

# 並列計算による DMRG の大規模シミュレーション手法

## — 2次元モデルに対する動的 DMRG 法の並列化 —

原子力機構 CCSE 山田 進<sup>1</sup>

強相関電子系モデルをシミュレーションする有力な方法の1つに密度行列繰り込み群 (DMRG) 法がある。この DMRG 法は本来 1次元モデル用に開発された方法であり、2次元モデルをシミュレーションするためには適切に拡張する必要がある。代表的な拡張方法として2次元モデルをジグザグの1次元モデルとみなす multi-chain 法 [1] や1次元モデルを直接2次元に拡張する direct extension 法 [2] がある。direct extension 法は直接拡張しているため、1次元モデルのシミュレーション手法を単純に拡張すれば2次元モデルに適用できる利点があるが、計算量やメモリの利用量が増加し、通常の計算機では実行することが困難である。そこで著者らは、DMRG 法の並列性を見出し direct extension 法の並列計算機コードを開発し、実際に2次元 (4-leg) ハバードモデルのシミュレーションに成功している [3]。

さらに著者らは、これまでに開発した2次元モデル用並列 DMRG 法を基に動的2次元 DMRG 法を開発に着手し、実際にハバードモデルの一粒子励起スペクトルの並列シミュレーションに成功した。結果の一例を図1に示す。発表当日は、2次元並列計算のアルゴリズムと問題点、さらに動的 DMRG 開発の今後について報告したい。

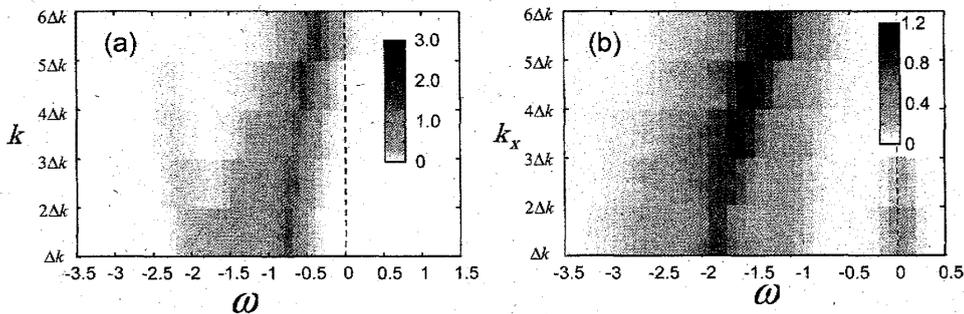


図 1: 1次元 (a) および 2次元 (2-leg) (b) ハバードモデルの  $A(k, \omega)$  の  $k$  依存性。モデルサイズは (a) 20-site アップスピン 6 個, ダウンスピン 6 個, (b)  $2 \times 20$ -site アップスピン 12 個, ダウンスピン 12 個であり, パラメータを  $U/t = 4.9$ ,  $\gamma = 0.1t$  として計算している。また, (a), (b) ともに  $\Delta k = \frac{\pi}{21}$  であり, (b) については 2次元方向の運動量  $k_y$  を  $\frac{1}{3}\pi$  とし, 1次元方向の運動量  $k_x$  を縦軸にしている。

### 参考文献

- [1] U. Schollwöck, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005); K.A. Hallberg, Adv. Phys. **55**, 477 (2006).
- [2] S. Yamada, M. Okumura, and M. Machida, e-print arXiv:cond-mat/070.0159; Proceedings of VECPAR'08, 448 (2008).
- [3] M. Machida, M. Okumura, and S. Yamada, Phys. Rev. A **77**, 033619 (2008).

<sup>1</sup>E-mail: yamada.susumu@jaea.go.jp