この2次元への拡張について研究の現状を紹介しよう。

2次元への拡張への第一歩としては、ま

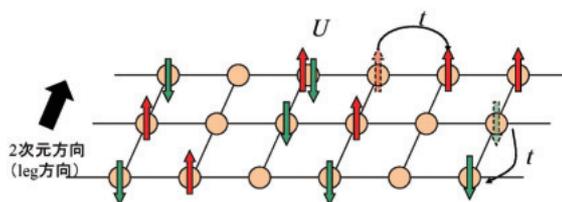


図2 2次元ハバードモデルの模式図。2次元方向の格子数をleg数と呼ぶ（この模式図の例は3-legハバードモデル）。

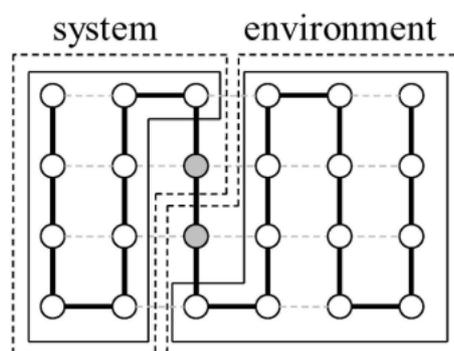


図3 Multi-chain法の模式図。本来2次元のモデルをジグザグの1次元モデルとして扱っている。

ず、1次元DMRGの特徴をそのまま活かして2次元モデルのシミュレーションを実施するmulti-chain法（図3参照）が開発された [5]。

このmultichain法では、モデルを1次元とみなしているため、計算量は1次元モデルを計算する場合とほぼ同じである。しかし、それと引き換えに、原理的にDMRGの枠組みで扱うのが難しい長距離相互作用を考慮する必要が生じてしまう。実際、この手法で行った計算結果については精度に関して問題があることが報告されている [18]。一方、図4のdirectly-extended DMRG (dex-DMRG) 法はモデルを一切変更せず、直接2次元モデル用に拡張したため、新たな次元方向への拡張（図4の縦方向）に伴って、計算量、従ってメモリの使用量が指数関数的に増加するという問題が生ずる。しかし、multi-chain法と異なり、長距離相互作用が働かないため、高精度シミュレーションが期待できる。このよう

な理由から、大規模な計算機資源を有する超並列計算機が利用できる環境であり、効率的な並列化を行うことができるなら、dex-DMRG法を利用することは2次元化の望ましい選択肢の一つと言える。我々は、このdex-DMRG法を効果的に並列化した並列化dex-DMRG法を開発し、DMRGに基づく手法として初めて高精度の擬2次元系 (n -leg系、図2参照)の計算を可能にした[11]。以下ではこの並列化dex-DMRG法について解説する。

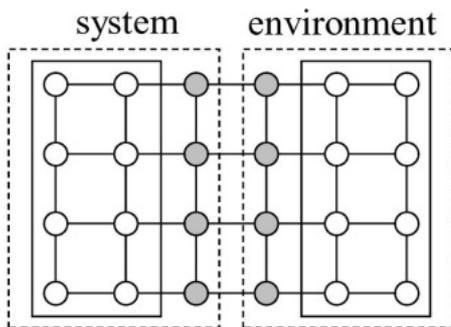


図4 Directly-extended DMRG (dex-DMRG) 法の模式図。従来のDMRG法をそのまま単純に拡張する。

dex-DMRG法を用いて2次元 (n -leg) モデルを計算する際、巨大な疎行列であるハミルトニアン行列の基底状態 (最小固有値を有する固有ベクトル) を反復法で計算する部分の計算量が最も大きく、ハミルトニアン行列とベクトルの掛け算部分が核となる演算であることが分かる (この部分の計算はある意味、量子力学に普遍的な計算であり、モンテカルロ法等のアルゴリズムの転換がなければ避けることができない演算である)。従って、この掛け算の並列化が並列計算性能を左右する。この疎行列とベクトルの掛け算の並列化として最も簡単な方法は、疎行列の行方向への分割である。この方法は、プロセス数が数十程度の並列計算機であれば並列化の効果を得ることができる。しかし、ハミルトニアン行列の非零要素の分布は規則的でないため、

この並列化では各プロセスの計算量、通信量が不均一になってしまう。そのため、100を超えるようなプロセス数では、並列化の効果を得ることが困難となり、新規の並列化手法が必須となる。著者らは、この困難を以下のように打破した。まず、格子模型の物理的 (普遍的) 性質に着目し、対角化すべきハミルトニアン疎行列と状態ベクトルの掛け算を3つの疎行列と密行列の掛け算に分割できることを見出した。そして、その3つの疎行列とベクトル積を各々、二つの密行列の積に変換し、それらの密行列を分割することで演算量と通信量を共にほぼ均一に分割できることに成功した[11,19]。

この新しい並列化の実行性能をみてみよう。東京大学情報基盤センターのHA8000クラスタシステム (T2Kオープンスーパーコンピュータ) を用いて並列計算した際の計算時間とプロセッサ数の関係を図5に示す。

