



Dynamical DMRG講習会資料

CCMSハンズオン

東京大学柏の葉キャンパス駅前サテライト(2018/11/14)

曾田繁利(理研)
森田克洋(東京理科大学)
遠山貴己(東京理科大学)
松枝宏明(仙台高専)
柚木清司(理研)

- **Dynamical DMRGの利用者拡大**
 - Dynamical DMRG(手法として)とはどういったものか？
 - Dynamical DMRG(DDMRG)の機能の説明。
 - MateriApps LIVE!にインストールされたDDMRGを実際に動かしてみる。
- **Dynamical DMRGに対する開発の要望の受付**
 - こんな計算がしたい、こんな機能が欲しいなどありましたらお気軽に開発者までご連絡ください。
 - Dynamical DMRG開発者：
 - 曾田繁利 (理研) `sotas_at_riken.jp`
 - 遠山貴巳 (東京理科大) `tohyama_at_rs.tsu.ac.jp`
 - 松枝宏明 (仙台高専) `matsueda_at_sendai-nct.ac.jp`
 - 森田克洋 (東京理科大) `katsuhiko.morita_at_rs.tus.ac.jp`
 - 柚木清司 (理研) `yunoki_at_riken.jp` (`_at_`は@に置換)

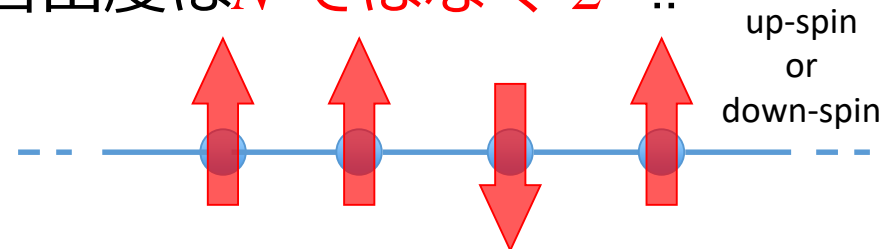
- 13:00 ~ 14:00 Dynamical DMRGの概要 (アルゴリズムの解説)
- 14:00 ~ 14:20 Dynamical DMRGの概要 (プログラムの解説)
- 14:20 ~ 14:30 (休憩)
- 14:30 ~ 14:50 MateriApps LIVE!のインストール
- 14:50 ~ 15:50 実習1 (基底状態計算)
- 15:50 ~ 16:00 (休憩)
- 16:00 ~ 17:00 実習2 (励起ダイナミクスの計算)

Dynamical DMRGの概要 (アルゴリズムの解説)

➤ 量子多体系

N 個のspin-1/2の系: 系の自由度は N ではなく 2^N !!

E.g. $N=100 \rightarrow 2^N \approx 10^{31}$



➤ (時間に依存しない)シュレーディンガー方程式

$$\bar{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

$2^N \times 2^N$ matrix

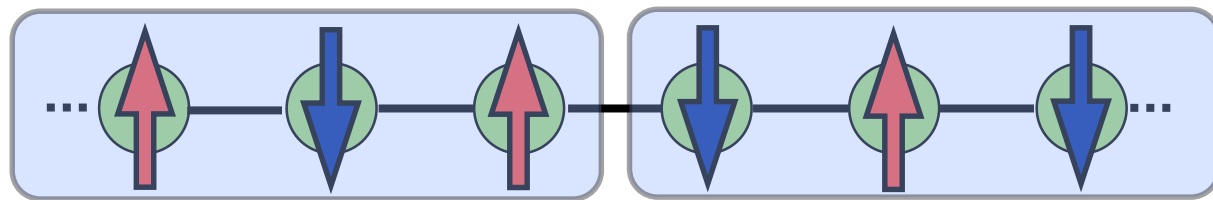
2^N vector

➤ 物理量の計算

$2^N \times 2^N$ matrix

$$\langle Q \rangle = \langle \Psi | \bar{Q} | \Psi \rangle$$

S. White, Phys. Rev. Lett. 69, 2863 (1992)

システム: $\{|i\rangle\}$ 環境: $\{|j\rangle\}$ 

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} \Psi_{ij} |i\rangle |j\rangle$$

$$\approx \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha} |u_{\alpha}\rangle |v_{\alpha}\rangle$$

“最適”基底: $\{|u_{\alpha}\rangle\}$ “最適”基底: $\{|v_{\alpha}\rangle\}$

特異値分解(Schmit分解)

$$\Psi_{ij} = \sum_{\alpha=1}^{D_s} U_{i\alpha} \lambda_{\alpha} (V^{\dagger})_{\alpha j}$$

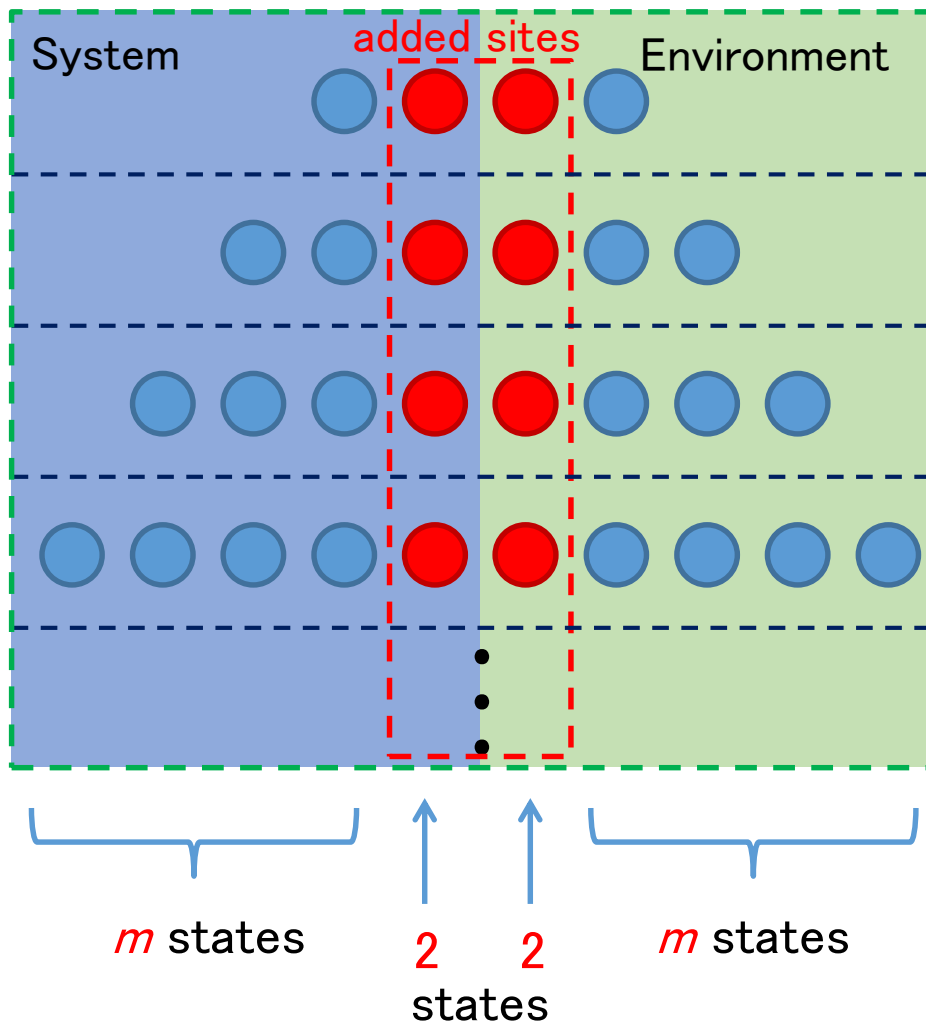
$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{D_s} \lambda_{\alpha} |u_{\alpha}\rangle |v_{\alpha}\rangle \approx \sum_{\alpha=1}^m \lambda_{\alpha} |u_{\alpha}\rangle |v_{\alpha}\rangle$$

m 個の最大特異値 λ_{α}
で近似 ($m \ll D_s$)

