

Dynamical DMRG 取扱説明書

平成 24 年 2 月 22 日

目次

第1章	利用方法	5
1.1	ファイルのダウンロード	5
1.2	パラメータ設定ファイルの入手	5
1.3	パラメータファイルの規則	7
第2章	計算パラメータ	9
2.1	共通パラメータ	9
2.1.1	密度行列繰り込み群法の種類の選択	9
2.1.2	無限系、または有限系アルゴリズムの選択	10
2.1.3	計算のバックアップファイルの作成	11
2.1.4	密度行列繰り込み群法の打ち切り回数 (DMRG truncation number)	12
2.1.5	系の大きさ (number of sites)	12
2.1.6	格子の自由度 (number of phonon)	12
2.1.7	温度 (temperature)	12
2.1.8	電子系だけの計算	13
2.1.9	拡張ハバードモデルのパラメータ (on-site Coulomb, N.N. Coulomb)	13
2.1.10	フォノンのエネルギー (phonon frequency)	14
2.1.11	ホルシュタイン型電子 格子相互作用 (Holstein EP constant)	14
2.2	動的密度行列繰り込み群法のパラメータ	15
2.2.1	計算するエネルギー領域の下限と上限 (lower bound, upper bound)	15
2.2.2	一度に計算されるエネルギー幅 (energy length)	15
2.2.3	エネルギー領域に対する並列計算の数 (number of parallelization)	16
2.2.4	1つのエネルギー領域に対する点数 (number of points)	16
2.2.5	デルタ関数の幅 (half width of delta function)	16
2.3	時間依存密度行列繰り込み群法に対するパラメータ	17

2.3.1	ポンプ光の遅延時間 (delay time of pump laser)	17
2.3.2	ポンプ光の半値幅 (half width of pump laser)	17
2.3.3	ポンプ光が当たっている時間 (irradiating laser time length) .	17
2.3.4	ポンプ光が当たっている時間帯の時間刻み (irradiating laser time step)	18
2.3.5	ポンプ光照射後の時間 (relaxation time length)	18
2.3.6	ポンプ光照射後の時間刻み (relaxation time step)	18
2.3.7	ポンプ光のエネルギー (laser energy)	18
2.3.8	ポンプ光の強度 (laser strength)	19
2.3.9	全計算時間領域 (total time length)	19
2.4	その他のパラメータ	20
2.4.1	有限温度密度行列繰り込み群法におけるサンプル数 (number of sampling)	20
2.4.2	ランチョス法の最大打ち切り次数 (truncation number of Lanc- zos)	20
2.4.3	直交多項式展開法の打ち切り次数 (truncation number of poly- nomial)	20
2.4.4	直交多項式展開法の繰り返し数 (iteration of polynomial ex- pansion)	21
第3章	応用例	23
3.1	動的密度行列繰り込み群法	23
3.1.1	パラメータの設定	23
3.1.2	計算結果	25
3.2	時間依存密度行列繰り込み群法	34
3.2.1	パラメータの設定	34
3.2.2	計算結果	36
3.3	今後のバージョンアップの予定と不具合・要望等	45

第1章 利用方法

本アプリ (Dynamical DMRG) は、実行ファイル (DDMRG) 形式で Portal site for Application software Library (PAL) にて公開されています。利用者は、この実行ファイル (DDMRG) を PAL よりダウンロードし、計算を実行します。このとき、利用者は別途用意されたパラメータ定義用のファイル (parameters.txt) で、本アプリの計算パラメータを与えます。これにより、利用者はそれぞれの目的に沿った計算を実行することが可能です。計算結果は、標準出力に与えられます。以下で、本アプリの使用方法の詳細を説明します。

1.1 ファイルのダウンロード

本アプリ Dynamical DMRG は、次世代スパコンプロジェクトにより開発されたアプリで、京での利用を想定して開発されました。本アプリは、Portal site for Application software Library (PAL) の Dynamical DMRG の項目のところで公開されています。ただし、本アプリの利用を希望される方は、開発者への事前相談が必要です。ここで公開されている実行ファイルは京での利用を想定しており、京のコンパイラを用いてコンパイルされた実行ファイルです。他のシステムでの利用を希望される方は、実行を希望するシステムの情報添えて開発者までご連絡ください (本アプリの動作条件は、MPI 環境と LAPACK、および BLAS です)。実際の利用に際しましては、このサイトから実行ファイル (DDMRG) をダウンロードします。

1.2 パラメータ設定ファイルの入手

本アプリを用いて計算を実行するためには、計算のパラメータを設定する必要があります。この計算のパラメータは parameters.txt より設定します。この、パラメータを設定するためのファイルのテンプレートは、DDMRG の後に -m をつけて (例: ./DDMRG -m) これを実行することで、次のような内容のファイル parameters.txt が生成されます。

```
(parameters.txt)

# Choose DMRG calculation
[*] Dynamical DMRG
[] Time dependent DMRG
[] Static DMRG
# Choose DMRG algorithm
[*] infinite
[] infinite + finite
[] finite

(number of sweep) = 0

[] Taking backup

# Dynamical DMRG parameters
# DMRG parameters
(DMRG truncation number) = 100

# system
(number of sites) = 12
(number of phonon) = 1
(temperature) = 0.0

# Hamiltonian
[] electron system only
# extended Hubbard model
(on-site Coulomb) = 10.0
(N.N. Coulomb) = 2.0

# phonon
(phonon frequency)=0.0

# Holstein type EP interaction
(Holstein EP constant) = 0.0
```

```
# Peierls type EP interaction
(Peierls EP constant) = 0.0

# parameters for energy range
(lower bound) = 6.0
(upper bound) = 9.0
(energy length) = 3.0
(number of parallelization) = 1
(number of points) = 31

# other parameters
(half width of delta function) = 0.5
!(initialize) = 1
(number of sampling) = 1
(truncation number of Lanczos) = 500
(truncation number of polynomial) = 1000
(iteration of polynomial expansion) = 1

# parameters for time dependent DDMRG
(delay time of pump laser) = 5
(half width of pump laser) = 2
!(irradiating laser time length) = 13
(irradiating laser time step) = 0.1
!(relaxation time length) = 100
(relaxation time step) = 1
```

