

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¹

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.

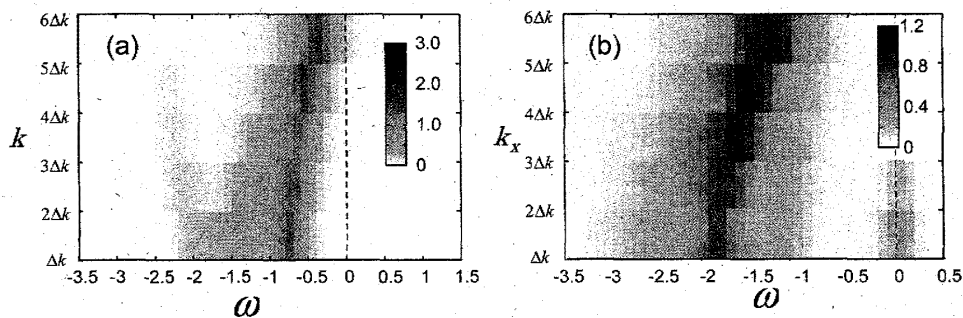


図 1: 1 次元 (a) および 2 次元 (2-leg) (b) ハバードモデルの $A(k, \omega)$ の k 依存性. モデルサイズは (a) 20-site アップスピン 6 個, ダウンスピン 6 個, (b) 2×20 -site アップスピン 12 個, ダウンスピン 12 個であり, パラメータを $U/t = 4.9$, $\gamma = 0.1t$ として計算している. また, (a), (b) ともに $\Delta k = \frac{\pi}{21}$ であり, (b) については 2 次元方向の運動量 k_y を $\frac{1}{3}\pi$ とし,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

¹E-mail: yamada.susumu@jaea.go.jp