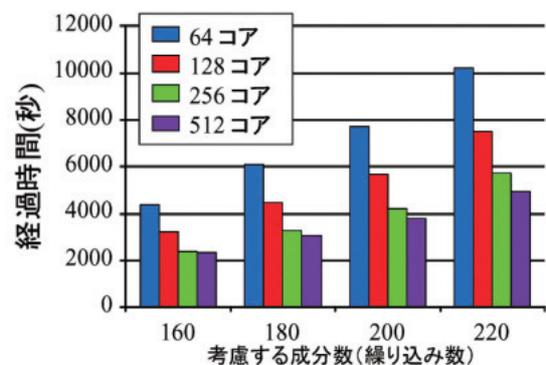


図5 4×10格子のハバードモデル (アップスピン19個、ダウンスピン19個、 $U/t=10$) をHA8000クラスタシステムで並列計算した際の計算時間。

この結果から、上記の並列化手法が100プロセスを超える並列計算機でも有効であることがわかる。しかし、残念ながら、並列数が増加すると並列化の効果は減少していることが見て取れる。実際、512プロセスでは256プロセスよりは高速化しているが、その割合は小さくなっていることがわかる。これは、並

列化によって1プロセスあたりの行列ベクトル積の計算量が減少する一方で、並列化していない部分（並列化できない部分も含む）の計算量が相対的に大きくなってしまった結果である。特に、現在開発中の次世代計算機[20]のような十万個を超えるコア数の並列計算機の性能を有効に利用するためには、現在の並列化率では不十分であると予想される。これは、上記問題を回避するためのさらなる並列化（時にチューニング）が求められており、場合によっては異なる並列化手法が必要になることも考えられる。これらの研究開発は現在進行中である。しかしながら、このような大規模な計算資源を利用できれば、2次元方向の格子数（leg数）が6～7のハバードモデルの正確な計算が可能となり、高温超伝導などの興味深い現象の発現機構の解明に貢献できると考えられる。

6. 並列化直接拡張密度行列繰込み群法（並列化dex-DMRG法）の応用例

最後に、並列化dex-DMRG法を用いた計算結果についていくつか紹介しよう。強相関電子系の数値的研究は1980年代から脈々と続けられているが、最近、固体中の電子を直接調べるのではなく、“光学格子系”という、強相関電子系と同等な人工的に作られた物理系を調べることによって強相関電子系に関する知見を得ようという研究が盛んである。光学格子系とは、レーザーの定在波の谷間に中性原子を閉じ込めた系であり、光学格子中の中性原子は固体中の電子と同様にハバードモデルで記述される事が分かっている（図6）。

そこで、著者らは並列化dex-DMRG法をこ

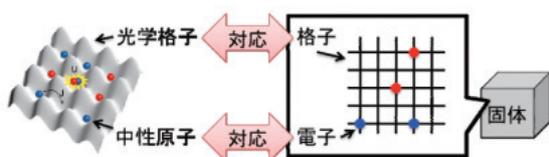


図6 光学格子系と固体系の対応

の光学格子系に適用し、強相関電子系と共通する光学格子系の物性に関して、以下の成果を得た。

- 新しい超伝導状態を示唆するバイ・ホール・ペアを発見[21]
- 光学格子系における特殊な超流動状態（FFLO状態）に関する解析[22]
- 不純物と強い量子相関による新しい絶縁状態の発見[23]
- 光学格子系における磁場中のハイゼンベルグモデルの実現方法の提案[24]
- 非磁性不純物による磁化の局在化現象の発見[25]
- 三角光学格子中の特異な磁化構造の発現条件の発見[26]

これらはいずれも並列化dex-DMRGを使用したため効率良く得られた成果であり、他の計算方法でこれらの結果を得る事は非常に困難または不可能である事を付記しておく。

7. まとめと展望

本稿は、近年急速に発展しつつある強相関電子系におけるDMRG法に焦点を当て、その開発の現状と著者らのグループによる超並列スーパーコンピュータ利用への拡張を中心に報告した。尚、並列化dex-DMRG法は現時点において最も信頼が置ける n -leg強相関電子系の数値シミュレーション技法であり、光学格子系の様々な新現象の予言を通して、高温超伝導などの強相関電子系の特異な物性の一面を捉えることができた。現在、更に次世代計算機に向けてのコード開発を続けており、強相関電子系の更なる進展の新たな一歩をこの精密な計算手法により、踏み出せるのではないかと期待している。また、著者らのグループでは、現在発展中の新手法に関する並列化も検討中である。

尚、本稿で紹介できたのはDMRG法に関す

る発展の歴史と方向性の一部でしかないが、銅酸化物超伝導体に代表される強相関電子系の理解に向けた数値シミュレーションに関する新しい進展について、その可能性を感じ取っていただければ幸いである。