・縮約密度行列

$$\rho_s = \text{Tr}_e |\Psi\rangle \langle \Psi| = \sum_{\alpha=1}^{D_s} \lambda_{\alpha}^2 |u_{\alpha}\rangle \langle u_{\alpha}| \approx \sum_{\alpha=1}^m \lambda_{\alpha}^2 |u_{\alpha}\rangle \langle u_{\alpha}| \quad (m \text{ が計算精度を決定})$$

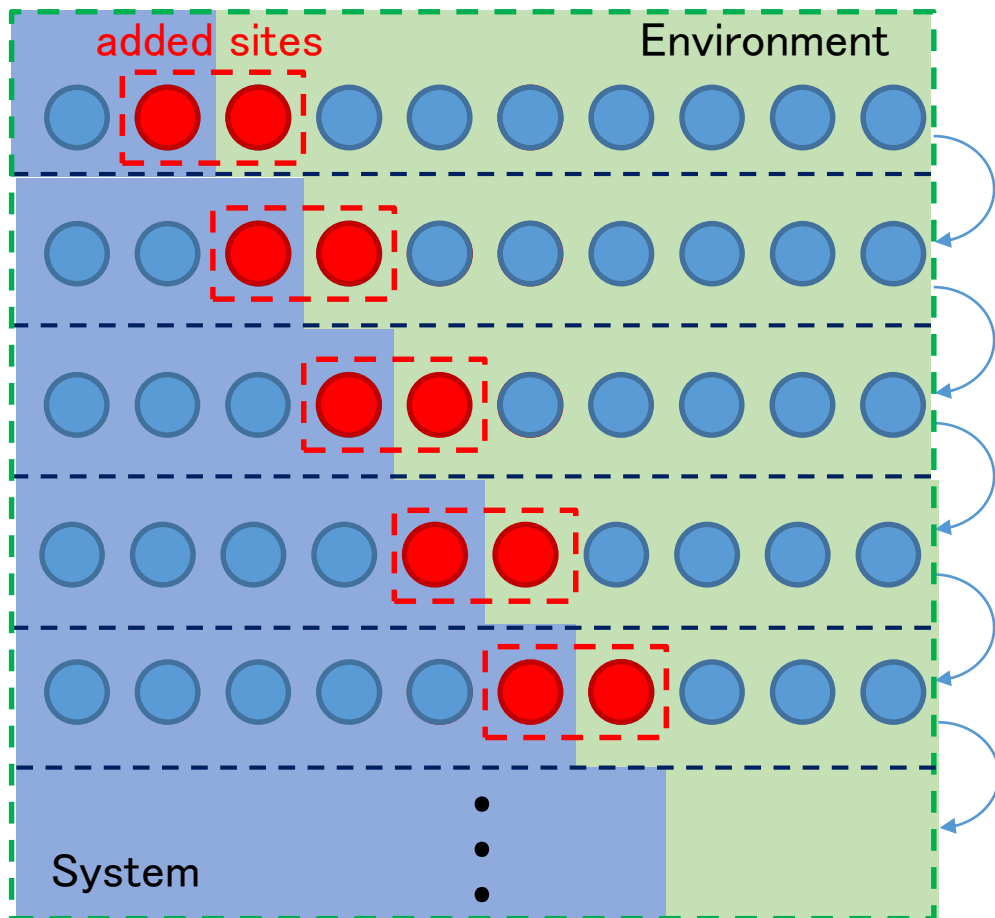
Superblock



- 無限系DMRGの流れ

1. Superblockのターゲット状態(基底状態等)の計算を行う。
2. System, またはenvironmentの自由度について対角和をとった縮約密度行列を作る
3. 縮約密度行列の厳密対角化を行う。
4. 得られた縮約密度行列の固有値の大きなものから m 個の固有ベクトルを基底として系を表現する。
(systemと環境が1サイト分拡張される。)
5. Systemとenvironmentの間にサイトを加え1に戻る。これを目的のサイズまで系が拡張されるまで繰り返す。

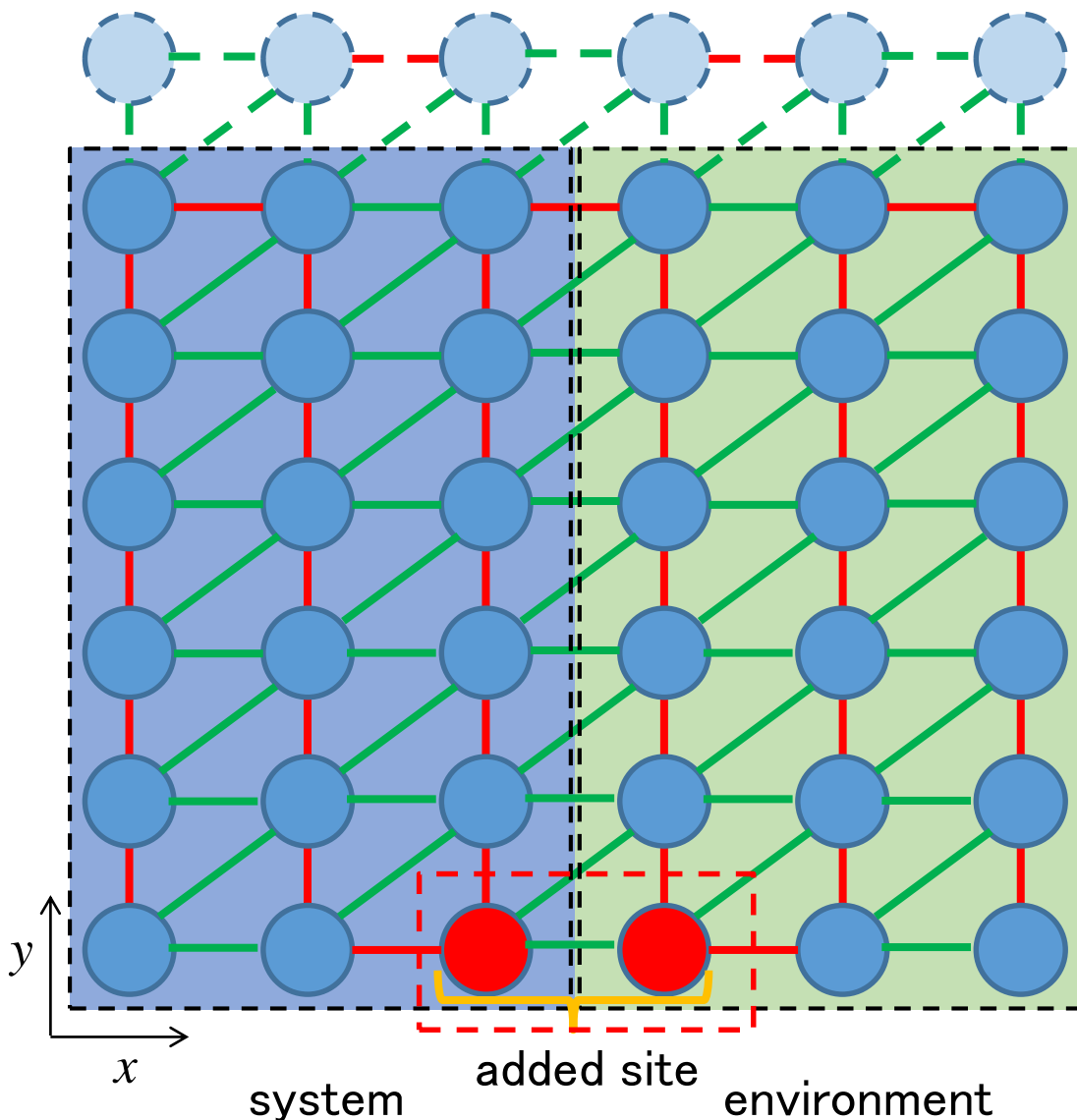
Superblock



- 有限系DMRGの流れ
(無限系DMRGの後に行う)