利用者は、このファイル (parameters.txt) の内容を変更することで、目的に沿った計算を実行することが可能です。次章は、このファイルの詳細について説明します。

1.3 パラメータファイルの規則

利用者は変更可能なパラメータについて、設定ファイルのテンプレート (parameters.txt) を用いて設定を行いますが、この設定ファイルにはいくつかのルールがあります。ここでは、その基本的なルールについて説明します。

まず、パラメータ設定用のファイルを用意せずに実行した場合、計算はプログラムの内部で用意されているデフォルトのパラメータを用いて実行されます。この時のパラメータは、前節の方法で作成されたパラメータ設定ファイルのテンプレートの初期値と同じです。文の頭に”#”または、”c”の付けられた文は無視されます。また、文中に”!”の存在する文も無視されます。これらを用いて、利用者はコメント文を書き加えたり、特定のパラメータをコメントアウトすることで、そのパラメータを初期値に戻すことが可能となります。また、パラメータ設定ファイルで与えられているパラメータの順番を変更することは可能です。利用者はその目的に合わせてパラメータ設定ファイルを編集することができます。ただし、括弧で囲まれたパラメータの名称を変更することはできません。

第2章 計算パラメータ

この節では、前章で取り上げたパラメータの設定ファイル(parameters.txt)のテンプレートファイルを元に、それぞれのパラメータを説明します。

2.1 共通パラメータ

2.1.1 密度行列繰り込み群法の種類の選択

本アプリでは、動的な物理量を計算するための動的密度行列繰り込み群法を基本としていますが、そのほかにこの動的密度行列繰り込み群法を拡張した方法の時間依存密度行列繰り込み群法による物理量の時間発展、また基本的な密度行列繰り込み群法を実行することが可能です。そこで、利用者はその目的に合わせてどの密度行列繰り込み群法のアルゴリズムを用いるか選択する必要があります。これは、テンプレートファイルで与えられています以下の部分で指定することが可能です。

```
# Choose DMRG calculation
[*] Dynamical DMRG
[] Time dependent DMRG
[] Static DMRG
```

ここで、Dynamical DMRG は動的密度行列繰り込み群法、Time dependent DMRG は時間依存密度行列繰り込み群法、Static DMRG は一般的な密度行列繰り込み群法を示しています。これらの選択肢に対して「*」を付けた選択肢が指定されることとなります。上の例では、動的密度行列繰り込み群法が選択されています。例えば、これを時間依存密度行列繰り込み群法に変更したい場合は、

```
# Choose DMRG calculation
[] Dynamical DMRG
[*] Time dependent DMRG
```

Static DMRG

とすることで変更することが可能です。

2.1.2 無限系、または有限系アルゴリズムの選択

密度行列繰り込み群法には、この密度行列繰り込み群法のアルゴリズムを繰り返すことで系を拡張するいわゆる無限系のアルゴリズムと呼ばれるものと、無限系のアルゴリズムを任意の回数繰り返すことで得られたある大きさに系に対して、計算の目的となる物理量の精度を高めるために行われる、いわゆる有限系のアルゴリズムと呼ばれるものが存在します。ここでは、本アプリにおける無限系、および有限系のアルゴリズムの選択方法について説明します。パラメータ設定のテンプレートファイル (parameters.txt) に以下の項目があります。

```
# Choose DMRG algorism
[*] infinite
 infinite + finite
 finite
```

ここで、infinite は無限系のアルゴリズム、finite は有限系のアルゴリズムを示しています。また、infinite + finite は無限系のアルゴリズムで系を拡張した後、有限系のアルゴリズムを実行することを示しています。上の例では、infinite が「*」により選択されていますので、無限系のアルゴリズムのみが実行されます。これを、無限系のアルゴリズムで系を拡張した後、有限系のアルゴリズムを実行するように変更するためには、まず、

```
# Choose DMRG algorism
 infinite
[*] infinite + finite
 finite
```

とします。さらに、実際に有限系のアルゴリズムを実行する回数を与える必要があります。この回数は、その下にある (number of sweep) により指定することが可能です。例えば、

(number of sweep) = 1

とすると、一通りの有限系のアルゴリズム (1 往復のスweepに対応) を実行します。ところで、この有限系のアルゴリズムに必要な計算時間はここで取り扱われる系の大きさに比例します。有限系のアルゴリズムのみを実行する場合には finite を選択します。ただし、この有限系のアルゴリズムのみを実行する場合には、あらかじめ任意のサイズの系についてのデータ (BACKUP+「番号」、BLOCK+「番号」の名前のファイルで出力) を作成する必要があります。これを作成するためには、有限系のアルゴリズムを有効にして実行することで作成されます。例えば、今回は無限系のアルゴリズムだけで後で改めて有限系のアルゴリズムを実行する可能性がある場合、

```
# Choose DMRG algorithm  
[] infinite  
[*] infinite + finite  
[] finite
```

(number of sweep) = 0

とすることで、今回は無限系のアルゴリズムのみを実行し有限系のアルゴリズムに必要なデータも作成することができます。また、以前に有限系のアルゴリズムを実行済みで、今回改めて有限系のアルゴリズムを実行したい場合には、以前のデータを用いて再度有限系のアルゴリズムを任意の回数実行することが可能です。

