



Title	古典2次元模型の分配関数の計算
Author(s)	西野, 友年
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1995, 97, p. 11-12
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/66109
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

--- 古典 2 次元模型の分配関数の計算 ---

東北大学大学院理学研究科物理学専攻
固体統計物理学講座・助手・西野友年
e-mail: nishino@kaws.coge.tohoku.ac.jp

私は、仙台の街外れにある研究室から、東北・大阪両大学に設置されている SX-3 を使用しています。なぜ、遠く離れた阪大の SX も使用しているかというと、(1) 阪大に共同研究者が居るので、阪大で作業をするのが何かと都合が良い (2) 東北大の SX は月曜午前は保守の為に停止しているので、月曜は阪大利用の日にしている (3) 両方使えば、倍の速さでジョブを投入する事が出来る、といった理由があるからです。

いま私が研究しているテーマは、「古典 2 次元模型の分配関数の計算」という統計物理学の問題です。詳しい話は文献 [1] [2] を読んで頂く事にして、問題の数値計算的側面は

$$M(abcde... | a'b'c'd'e'f'g') = W(ab | a'b') W(bc | b'c') W(cd | c'd') \dots$$

という積の形で与えられる大規模行列 M を扱う事です。ここで、 $aa'bb'cc'dd'...$ は、0 又は 1 を取る変数で、左辺に現われる文字列 abcdefg は大規模行列 M の添字 $a + 2*b + 4*c + 8*d + 16*e\dots$ を表わし、 $a'b'c'd'e'f'g'$ は同様に $a' + 2*b' + 4*c' + 8*d' + 16*e\dots$ を表わします。また、 $W(ab | a'b')$ は 4 行 4 列の正值行列 $W(a+2*b, a'+2*b')$ です。そして、与えられた課題は「無限個の文字 abcd\dots (a'b'c'd')\dots がある時に、 M の最大固有値・固有ベクトルを求めよ」という物です。文字の数が 13 個くらいまでなら、ASL/SX のライブラリ を使う事によつて、行列 M を対角化する事が出来ますが、それが限界です。

そこで、まず最初に、「行列の特異値分解」を用いて、与えられた行列 M の重要なスペクトルだけを抽出する事にしました。無限サイズの行列の特異値分解の方法は、統計物理の分野で「密度行列実空間繰り込み群」[3] として知られています。その応用結果は文献 [1] にまとめましたが、行列 M の最大固有値と、その次に大きい固有値が目に見えて違えば、充分正確に M の最大固有値が求まる事がわかりました。図 1 は、この方法をイジングモデルという統計物理の模型に適用して得た結果です。

さて、阪大理学部の奥西氏と共同研究を進めるうちに、 M の特異値分解をより高速に行う方法を発見しました。これは、古風な Power Method --- 行列乗算をともかく繰り返す原始的な行列対角化法 --- を少しだけ変形した方法なのですが、古風な割には高速で、良く知られた「密度行列実空間繰り込み群」の方法よりも 100 倍以上の計算実行速度が達成できました。

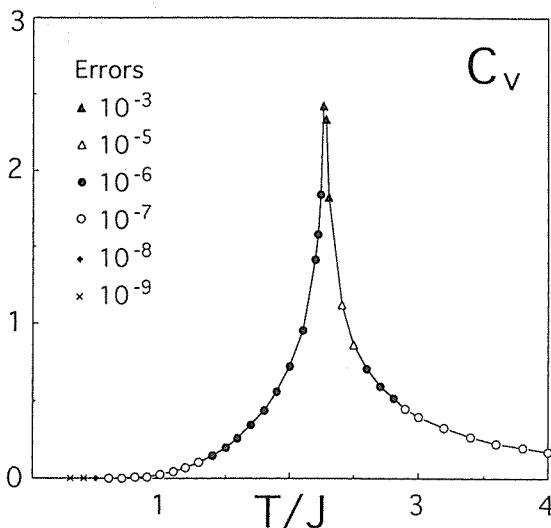


図 1: 数値計算で求めた
イジング模型の比熱。

以上述べた研究に必要な数値計算は、行列の(高速な)乗算と対角化です。阪大の SX-3 は、この要求を満たす最高速の計算機の一つで、迅速に研究を進める為には「地球の裏側からでも」アクセスする価値がある、と言えるでしょう。

最後に、仙台からの使用環境について述べておきます。最近のネットワーク環境の整備により、一日の大半の時間はスムーズに阪大のSXを利用出来る様になりました。しかしながら、まだ時として「旧石器時代」並の超低速交信速度になる事があります。以前は、この様な時には利用を中止していたのですが、最近は慣れてきて、vi エディターを立ち上げては「文字列 /for を検索して、3 行上つて 6 カラム目の文字を置換して...」という作業を、画面の応答を待たずに出来る様になりました。頭の中に、画面のキャッシュを持っているという事なのですが、こういったアホな特技も、そのうち披露できなくなる事でしょう。

阪大理学部の奥西氏と共同で文献 [2] を作成するにあたり、計算機出張利用の便宜を計っていただきました。大型計算機センターの皆様に改めてお礼申し上げます。

参考文献 ([1],[2] については e-mail を下されば、郵送致します。)

- [1] T.Nishino: Density Matrix Renormalization Group Method for 2D Classical Models (Preprint)
- [2] T.Nishino and K.Okunishi: Corner Transfer Matrix Renormalization Group Method (Preprint)
- [3] S.R.White: Density Matrix Algorithm for Quantum Renormalization Group, Phys. Rev. B 48, (1993) 10345.