1. Superblockのターゲット状態(基底状態等)の計算を行う。
2. System, またはenvironmentの自由度について対角和をとった縮約密度行列を作る
3. 縮約密度行列の厳密対角化を行う。
4. 得られた縮約密度行列の固有値の大きなものからm個の固有ベクトルを基底として系を表現する。
(system, またはenvironmentが1つ拡張される。)
5. Superblockを先ほど拡張されたブロックと以前のデータから一つ小さいブロックでサイト数を同じにしてするよう構成し1に戻る。この過程を物理量が収束するまで繰り返す。

DMRG method can be applied to 2D systems



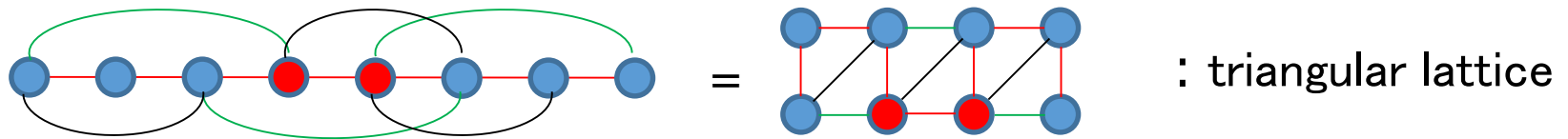
↑ 周期的境界条件

DMRG

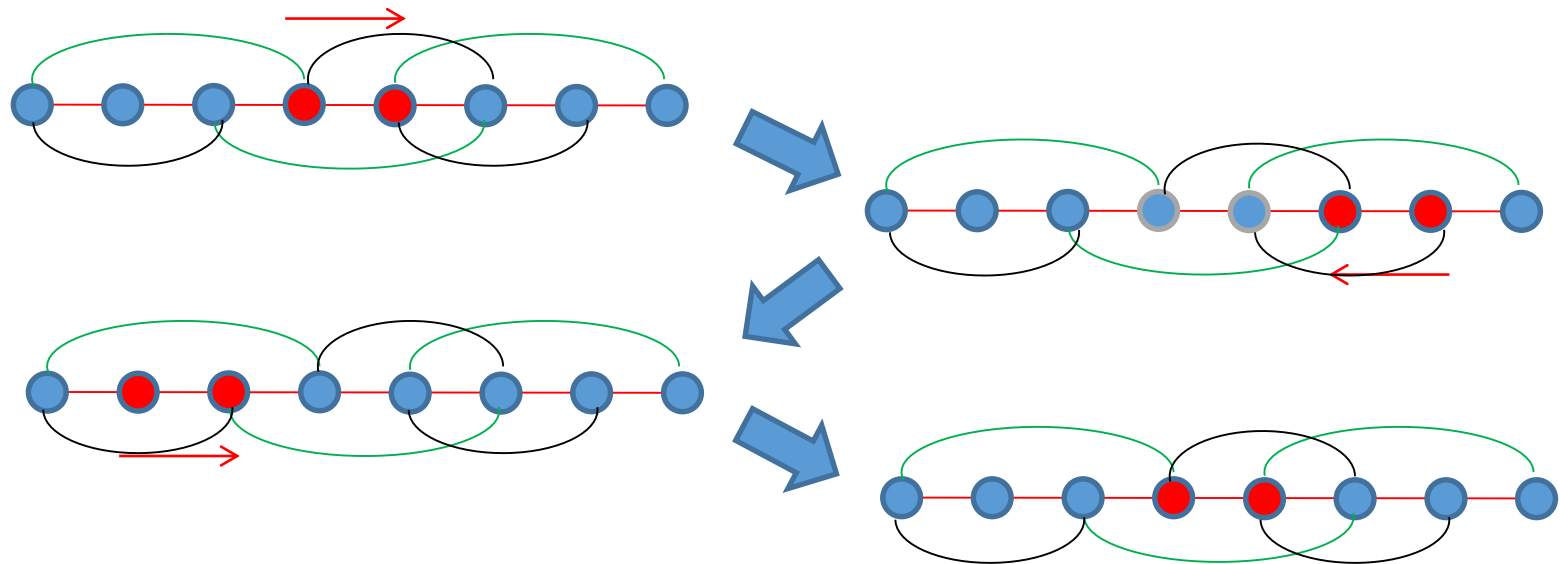
- : 1D system
- : long-range interactions

一次元系のDMRGアルゴリズムに「長距離相互作用」を導入して計算する。

- 有限系DMRGのプロセスで導入される「長距離相互作用」



added sites (described by complete basis set)



ただし、二次元(多次元)系への応用には大きな m が必要。

- 動的相関関数

$$\chi_A(\omega) \equiv \frac{1}{2\pi N} \text{Im} \langle 0 | \hat{A} \frac{1}{\omega - \hat{H} + \varepsilon_0 - i\gamma} \hat{A} | 0 \rangle \quad \hat{A}: \text{arbitrary operator}$$

$|0\rangle$: ground state $\hat{H}|0\rangle = \varepsilon_0|0\rangle$

- ターゲット状態

直交多項式展開法で計算

$$|0\rangle, \hat{A}|0\rangle, \frac{1}{\omega - \hat{H} + \varepsilon_0 - i\gamma} \hat{A}|0\rangle$$

Multi target procedure

それぞれの状態について縮約密度行列を作り
その縮約密度行列を足しあげた行列を対角化

- 特殊関数の完全性

$$\delta(x' - x) = w(x) \sum_{l=0}^{\infty} w_l^{-1} \varphi_l(x') \varphi_l(x) \quad \varphi_l(x) : \text{特殊関数}$$

- グリーン関数の展開

$$G(\omega - i\gamma) \equiv \frac{1}{\omega - \hat{H} - i\gamma} = \sum_{l=0}^{\infty} w_l^{-1} \tilde{\varphi}_l(\omega - i\gamma) \varphi_l(\hat{H})$$

$$\text{展開係数 : } \tilde{\varphi}_l(\omega - i\gamma) \equiv \int_a^b dx \frac{w(x)}{\omega - x - i\gamma} \varphi_l(x)$$