2.1.3 計算のバックアップファイルの作成

予期できないトラブルや、一回の利用可能な計算時間で計算が終了しない場合に備えて、計算のバックアップを行うことが可能です。これを有効にするためには、taking backup の項目を、

```
[*] taking backup
```

とします。ただし、これを有効にすると、巨大なデータの書き込みが発生するため、記憶領域の容量、およびファイルの IO にかかる時間に注意が必要です。

また、計算を再開する場合にも、この項目を有効にすることで、自動的にバックアップされたデータを元に続きの計算を実行することが可能です。

2.1.4 密度行列繰り込み群法の打ち切り次数 (DMRG truncation number)

密度行列繰り込み群法は、計算する物理量に適するよう選ばれた任意の数の基底で系を表現することにより、厳密対角化では難しい巨大な問題を取り扱うことが可能になる手法です。この任意の基底の数を与えるのが、このパラメータ (DMRG truncation number) です。このパラメータは、本アプリを用いた計算の精度を決定します。より大きな値を用いることで、高い精度の結果を得ることが可能です。しかしながら、このパラメータは計算コストに直結します。およそ、このパラメータの4乗が実際の計算コストに対応します。

2.1.5 系の大きさ (number of sites)

このパラメータは計算する系の大きさ (サイトの数) を与えます。ただし、本アプリでは4サイトの系から計算を始めますので、利用者は4以上の任意の数を設定する必要があります。計算時間は、このパラメータに比例します。また、より巨大な系で高精度の結果を実行するためには系の大きさに合わせて密度行列の打ち切り次数 (DMRG truncation number) を大きくする必要があります。

2.1.6 格子の自由度 (number of phonon)

本アプリでは、電子 格子相互作用を含んだ系を取り扱うことが可能であり、格子系はアインシュタインフォノンで取り扱われます。ここで現れる格子の自由度の上限を与えるパラメータがこの (number of phonon) です。このパラメータは、計算の収束を確認しながら与える必要があります。傾向としては、より高エネルギー側の計算を計算するためには大きな値を選択する必要があります。計算コストは、およそこのパラメータの2乗で与えられます。

2.1.7 温度 (temperature)

本アプリでは、一般的な密度行列繰り込み群法で取り扱われる絶対零度に加え、有限温度における計算を行うことが可能です (ただし、動的密度行列繰り込み群法のみ。他のものについては、今後対応を予定)。ここで与えられる温度の単位は、電子の近接サイトへの hopping のエネルギーの大きさを単位としています。このパラメータの値を0とすると絶対零度での計算となり、有限の値を設定すると有限温度での計算となります。本アプリではこの有限温度の手法として低温側でよ

り小さな計算コストで計算可能な有限温度動的密度行列繰り込み群法を採用しています。より高温を計算するためには、より大きな密度行列繰り込み群法の打ち切り次数 (DMRG truncation number) を設定する必要があります。

2.1.8 電子系だけの計算

電子系に加え格子系を考慮した計算を行うためには、巨大な計算コストがかかります。そこで、電子系のみを取り扱いたい場合に計算コストを削減する目的で電子系のみを取り扱うための設定項目があります。以下の通り、

[*] electron system only

として、この項目を有効にすることにより、電子系だけの計算となります。

2.1.9 拡張ハバードモデルのパラメータ (on-site Coulomb, N.N. Coulomb)

本アプリで採用している拡張ハバードモデルのハミルトニアンは、

$$\hat{H} = -t \sum_{i,\sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + H.c.) + U \sum_i (n_{i,\uparrow} - \frac{1}{2})(n_{i,\downarrow} - \frac{1}{2}) + V \sum_i (n_i - 1)(n_{i+1} - 1)$$

と与えられます。ここで、 t の項は電子のホッピングを示し、 U の項は同一サイトにおける電子間のクーロン斥力を示しています。ただし、ここでは1サイトあたりの電子数を引いています。また、 V の項は最近接サイト間の電子間クーロン斥力で、open boundary condition で実行される本アプリのDMRG法において、系の端の効果を軽減するために、ここでは電子数演算子から電子密度の期待値を引いています。(U の項と同じく、現バージョンは half filling のみの対応なのでここでは1になっています。)

本アプリにおけるエネルギーの単位は電子のホッピングです。したがって、この電子のホッピングの大きさは不変で、ほかのパラメータを条件に合わせて設定します。拡張ハバードモデルに対しては、ここで設定できるパラメータとして、同一サイトの電子間のクーロン斥力 U と、最近接サイトの電子間のクーロン斥力 V があります。まず、同一サイトの電子間のクーロン斥力 U は、

(on-site Coulomb) = 10.0

のように設定します。上の例では $U = 10t$ に対応しています。次に、最近接サイトの電子間クーロン斥力は、

(N.N. Coulomb) = 2.0

と設定します。上の例では $V = 2t$ です。

2.1.10 フォノンのエネルギー (phonon frequency)

本アプリでは、格子振動をアインシュタインフォノンで取り扱っています。したがって、格子系のハミルトニアンを

$$\hat{H}_{ph} = \omega_0 \sum_i b_{i+1/2}^\dagger b_{i+1/2}$$

と与えます。ここで、 ω_0 はアインシュタインフォノンの振動数、 $b_{i+1/2}^\dagger$ は、 i 番目と $i+1$ 番目の間の格子系の擬サイトに対するフォノンの生成演算子です。このアインシュタインフォノンの振動数 ω_0 に対応するパラメータが (phonon frequency) です。例として、

(phonon frequency)=0.1

は、 $\omega_0 = 0.1t$ を設定しています。

2.1.11 ホルシュタイン型電子 格子相互作用 (Holstein EP constant)