参考文献

- [1] 斯波弘之、「電子相関の物理」(2001年、岩波書店).
- [2] 佐宗哲郎、「強相関電子相関の物理」(2009年、日本評論社).
- [3] Y. Yanase et al., “*Theory of Superconductivity in Strongly Correlated Electron Systems*”, Phys. Rep. **387**, 1 (2003).
- [4] S. R. White, “*Density matrix formulation for quantum renormalization groups*”, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992); “*Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups*”, Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
- [5] U. Schollwoeck, “*The density-matrix renormalization group*”, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005); K.A. Hallberg, “*New trends in density matrix renormalization*”, Adv. Phys. **55**, 477 (2006)
- [6] E. Jeckelmann, “*Dynamical density-matrix renormalization-group method*”, Phys. Rev. B **66**, 045114 (2002).
- [7] A.J. Daley et al., “*Time-dependent density-matrix renormalization-group using adaptive effective Hilbert spaces*”, J. Stat. Mech.: Theor. Exp. P04005 (2004).
- [8] S.R. White and A.E. Feiguin, “*Real-Time Evolution Using the Density Matrix Renormalization Group*”, Phys. Rev. Lett. **93**, 076401 (2004).
- [9] F. Verstraete, J. I. Cirac, “*Renormalization algorithms for Quantum-Many Body Systems in two and higher dimensions*”, arXiv:cond-mat/0407066.
- [10] G. Vidal, “*Entanglement Renormalization*”, Phys. Rev. Lett. **99**, 220405 (2007).
- [11] S. Yamada, M. Okumura, and M. Machida, “*Direct Extension of Density-Matrix Renormalization Group to Two-Dimensional Quantum Lattice Systems: Studies of Parallel Algorithm, Accuracy, and Performance*”, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 094004 (2009).
- [12] Annual number of citations of original paper [Phys. Rev. Lett. **69** 2863 (1992)] from ISI Web of Science
- [13] F. Albuquerque et al. (ALPS collaboration), “*The ALPS project release 1.3: open source software for strongly correlated systems*”, J. Mag. Mag. Mater. **310**, 1187 (2007).
- [14] F. Alet et al. (ALPS collaboration), “*The ALPS project: open source software for strongly correlated systems*”, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. **74**, 30 (2005).
- [15] G. De Chiara, M. Rizzi, D. Rossini, and S. Montangero, “*Density Matrix Renormalization Group for Dummies*”, J. Comput. Theor. Nanosci. **5**, 1277 (2008).
- [16] G. Alvarez, “*The density matrix renormalization group for strongly correlated electron systems: A generic implementation*”, Comp. Phys. Commun. **180**, 1572 (2009).
- [17] Annual number of citations of the paper [J. Mag. Mag. Mater. **310** 1187

- (2007)] from ISI *Web of Science*
- [18] G. Hager, G. Wellein, E. Jackemann, and H. Fehske, “*Stripe formation in dropped Hubbard ladders*”, *Phys. Rev. B* **71**, 075108 (2005).
- [19] S. Yamada, M. Okumura, and M. Machida, “*High Performance Computing for Eigenvalue Solver in Density - Matrix Renormalization Group Method: Parallelization of the Hamiltonian Matrix - Vector Multiplication*”, J. M. L. M. Palma et al. (Eds.), *High Performance Computing for Computational Science - VECPAR 2008, Lecture Notes In Computer Science* **5336**, 39-45 (2008).
- [20] 理化学研究所次世代スーパーコンピュータ開発実施本部、
http://www.nsc.riken.jp/index_j.html.
- [21] M. Machida, M. Okumura, and S. Yamada, “*Stripe formation in fermionic atoms on a two-dimensional optical lattice inside a box trap: Density-matrix renormalization-group studies for the repulsive Hubbard model with open boundary conditions*”, *Phys. Rev. A* **77**, 033619 (2008).
- [22] M. Machida, S. Yamada, M. Okumura, Y. Ohashi, and H. Matsumoto, “*Correlation effects on atom-density profiles of one- and two-dimensional polarized atomic Fermi gases loaded on an optical lattice*”, *Phys. Rev. A* **77**, 053614 (2008).
- [23] M. Okumura, S. Yamada, N. Taniguchi, and M. Machida, “*Hole Localization in Doped One - Dimensional Anderson - Hubbard Model*”, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 016407 (2008).
- [24] M. Machida, M. Okumura, S. Yamada, T. Deguchi, Y. Ohashi, and H. Matsumoto, “*Mott phase in polarized two-component atomic Fermi lattice gas: A playground for $S=1/2$ Heisenberg model in magnetic field*”, *Phys. Rev. B* **78**, 235117 (2008).
- [25] M. Okumura, S. Yamada, N. Taniguchi, and M. Machida, “*Magnetic localization in spin-polarized one-dimensional Anderson - Hubbard model*”, *Physical Review A* **79**, 184417 (2009).
- [26] M. Okumura, S. Yamada, and M. Machida, “*Polarization plateau in atomic Fermi gas loaded on three-leg triangular optical lattice*”, *Phys. Rev. A* **79**, 061602(R) (2009).