- ルジャンドル多項式の場合の展開係数

$$\tilde{P}_l(\omega \pm i\gamma) = 2Q_l(\omega) \mp i\pi P_l(\omega)$$

$P_l(\omega)$: 第一種ルジャンドル多項式

$Q_l(\omega)$: 第二種ルジャンドル多項式

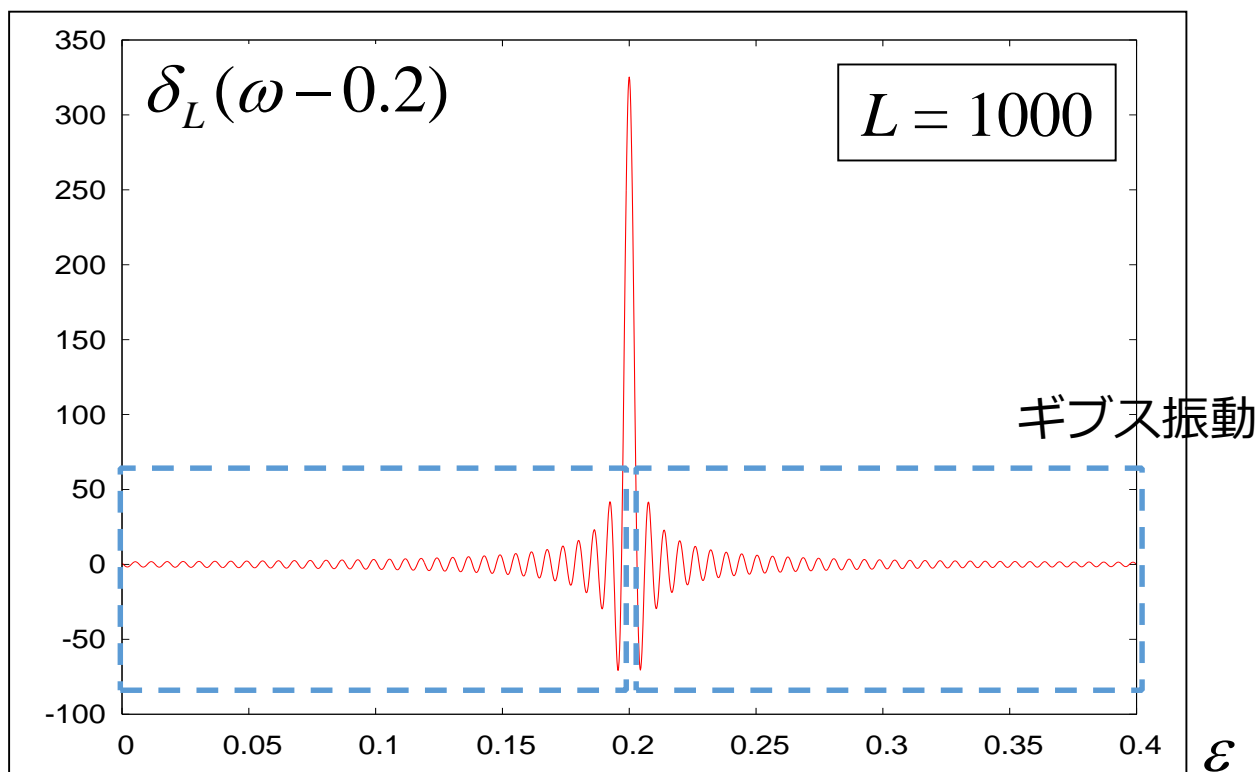
- ルジャンドル多項式による展開

$$G(\omega - i\gamma) = \frac{1}{\omega - \hat{H} - i\gamma} = \sum_{l=0}^{\infty} w_l^{-1} \{2Q_l(\omega) + iP_l(\omega)\} P_l(\hat{H})$$

エネルギー依存性は係数にのみ現れる。

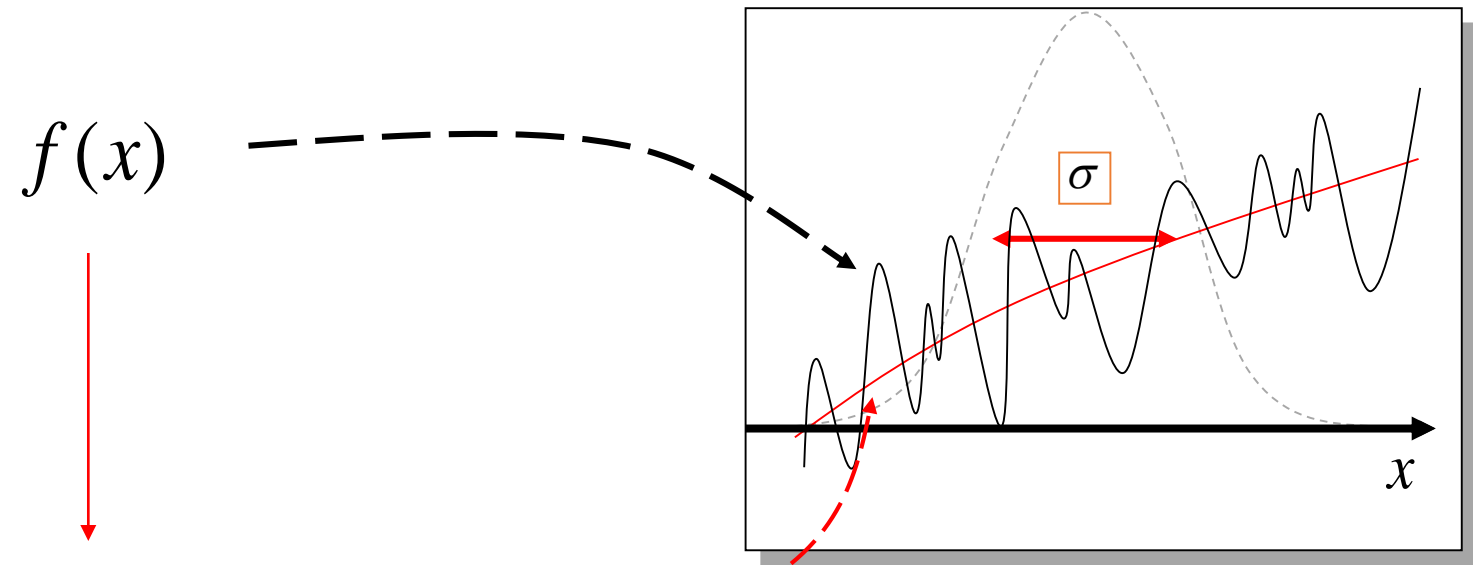
$$D(\omega) = \sum_{\mu} \delta(\omega - \varepsilon_{\mu}) \quad (\text{状態密度, グリーン関数の虚部})$$

$$\delta_L(\omega - \varepsilon_{\mu}) \equiv \sum_{l=0}^L w_l^{-1} P_l(\omega) P_l(\varepsilon_{\mu})$$



Regulated Polynomial Expansion (RPE)

- Regulation \equiv Smearing an oscillating function by Gaussian distribution



Regulated function

$$\langle f(x) \rangle_{\sigma} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(x'-x)^2 / 2\sigma^2} \cdot f(x') dx' \quad (7)$$

$$\hat{G}(z) = \sum_{l=0}^L w_l^{-1} \tilde{P}_l(z) \langle P_l(\hat{H}) \rangle_{\sigma} \quad \langle P_l(\hat{H}) \rangle_{\sigma} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{(x'-\hat{H})^2/2\sigma^2} P_l(x') dx'$$

Coalitional 3-term recursive formula

$$\left\{ \begin{aligned} \langle P_{l+1}(\hat{H}) \rangle_{\sigma} &= \frac{2l+1}{l+1} \hat{H} \langle P_l(\hat{H}) \rangle_{\sigma} - \frac{l}{l-1} \langle P_{l-1}(\hat{H}) \rangle_{\sigma} + \frac{2l+1}{l+1} \sigma^2 \langle P'_l(\hat{H}) \rangle_{\sigma} \\ \langle P'_{l+1}(\hat{H}) \rangle_{\sigma} &= (2l+1) \langle P_l(\hat{H}) \rangle_{\sigma} + \langle P'_{l-1}(\hat{H}) \rangle_{\sigma} \end{aligned} \right.$$

$$\left. \begin{aligned} P_{l+1}(\hat{H}) &= \frac{2l+1}{l+1} \hat{H} P_l(\hat{H}) - \frac{l}{l-1} P_{l-1}(\hat{H}) \\ P'_{l+1}(\hat{H}) &= (2l+1) P_l(\hat{H}) + P'_{l-1}(\hat{H}) \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Simultaneous recursive} \\ \text{equations of Legendre} \\ \text{polynomial} \end{array}$$

For an arbitrary vector $|\xi\rangle$, $\langle P_l(\hat{H}) \rangle_{\sigma} |\xi\rangle$ can be calculated recursively!