パラメータ (Holstein EP constant) は、電荷揺らぎを起源とする、いわゆるホルシュタイン型の電子-格子相互作用の大きさを与えます。本アプリでは、この項を、

$$-g \sum_i (b_{i+1/2}^\dagger + b_{i+1/2})(n_i - n_{i+1})$$

と与えています。例として、

(Holstein EP constant) = 0.1

は、 $g = 0.1t$ を設定しています。

パイエルス型電子-格子相互作用 (Peierls EP constant)

パラメータ (Peierls EP constant) は、電子の飛び移りに変調を与えるいわゆるパイエルス型の電子-格子相互作用の大きさを与えます。本アプリでは、この項を、

$$-t\alpha \sum_i (b_{i+1/2}^\dagger + b_{i+1/2}) (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + H.c.)$$

と与えています。例として、

$$(\text{Peierls EP constant}) = 0.1$$

は、 $\alpha = 0.1t$ を設定しています。

2.2 動的密度行列繰り込み群法のパラメータ

2.2.1 計算するエネルギー領域の下限と上限 (lower bound, upper bound)

この2つのパラメータは計算を実行するエネルギー領域を与えます。例として、

$$(\text{lower bound}) = 6.0$$

$$(\text{upper bound}) = 10.0$$

では、 $6t \sim 10t$ の範囲で動的密度行列繰り込み群法を実行します。

2.2.2 一度に計算されるエネルギー幅 (energy length)

一回の動的密度行列繰り込み群で取り扱うエネルギーの幅を設定します。計算するエネルギーの上限と下限の差がこのパラメータより小さい場合には、繰り返し動的密度行列繰り込み群法を実行することで、設定されたエネルギー領域の計算を実行します。例として、

$$(\text{energy length}) = 0.1$$

では、一回の動的密度行列繰り込み群法で取り扱われるエネルギーの幅が $0.1t$ の場合に対応します。

2.2.3 エネルギー領域に対する並列計算の数 (number of parallelization)

異なるエネルギー領域を並列して計算するためのパラメータです。例として、

$$(\text{number of parallelization}) = 4$$

では、異なる4つのエネルギー領域を同時に並列して計算を実行します。したがって、一つのエネルギー領域に対する並列プロセス数は、指定されたプロセス数をこの値で割ったものとなります。

2.2.4 1つのエネルギー領域に対する点数 (number of points)

上で説明された一回の計算におけるエネルギー幅 (energy length) に対する点数を設定します。例として、

$$(\text{number of points}) = 21$$

では、異なる21点のエネルギーに対する結果が得られます。

2.2.5 デルタ関数の幅 (half width of delta function)

動的密度行列繰り込み群法の結果は、固有状態に対応する場所に現れるデルタ関数の連続で与えられます。実際の計算では、このデルタ関数に任意の幅を与えて計算するのが一般的です。ここでは、そのデルタ関数の幅を設定し、計算結果の解像度を与えます。例として、

$$(\text{half width of delta function}) = 0.5$$

は、1つの励起状態に対応するピークの半値幅を $0.5t$ に設定します。

2.3 時間依存密度行列繰り込み群法に対するパラメータ

本アプリでは、系へのポンプ光の照射とその後の緩和過程をシミュレートすることが可能です。本アプリでは、このポンプ光に対応する光を電子のホッピングに対対する変調の形で、

$$-t \sum_{i,\sigma} (e^{iA(\tau)} c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + H.c.)$$

として導入しています。ここで、 $A(\tau)$ はベクトルポテンシャルで、

$$A(\tau) = A_0 e^{-(\tau-\tau_0)/(2\tau_d^2)} \cos(\omega_{pump}(\tau - \tau_0))$$

と与えています。

2.3.1 ポンプ光の遅延時間 (delay time of pump laser)

ポンプ光の遅延時間 τ_0 を与えます。したがって、この時間でポンプ光の強度が最大になります。例として、

$$(\text{delay time of pump laser}) = 5$$

は、この値を 5τ に設定します。

2.3.2 ポンプ光の半値幅 (half width of pump laser)

ポンプ光の半値幅 τ_d を与えます。例として、

$$(\text{half width of pump laser}) = 2$$

は、その半値幅を 2τ に設定します。

2.3.3 ポンプ光が当たっている時間 (irradiating laser time length)

ポンプ光が当たっているとして取り扱われる時間を設定します。ポンプ光が当たっている間は、系は大きく変化するため、細かい時間刻みで計算されています。その細かい時間刻みで、計算される時間をこのパラメータで設定します。例として、

(irradiating laser time length) = 13

は、この時間を 13τ に設定します。

2.3.4 ポンプ光が当たっている時間帯の時間刻み (irradiating laser time step)

ポンプ光が当たっている時間帯の時間刻みを与えます。例として、

(irradiating laser time step) = 0.1

は、この刻みを $0.1t^{-1}$ に設定します。

2.3.5 ポンプ光照射後の時間 (relaxation time length)

ポンプ光照射後の定常状態への緩和プロセスを調べるための時間の長さを設定します。例として、

(relaxation time length) = 100

は、この時間を 100τ に設定します。

2.3.6 ポンプ光照射後の時間刻み (relaxation time step)

ポンプ光照射後の時間帯の時間刻みを与えます。例として、

(irradiating laser time step) = 1

は、この刻みを τ に設定します。

2.3.7 ポンプ光のエネルギー (laser energy)

ポンプ光のエネルギー ω_{pump} を設定します。例として、

(laser energy) = 7.0

は、この刻みを 7τ に設定します。

2.3.8 ポンプ光の強度 (laser strength)

ポンプ光の強度 A_0 を設定します。例として、

(laser strength) = 2.0

は、この刻みを 2τ に設定します。

2.3.9 全計算時間領域 (total time length)