CPU time practically unchanged!

Smoothing Kernel polynomial

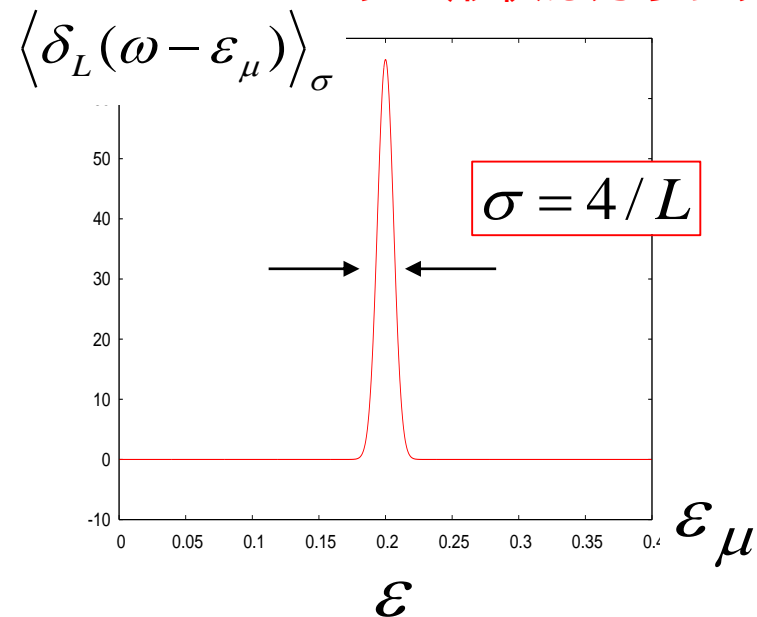
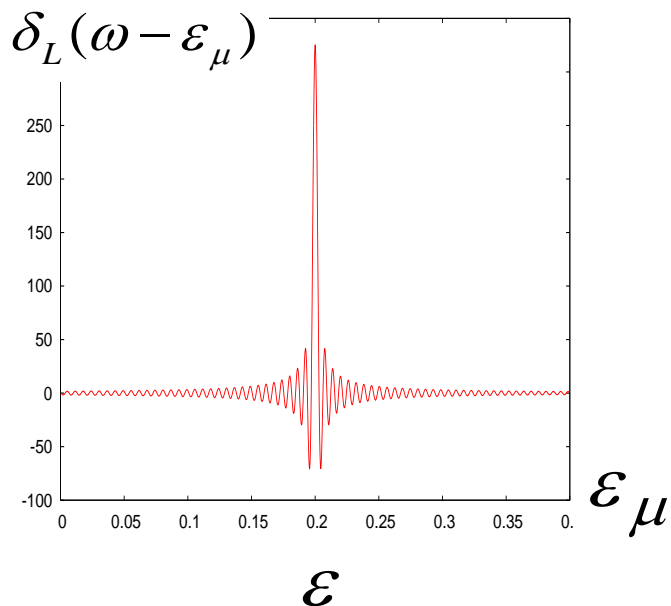
$$\delta_L(\omega - \varepsilon_\mu) = \sum_{l=0}^L w_l^{-1} P_l(\omega) P_l(\varepsilon_\mu)$$

↓ Regulation

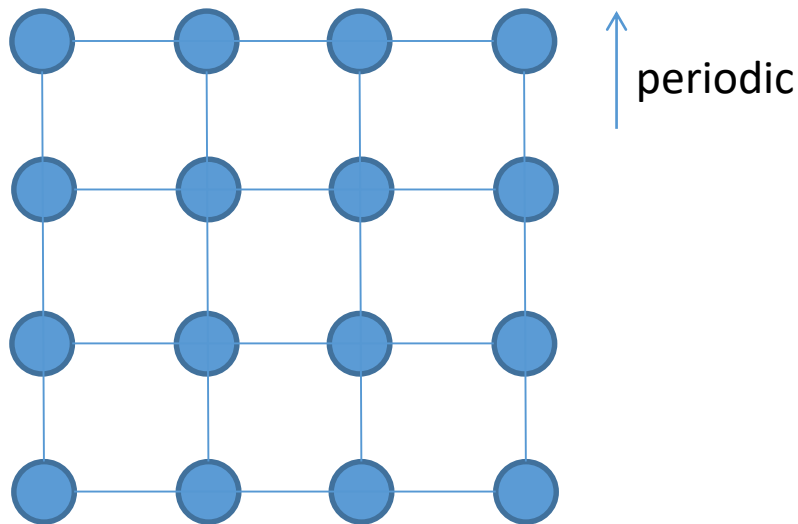
$$\langle \delta_L(\omega - \varepsilon_\mu) \rangle_\sigma = \sum_{l=0}^L w_l^{-1} P_l(\omega) \langle P_l(\varepsilon_\mu) \rangle_\sigma$$

Regulated Polynomial

ピークの形状はガウシアン



正方格子ハバード模型

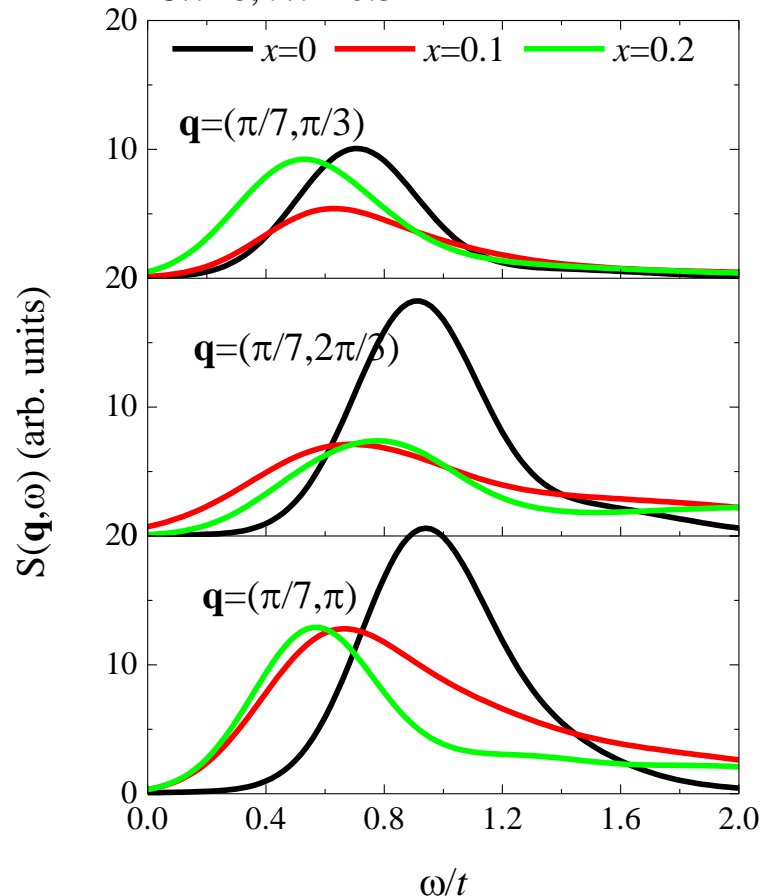


動的スピン相関関数

$$S(\mathbf{q}, \omega) \propto \frac{1}{N} \text{Im} \langle 0 | \hat{S}(\mathbf{q}) \frac{1}{\omega - \hat{H} + \varepsilon_0 - i\gamma} \hat{S}(\mathbf{q}) | 0 \rangle$$