時間依存密度行列繰り込み群法で計算される全計算時間領域を与えます。基本的には、ポンプ光の照射中と照射後の時間の和から自動的に与えられますので、通常は、設定する必要はありません。

2.4 その他のパラメータ

これまで取り上げたパラメータのほかに、本アプリには、計算精度と計算コストに関係するいくつかのパラメータが存在します。これらのパラメータは、必要に応じて設定する必要があります。

2.4.1 有限温度密度行列繰り込み群法におけるサンプル数 (number of sampling)

本アプリにおける有限温度密度行列繰り込み群法では、物理量の計算に対していくつかのサンプルを採り、その平均から物理量を算出します。十分な精度を得るためのサンプル数は、計算したい物理量に依存します。例として、

$$(\text{number of sampling}) = 10$$

は、このサンプル数を 10 に設定します。結果は、このサンプルの平均値により与えられます。

2.4.2 ランチョス法の最大打ち切り次数 (truncation number of Lanczos)

本アプリでは、基底状態の計算にランチョス法を用いています。このランチョス法の上限をこのパラメータ (truncation number of Lanczos) によって与えます。例として、

$$(\text{truncation number of Lanczos}) = 500$$

は、ランチョス法の打ち切り次数を 500 に設定します。

2.4.3 直交多項式展開法の打ち切り次数 (truncation number of polynomial)

本アプリでは、励起状態の計算に直交多項式展開法を用いています。このパラメータ (truncation number of polynomial) は、この直交多項式展開法の打ち切り次数を与えます。例として、

(truncation number of polynomial)=1000

は、直交多項式展開法の打ち切り次数を 1000 次に設定します。

2.4.4 直交多項式展開法の繰り返し数 (iteration of polynomial expansion)

本アプリでは、その有限温度に対応する状態の計算に直交多項式展開法を用います。特に低温の状態を計算するためには、この直交多項式展開法の打ち切り次数を大きくする必要がありますが、この計算を安定に実行するために、本アプリでは、直交多項式展開法を複数回に分けて実行しています。このパラメータ (iteration of polynomial expansion) は、その直交多項式展開法の分割数を与えます。例として、

(iteration of polynomial expansion) = 10

は、この分割数を 10 に設定します。参考として、拡張ハバードモデルで $U=10t$, $V=2T$, 温度 $0.01t$ で計算を実行する場合、この値は 20 程度に設定することが望ましいです。

第3章 応用例

本章では、実際に本アプリ (DDMRG) を実行した例を紹介します。

3.1 動的密度行列繰り込み群法

最初は動的密度行列繰り込み群法による計算です。無限系のアルゴリズムを使って、12 サイトの拡張ハバードモデル ($U=10t$, $V=2t$, half filling) の線形光学応答に対応する動的電流 電流相関関数を $6t$ $9t$ の範囲で計算します。

3.1.1 パラメータの設定

今回の計算で用意したパラメータ設定用のファイルは以下の通りです。また、今回の計算では時間依存密度行列繰り込み群法に対するパラメータは関係ありません。これは、自動的に無視されます。

```
# Choose DMRG calculation
[*] Dynamical DMRG
[] Time dependent DMRG
[] Static DMRG
# Choose DMRG algorithm
[*] infinite
[] infinite + finite
[] finite

(number of sweep) = 0

[] Taking backup

# Dynamical DMRG parameters
```

```
# DMRG parameters
(DMRG truncation number) = 100

# system
(number of sites) = 12
(number of phonon) = 1
(temperature) = 0.0

# Hamiltonian
[] electron system only
# extended Hubbard model
(on-site Coulomb) = 10.0
(N.N. Coulomb) = 2.0

# phonon
(phonon frequency)=0.0

# Holstein type EP interaction
(Holstein EP constant) = 0.0

# Peierls type EP interaction
(Peierls EP constant) = 0.0

# parameters for energy range
(lower bound) = 6.0
(upper bound) = 9.0
(energy length) = 3.0
(number of parallelization) = 1
(number of points) = 31

# other parameters
(half width of delta function) = 0.5
!(initialize) = 1
(number of sampling) = 1
(truncation number of Lanczos) = 500
(truncation number of polynomial) = 1000
```


(iteration of polynomial expansion) = 1

```
# parameters for time dependent DDMRG
(delay time of pump laser) = 5
(half width of pump laser) = 2
!(irradiating laser time length) = 13
(irradiating laser time step) = 0.1
!(relaxation time length) = 100
(relaxation time step) = 1
```

このパラメータファイルを本アプリ DDMRG と同じディレクトリに入れて実行します。

3.1.2 計算結果

この計算の結果得られた出力は以下の通りです。

```
number of vector parallelization: 4
matrix parallelization: 2 x 2
Temp/t= 0.0000
U/t=10.000 V/t= 2.000 omega/t= 0.000 gamma/t= 0.500
g/t= 0.000 g2/t= 0.000 alpha/t= 0.000
mts= 100
site= 12 pseudosite= 12 up= 6 down= 6
nph= 1
(photon energy)= 6.000t - 9.000t
=====
Renormalization of  $c_{\{i,\sigma\}}^{+}$  and  $a_{\{i+1/2\}}^{+}$ 
superblock= 2(pseudo-sites)+2(sites) : lattice= 4(sites)
electron number= 4 : up= 2 : down= 2
(superblock dimension)= 36
myid_ene= 0 (elapsed time in "make..." )= 0.000035(sec.)
myid_ene= 0(elapsed time in "sblock+preA" )= 0.000961(sec.)
eigenvalues, min: -11.11187147507978 , max: 12.17033422413115
myid_ene= 0 (elapsed time in "LANCZOS" )= 0.004079(sec.)
```

```

(normalize factor of Hamiltonian)= 6.013175976911192E-02
(Number of initial vector)= 1
(Number of C.V.)=184
(truncation number at C.V.)= 1000
(energy)= -11.1118716451 (Truncation #)= 21
(Eg/site)= -2.7779679113
myid_ene= 0 (elapsed time in "target1" )= 0.007538(sec.)
myid_ene= 0 (elapsed time in "ph,db,ex" )= 0.000334(sec.)
(density of doublon)= 3.069880941426411E-02
(density of phonon )= 0.000000000000000E+00
myid_ene= 0 (elapsed time in "correctionV")= 0.117326(sec.)
myid_ene= 0 (elapsed time in "prepareDM" )= 0.001319(sec.)
nbdm= 9 mbdm= 4
myid_ene= 0 (elapsed time in "digdm" )= 0.012186(sec.)
(DMRG basis)= 16 (truncation error)= 0.11102E-15
myid_ene= 0 (elapsed time in "tra..." )= 0.004685(sec.)
nbdm= 9 mbdm= 4
myid_ene= 0 (elapsed time in "digdm" )= 0.020133(sec.)
(DMRG basis)= 16 (truncation error)= 0.77716E-15
myid_ene= 0 (elapsed time in "tra..." )= 0.003659(sec.)
(energy rank)= 0, (elapsed time: TOTAL )= 0.172304(sec.)
=====
Renormalization of c_{i,sigma} ^ {+} and a_{i+1/2} ^ {+}
superblock= 4(pseudo-sites)+2(sites) : lattice= 6(sites)
electron number= 6 : up= 3 : down= 3
(superblock dimension)= 400
myid_ene= 0 (elapsed time in "make..." )= 0.000035(sec.)
myid_ene= 0(elapsed time in "sblock+preA" )= 0.000521(sec.)
eigenvalues, min: -16.75756554326210 , max: 21.16994180279269
myid_ene= 0 (elapsed time in "LANCZOS" )= 0.014831(sec.)
(normalize factor of Hamiltonian)= 3.691252333632802E-02
(Number of initial vector)= 1
(Number of C.V.)=112
(truncation number at C.V.)= 1000
(energy)= -16.7575678364 (Truncation #)= 41
(Eg/site)= -2.7929279727

```

```

myid_ene= 0 (elapsed time in "target1" )= 0.025687(sec.)
myid_ene= 0 (elapsed time in "ph,db,ex" )= 0.000344(sec.)
(density of doublon)= 3.227865977421996E-02
(density of phonon )= 0.000000000000000E+00
myid_ene= 0 (elapsed time in "correctionV")= 0.263310(sec.)
myid_ene= 0 (elapsed time in "prepareDM" )= 0.000966(sec.)
nbdm= 16 mbdm= 9
myid_ene= 0 (elapsed time in "digdm" )= 0.024461(sec.)
(DMRG basis)= 64 (truncation error)= 0.33307E-15
myid_ene= 0 (elapsed time in "tra..." )= 0.003843(sec.)
nbdm= 16 mbdm= 9
myid_ene= 0 (elapsed time in "digdm" )= 0.034741(sec.)
(DMRG basis)= 64 (truncation error)= 0.44409E-15
myid_ene= 0 (elapsed time in "tra..." )= 0.003536(sec.)
(energy rank)= 0, (elapsed time: TOTAL )= 0.372321(sec.)
=====
Renormalization of  $c_{i,\sigma}^{\{+\}}$  and  $a_{i+1/2}^{\{+\}}$ 
superblock= 6(pseudo-sites)+2(sites) : lattice= 8(sites)
electron number= 8 : up= 4 : down= 4
(superblock dimension)= 4900
myid_ene= 0 (elapsed time in "make..." )= 0.000273(sec.)
myid_ene= 0(elapsed time in "sblock+preA" )= 0.001670(sec.)
eigenvalues, min: -22.40508000420328 , max: 30.16993979477581
myid_ene= 0 (elapsed time in "LANCZOS" )= 0.051207(sec.)
(normalize factor of Hamiltonian)= 2.662861574475689E-02
(Number of initial vector)= 1
(Number of C.V.)= 80
(truncation number at C.V.)= 1000
(energy)= -22.4050971645 (Truncation #)= 61
(Eg/site)= -2.8006371456
myid_ene= 0 (elapsed time in "target1" )= 0.112979(sec.)
myid_ene= 0 (elapsed time in "ph,db,ex" )= 0.001520(sec.)
(density of doublon)= 3.309075302168087E-02
(density of phonon )= 0.000000000000000E+00
myid_ene= 0 (elapsed time in "correctionV")= 1.097839(sec.)
myid_ene= 0 (elapsed time in "prepareDM" )= 0.001824(sec.)