$$\frac{1}{\omega - \hat{H} + \varepsilon_0 - i\gamma} \hat{S}(\mathbf{q}) | 0 \rangle, \quad \hat{S}(\mathbf{q}) | 0 \rangle, \quad | 0 \rangle$$

6x6 hole-doped Hubbard cylinder
 $U/t=8, t'/t=-0.3$



ピークの幅は直交多項式展開法の打ち切り次数($\sigma \sim 4/L$)で決まる。

Dynamical DMRGの概要 (プログラムの解説)

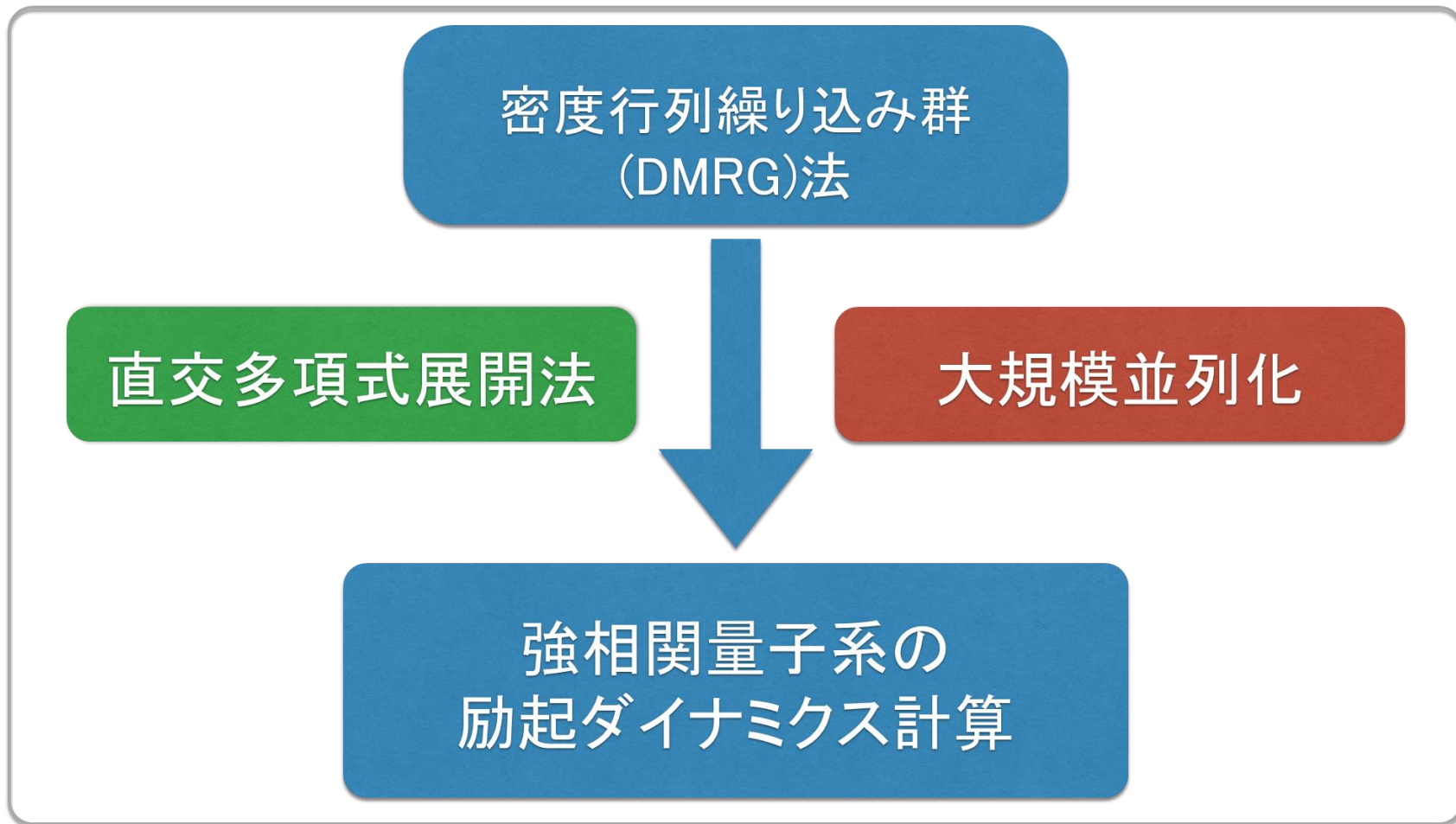
- 開発中のプログラムと特徴

	並列化の方針	DMRG (基底状態計算)	DDMRG (励起ダイナミクス)	tDMRG (時間発展)	FT-DMRG (有限温度)
DynamicalDMRG (量子ダイナミクス)	より大きなm (ターゲット状態)	✓	✓	✓ (複素数版)	✓ (バージョン1)
2D-DMRG (多次元系)	より大きな系 (実空間並列)	✓	✓	✓	✓
paraDMRG (第一原理計算)	より複雑な系 (相互作用項)	✓			

- Materi Apps Live!にインストールされているDDMRGは変数を実数に固定しているため、機能が一部制限されています。
- スパコンで利用する場合は、研究目的に合わせて適切なものを選んでください。
- 研究目的と一緒に開発者に相談いただければプログラムの拡張も含めて対応できるかもしれません。
- ソースファイルの提供については、著作権が理研で管理されているので、要相談。

大規模並列動的密度行列繰り込み群法プログラム DynamicalDMRG(DDMRG)について

- DynamicalDMRG(DDMRG)の概要



- 1日程度で計算結果を出すことを仮定した場合

(必要な計算資源)

PC

(数十~数百GFLOPS)

研究室の
クラスタ

(数TFLOPS)

大学等の
スパコン

(数百TFLOPS)

京

(10PFLOPS)

ポスト京

(~1EFLOPS)

- 一次元強相関係の基底状態
(DMRGの打ち切り次数： $m < 500$ の計算)(※ハミルトニアン次元は $O(m^2)$)
- 一次元強相関係の有限温度の計算(有限温度DMRG)
- 一次元強相関係の量子ダイナミクス(動的DMRG、時間依存DMRG)
($m < 1,000$ の計算、エネルギー、時間、温度に対して複数回)
- 電子-格子相互作用を含む一次元強相関電子系
- 二次元強相関係の基底状態
- 二次元強相関係の量子ダイナミクス(DDMRG, tDMRG)
- 有限温度二次元強相関係の基底状態と量子ダイナミクス
- 三次元強相関係の基底状態