```

```

nbdm= 25 mbdm= 36
myid_ene= 0 (elapsed time in "digdm" )= 0.178768(sec.)
(DMRG basis)= 100 (truncation error)= 0.25906E-04
myid_ene= 0 (elapsed time in "tra..." )= 0.007402(sec.)
nbdm= 25 mbdm= 36
myid_ene= 0 (elapsed time in "digdm" )= 0.160683(sec.)
(DMRG basis)= 100 (truncation error)= 0.25928E-04
myid_ene= 0 (elapsed time in "tra..." )= 0.007249(sec.)
(energy rank)= 0, (elapsed time: TOTAL )= 1.621464(sec.)
=====
Renormalization of  $c_{i,\sigma}^{\{+\}}$  and  $a_{i+1/2}^{\{+\}}$ 
superblock= 8(pseudo-sites)+2(sites) : lattice= 10(sites)
electron number= 10 : up= 5 : down= 5
(superblock dimension)= 12552
myid_ene= 0 (elapsed time in "make..." )= 0.000600(sec.)
myid_ene= 0(elapsed time in "sblock+preA" )= 0.003630(sec.)
eigenvalues, min: -28.05341173231013 , max: 17.41672287410167
myid_ene= 0 (elapsed time in "LANCZOS" )= 0.102349(sec.)
(normalize factor of Hamiltonian)= 3.078944041222575E-02
(Number of initial vector)= 1
(Number of C.V.)= 96
(truncation number at C.V.)= 1000
(energy)= -28.0534241906 (Truncation #)= 71
(Eg/site)= -2.8053424191
myid_ene= 0 (elapsed time in "target1" )= 0.276864(sec.)
myid_ene= 0 (elapsed time in "ph,db,ex" )= 0.003770(sec.)
(density of doublon)= 3.360377900797399E-02
(density of phonon )= 0.000000000000000E+00
myid_ene= 0 (elapsed time in "correctionV")= 3.624461(sec.)
myid_ene= 0 (elapsed time in "prepareDM" )= 0.003465(sec.)
nbdm= 28 mbdm= 50
myid_ene= 0 (elapsed time in "digdm" )= 0.399086(sec.)
(DMRG basis)= 100 (truncation error)= 0.44480E-03
myid_ene= 0 (elapsed time in "tra..." )= 0.008820(sec.)
nbdm= 28 mbdm= 50
myid_ene= 0 (elapsed time in "digdm" )= 0.481810(sec.)

```

```

(DMRG basis)= 100 (truncation error)= 0.44480E-03
myid_ene= 0 (elapsed time in "tra..." )= 0.008636(sec.)
(energy rank)= 0, (elapsed time: TOTAL )= 4.913542(sec.)
=====
Renormalization of  $c_{i,\sigma}^{\{+\}}$  and  $a_{i+1/2}^{\{+\}}$ 
superblock= 10(pseudo-sites)+2(sites) : lattice= 12(sites)
electron number= 12 : up= 6 : down= 6
(superblock dimension)= 14040
myid_ene= 0 (elapsed time in "make..." )= 0.000608(sec.)
myid_ene= 0(elapsed time in "sblock+preA" )= 0.003969(sec.)
eigenvalues, min: -33.69633431551857 , max: 9.811258975405774
myid_ene= 0 (elapsed time in "LANCZOS" )= 0.105170(sec.)
(normalize factor of Hamiltonian)= 3.232488142567074E-02
(Number of initial vector)= 1
(Number of C.V.)= 31
(truncation number at C.V.)= 175
(energy)= -33.7012719539 (Truncation #)= 77
(Eg/site)= -2.8084393295
myid_ene= 0 (elapsed time in "target1" )= 0.360457(sec.)
myid_ene= 0 (elapsed time in "ph,db,ex" )= 0.004044(sec.)
(density of doublon)= 3.397336191863911E-02
(density of phonon )= 0.000000000000000E+00
myid_ene= 0 (elapsed time in "correctionV")= 0.481167(sec.)
(ene rank)= 0, total computational time: 8.038602(sec.)
Dynamical current-current correlation function
< energy > < intensity >
6.00000 0.017043
6.10000 0.028603
6.20000 0.046259
6.30000 0.072059
6.40000 0.108080
6.50000 0.156040
6.60000 0.216804
6.70000 0.289857
6.80000 0.372869
6.90000 0.461530

```

```
7.00000 0.549766
7.10000 0.630407
7.20000 0.696234
7.30000 0.741222
7.40000 0.761690
7.50000 0.757057
7.60000 0.730005
7.70000 0.685958
7.80000 0.632018
7.90000 0.575593
8.00000 0.523073
8.10000 0.478842
8.20000 0.444829
8.30000 0.420624
8.40000 0.404064
8.50000 0.392056
8.60000 0.381429
8.70000 0.369586
8.80000 0.354880
8.90000 0.336669
9.00000 0.315153
```

myid= 0 , elapsed time: 8.039329051971436 (sec.)

今回得られた計算結果で、目的である電流 電流相関関数は最後の Dynamical current-current correlation function 以下の部分に記載されています。

ここで、アウトプットに現れている内容を上の例を元に説明いたします。

- number of vector parallelization: 4
- matrix parallelization: 2 x 2

これは、このアプリで計算コストの大きいハミルトニアンとベクトルの積に対する並列化の振り分けを示しています。今回のテスト計算は16のMPIプロセスによる計算を行い、上のように自動的に振り分けられました。

Temp/t= 0.0000

$U/t=10.000$ $V/t= 2.000$ $\omega/t= 0.000$ $\gamma/t= 0.500$
 $g/t= 0.000$ $g^2/t= 0.000$ $\alpha/t= 0.000$
 $mts= 100$
 $site= 12$ $pseudosite= 12$ $up= 6$ $down= 6$
 $nph= 1$
 $(\text{photon energy})= 6.000t - 9.000t$

この部分は、今回の計算で用いたハミルトニアンのパラメータ、DMRGの打ち切り次数、サイト数、計算するエネルギー領域を示しています。

$superblock= 10(\text{pseudo-sites})+2(\text{sites}) : lattice= 12(\text{sites})$

これは、取り扱われている系全体のサイトの数を表しており、DMRGの過程で得られた計10サイトの繰り込まれたシステムと環境のブロックに新たに2サイト付け加えたことを示しています。

• $electron\ number= 12 : up= 6 : down= 6$

これは、電子の総数が12個でup spinの電子が6個、down spinの電子が6個あることを示しています。

• $(superblock\ dimension)= 14040$

これは、ここで取り扱われるハミルトニアンの次元を示しています。

• $myid_ene= 0$ (elapsed time in "make...")= 0.000608(sec.)