- 密度行列繰り込み群法の手法のパラメータは m とスweep数。
- 基底状態計算の計算精度は打ち切り誤差からおおよその判定は可能
 - 動的DMRGの場合は、マルチターゲットなので打ち切り誤差から単純な判別は難しい。計算結果の収束(m 依存性、スweep数)から判断。
- 計算精度を上げたい場合
 - 密度行列繰り込み群法の打ち切り次数 m を大きくする。
 - ただし、計算量は $O(m^3)$ となる
 - 系のサイズ(N)を小さくする。(特に多次元系)
 - m や有限系アルゴリズムのスweep数を固定した場合は計算量は $O(N)$
 - (スweep数について)系のサイズが大きいほど結果の収束までにかかるスweepの数は大きくなる傾向にある(スweep数は m にも依存する)。これについては系に大きく依存するので、あらかじめ大きめにとるか、以前の同様の計算を参考に決定してください。

- 先ほどの密度行列繰り込み群法の計算パラメータ(m とスイープ数)は同様に考慮してください。
- 直交多項式展開法の特徴から同時に複数のエネルギーを(計算コストをほぼ変えず)計算することが可能なので、計算するエネルギー範囲を設定して計算します。
 - ただし、計算するエネルギー範囲が広いほど、計算精度を保つために必要な m は大きくなります。
 - ピークの幅は直交多項式展開法の打ち切り次数に依存します($\sigma \sim 4/L$)。そのため、ピークの幅を小さくするほど直交多項式展開法の打ち切り次数が大きくなるため、計算時間がかかります。
 - ピークの幅が小さいほど計算精度により敏感になります。ピークの幅を狭くするほどより大きな m で計算する必要があります。
- 特に2次元(多次元)系に適用するためには、まず基底状態を収束させた後に励起状態を取り込んだ動的密度行列繰り込み群法の計算をする必要があります。

● system.ini

- 計算するモデルを設定するためのファイル(バイナリファイル)。
- HubbardモデルやHeisenbergモデルなど様々なモデルについて用意されています。
 - “/usr/share/ddmrg/example”にあるsystem.iniはスピン $S=1/2$ Heisenbergモデルです。
 - “/usr/share/ddmrg/data/system”にsystem.iniの他のサンプルがあります。
 - system_Hubbard.ini (Hubbardモデル)
 - system_Heisenberg10.ini ($S=1$ Heisenbergモデル)
- カレントディレクトリに”system.ini”にrenameして置くと対応する計算になります。
- その他、計算したい系などありましたら、お気軽に開発者にお尋ねください。

- **parameters.txt**

- 計算のパラメータを設定するファイル(テキストファイル)
- 密度行列繰り込み群法の打ち切り次数 m 、有限系アルゴリズムにおけるスイープ数、およびup-spinとdown-spinの数を設定します。

- **parameters.txtの内容**

```
# DMRG parameters
(DMRG truncation number) = 300
(number of sweep) = 3
```

密度行列繰り込み群法の打ち切り次数 m

有限系アルゴリズムにおけるスイープ数

```
# system parameters
(up-spin) += 0
_(down-spin) += 0 }
```

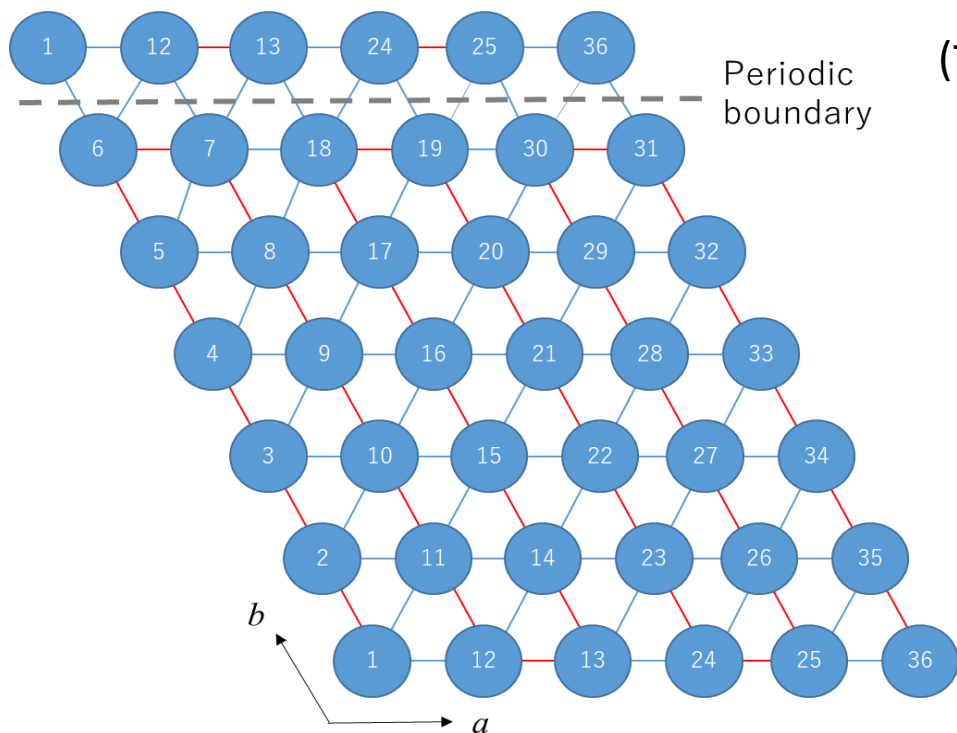
スピンの数

(spin模型の場合はup-spin数のみでdown-spinの数も決まる。)

※(up-spin) += 0の表記について
この場合は全 $S_z=0$ からのずれで与えます。
(電子系の場合は半充填かつ全 $S_z=0$ が基準)
(up-spin) -= 0, または直接スピン数を
(up-spin) = 18のように与えることも可能です。

- preset.txt

- ハミルトニアンを設定するファイル(テキストファイル)。
- 各相互作用項について、**サイト番号**と**係数**を与えることで設定します。



(サイト番号について)

- 左図は三角格子の例
- DMRGの経路(赤色の実線)の順にサイトに番号を付けています。
- 目的の格子形状を与えるように相互作用を考えます。(青色の実線)
- プログラム上、サイト番号の与え方は任意ですが、できるだけ系を二つに割ったときに切られる相互作用の数が小さいほうが精度良く(小さい m で)計算できます。

26

- preset.txtの内容 (Heisenberg模型)

(i)	(j)	(J_{ij})
1	2	1.000
2	3	1.000
3	4	1.000
4	5	1.000
5	6	1.000
-	-	-
	⋮	

Heisenberg模型のハミルトニアン

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \sum_{i,j} J_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z)$$

2つのサイト番号(i,j)、値(J_{ij})の順に各行にひとつずつ与えます。

(XXZ模型の場合)

(i)	(j)	(J_{ij}^{xx})	(J_{ij}^{zz})
1	2	1.000	1.000
2	3	1.000	1.000
3	4	1.000	1.000
4	5	1.000	1.000
5	6	1.000	1.000
-	-	-	-
	⋮		

XXZ模型のハミルトニアン (係数が二種類ある場合)

$$H = \sum_{i,j} \{ J_{ij}^{xx} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + J_{ij}^{zz} S_i^z S_j^z \}$$

二つの係数(J_{ij}^{xx} , J_{ij}^{zz})をそれぞれ与えてください。

● preset.txtの内容(Hubbard模型)

Hubbard模型のハミルトニアン

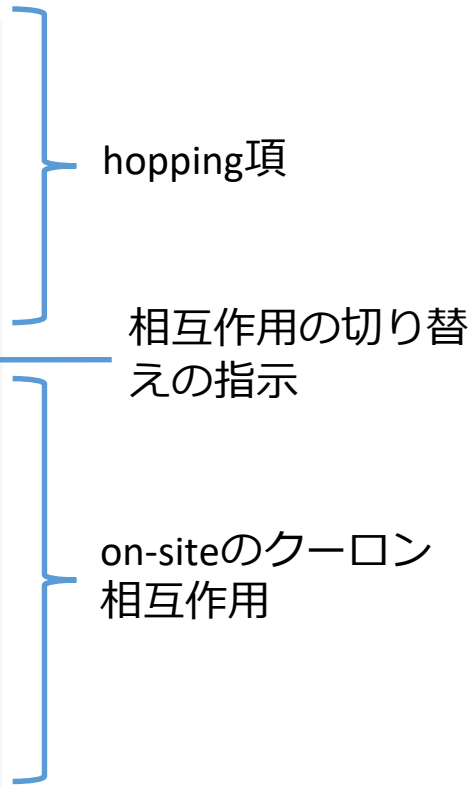
$$H = - \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{H.c.}) + \sum_i U_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}$$

Hopping項
On-site項 $\left(\sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \right)$

```

1 2      1.000
2 3      1.000
3 4      1.000
4 5      1.000
5 6      1.000
  ⋮
#4
1 1 1 1 10.00
2 2 2 2 10.00
3 3 3 3 10.00
4 4 4 4 10.00
5 5 5 5 10.00
6 6 6 6 10.00
  ⋮

```



- hoppingとon-siteのクーロン相互作用を相互作用の切り替えの指示(#4)をはさんでそれぞれ与えてください。
- hoppingについてエルミート共役は自動的に導入されます。
- Hoppingのところでサイト番号を同じ数字(i=j)とした場合、そのサイトでのポテンシャルになります。(エルミート共役は取りません。)
- On-siteこうについて、Uが各サイト同じ場合は、

```

#4
1 1 1 1 10.00
2 2 2 2 10.00
3 3 3 3 10.00
  ⋮

```

} → #U=10

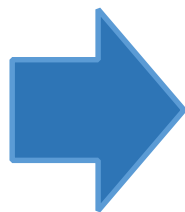
という置き換えが可能です。

- phys.txt(オプション)

- 計算する物理量を設定するファイル(テキストファイル)。
- 計算する物理量に対応する演算子とサイト番号を与えます。

- ・ 入力

```
# test
< 2 >
1
2
< 2 2 >
1 2
2 3
```



- ・ 出力

```
# physical quantities
# state 1
# test
# < S^z >
1 -0.0000000001 0.0000000000
2 0.0000000000 0.0000000000
# < S^z S^z >
1 2 -0.2193648346 0.0000000000
2 3 -0.0961352152 0.0000000000
```

- “#”がついた行はコメント行になります。
- “< 2 >”は演算子の指定です。(数字と演算子の関係は次ページ。)
- 演算子の次にサイト番号を指定します。
- サイト数のところをEとすると、それぞれのサイトについて計算します。

- 演算子と番号の関係について(system.iniに依存します。)
 - Heisenberg模型
 - 1 (-1): S_i^+ (S_i^-)
 - 2: S_i^Z
 - Hubbard模型
 - 1 (-1): $c_{i,\uparrow}^\dagger$ ($c_{i,\uparrow}$)
 - 2 (-2): $c_{i,\downarrow}^\dagger$ ($c_{i,\downarrow}$)
- ここで定義されている演算子、または模型以外のものが必要な場合は開発者にお問い合わせください。

- position.txt

- 波数空間での物理量の計算のため、各サイトの座標を設定するファイル (テキストファイル)。
- サイト番号と座標を1セットとして与えます。
- サイト番号を0とした場合はそのサイトは物理量の計算に含まれなくなります。

Open boundaryの場合 (particle in a box)

$$q = \frac{n\pi}{L+1}, \quad (n = 1, 2, \dots, L)$$

1	1.0000	1.0000
2	1.0000	2.0000
3	1.0000	3.0000
4	1.0000	4.0000
5	1.0000	5.0000
6	1.0000	6.0000
7	2.0000	6.0000
8	2.0000	5.0000
9	2.0000	4.0000
10	2.0000	3.0000
11	2.0000	2.0000
12	2.0000	1.0000
	⋮	

(サイト番号) (x座標) (y座標)

- dphys.txt(オプション、 position.txtが必要)
- 計算する動的相関関数を設定するファイル(テキストファイル)。
- $S^z(\mathbf{q}, \omega) \sim -\text{Im}\langle 0 | S_{-\mathbf{q}}^z \frac{1}{H - \omega_0 - \omega + i\gamma} S_{\mathbf{q}}^z | 0 \rangle$ の例(6×6サイト正方格子)。

DDMRG parameters

(number of sweep for ground state) = 4

基底状態のみターゲット状態とする
fDMRGのスweep数

operator

(number of operators): 1

(types of operators): 2

演算子の数と演算子の種類
(ここでは $S_{\mathbf{q}}^z$ を与えている。)

wavenumber

(wavenumber q_x) = 1*pi/7

(wavenumber q_y) = 6*pi/6

(boundary condition): c

波数と境界の指定

(q=(p/7,p), cylindrical boundary

(c: cylinder, o: open, p: periodic)

parameters for energy range

(lower bound) = 0.000

(upper bound) = 3.000

(number of points) = 61

(half width of delta function) = 0.080

計算するエネルギー領域、点の数、
ピーク幅を設定
(ピークはガウシアンで与えられる 32
ことに注意。)

Dynamical DMRG実習(1)

(基底状態計算)

- **本実習の目的**

- DDMRGにおけるHamiltonian(格子)の設定方法について把握すること。
- DDMRGにおける(静的な)物理量の計算方法について把握すること。
- DDMRGにおける計算結果(出力)の意味について把握すること。
- 基底状態計算を通じて密度行列繰り込み群法による計算の大まかな流れを掴むこと。
- 密度行列繰り込み群法の実行に必要な計算コスト(計算時間、メモリ使用量)について感覚を掴むこと。

- 6×6サイト正方格子反強磁性Heisenberg模型でのDMRG計算
 - 必要な入力ファイル
 - `system.ini`
 - `parameters.txt`
 - `preset.txt`
 - /usr/share/ddmrg/exampleに対応した入力ファイルがありますので、まずはコピーして実行してください。
 - わからないところがありましたら質問してください。
- 物理量の計算
 - 先ほどのファイルに加えて必要なファイル
 - `phys.txt`
- 適当に入力ファイルを変更して実行してみてください。

Dynamical DMRG実習(2)

(励起ダイナミクス計算)

- **本実習の目的**

- DDMRGにおける動的相関関数の計算方法を把握すること。
- 動的密度行列繰り込み群法にかかわるパラメータ(m , ピーク幅, スイープ数)に対する感覚をつかむこと。

- 6×6 サイト正方格子反強磁性Heisenberg模型での動的DMRG計算
 - 必要なファイル
 - system.ini
 - parameters.txt
 - preset.txt
 - position.txt
 - dphys.txt
 - /usr/share/ddmrg/example, /usr/share/ddmrg/dataに対応するファイルがあります。ファイルをコピーして実行してください。
 - 入力ファイルを変更していろいろ試してください。
 - 質問、または要望がありましたらお気軽にお尋ねください。