これは、ハミルトニアンを効率的に生成するための準備にかかった時間を示しています。また、ここで現れている $myid_ene= 0$ は、計算するエネルギーに対する並列化を行った場合の各グループのIDを示しています。今回の計算では、このエネルギーに対する分割は行っていませんので、このグループは1つしかありません。

• $myid_ene= 0$ (elapsed time in "sblock+preA")= 0.039144(sec.)

これは、ハミルトニアンの構成と基底状態等の計算を効率的に行うための変換の準備にかかった時間を示しています。

• $eigenvalues, min: -33.69633431551857, max: 9.811258975405774$

これは、ここで取り扱われるハミルトニアンの最小と最大の固有値をランチョス法で大雑把に見積もった値です。直交多項式展開法を適用するために必要なためここで計算を行っております。また、密度行列繰り込み群法の考え方からみると、

ここで現れている最小固有値は、この計算ではそのターゲットの状態となっていますので、意味のある量ですが、最大固有値についてはこの計算ではターゲット状態となっていないので、日物理的な量でしかなく、あくまで計算上必要な値という意味しかありません。

• myid_ene= 0 (elapsed time in "LANCZOS")= 0.106412(sec.)

これは、上の計算で使用したランチョス法にかかった時間を示しています。

• (normalize factor of Hamiltonian)= 3.232488142567074E-02

これは、直交多項式展開法の適用に必要なハミルトニアン規格化因子を示しています。

• (Number of initial vector)= 1

これは、動的電流 電流相関関数を計算する上での初期状態の数を示しています。今回の計算では絶対零度なので、基底状態のみなので、この値は1になっています。

• (Number of C.V.)= 31

これは、動的電流 電流相関関数に必要な修正ベクトルの数を示しています。今回は31点のエネルギーについて計算を行いますので、この値が31になっています。

• (truncation number at C.V.)= 175

パラメータで与えられたデルタ関数の半値幅にする直交多項式展開法の打ち切り次数を示しています。より幅の狭いデルタ関数、つまり高い解像度の結果を得ようとした場合、この値は大きくなります。

• (energy)= -33.7012719539

• (Truncation #)= 77

• (Eg/site)= -2.8084393295

これは、ランチョス法により得られた基底状態に対するエネルギー、それを得るために必要としたランチョス法の打ち切り次数、および1つのサイトあたりの基底状態のエネルギーを示しています。

• myid_ene= 0 (elapsed time in "target1")= 0.311564(sec.)

これは、上の基底状態を得るために必要とした時間を示しています。

• myid_ene= 0 (elapsed time in "ph,db,ex")= 0.004077(sec.)

この計算では、基底状態における2重占有サイトとフォノンの期待値も同時に計算しています。また、この計算では、動的電流 電流相関関数を計算していますので、基底状態に電流演算子をかける必要があります。これは、これらの計算にかかった時間を示しています。

• (density of doublon)= 3.397336191863911E-02

これは、この計算で得られた基底状態の1サイトあたりの2重占有サイトの期待値です。

• (density of phonon)= 0.0000000000000000E+00

これは、この計算で得られた基底状態の1サイトあたりのフォノン数の期待値です。今回の計算では、電子系のみを取り扱っていますので、この値は0になっています。

• myid_ene= 0 (elapsed time in "correctionV")= 0.500323(sec.)

これは、修正ベクトルを計算するために必要とした時間を示しています。

• myid_ene= 0 (elapsed time in "prepareDM")= 0.005451(sec.)

これは、ターゲット状態から密度行列を効率的に作るための準備にかかった時間を示しています。

• nbdm= 28 mbdm= 50

これは、密度行列をブロック対角化した時のブロックの数とそれらのブロックにおける最大の次元を示しています。

• myid_ene= 0 (elapsed time in "digdm")= 0.338144(sec.)

これは、実際に縮約された密度行列を作りそれを対角化するために必要とした時間を示しています。

• (DMRG basis)= 100 (truncation error)= 0.44480E-03

これは、密度行列の対角化より得られた新たな基底の数と、その基底に対する打ち切り誤差を示しています。

• myid_ene= 0 (elapsed time in "tra...")= 0.008814(sec.)

これは、密度行列の対角化より得られた新たな基底に、この計算に関わるすべて

の演算子を変換するために必要とした時間を示しています。

• (energy rank)= 0, (elapsed time: TOTAL)= 4.913542(sec.)

これは、一回の密度行列繰り込み群法の過程に必要なとした時間を示しています。

• myid= 0 , elapsed time: 8.039329051971436 (sec.)

これは、今回の計算で必要とした時間を示しています。

3.2 時間依存密度行列繰り込み群法

次に、時間依存密度行列繰り込み群法の計算例を示します。拡張ハバードモデルに対する計算で、ハミルトニアンのパラメータは、 $U = 10t$ 、 $V = 2T$ です。

3.2.1 パラメータの設定

```

パラメータ設定ファイルは以下の通りです。 # Choose DMRG calculation
[] Dynamical DMRG
[*] Time dependent DMRG
[] Static DMRG
# Choose DMRG algorism
[*] infinite
[] infinite + finite
[] finite

(number of sweep) = 0

[] Taking backup

# Dynamical DMRG parameters
# DMRG parameters
(DMRG truncation number) = 100

# system
(number of sites) = 10
(number of phonon) = 1
(temperature) = 0.0

```

```
# Hamiltonian
[] electron system only
# extended Hubbard model
(on-site Coulomb) = 10.0
(N.N. Coulomb) = 2.0

# phonon
(phonon frequency)=0.0

# Holstein type EP interaction
(Holstein EP constant) = 0.0

# Peierls type EP interaction
(Peierls EP constant) = 0.0

# parameters for energy range
(lower bound) = 6.0
(upper bound) = 9.0
(energy length) = 3.0
(number of parallelization) = 1
(number of points) = 31

# other parameters
(half width of delta function) = 0.5
!(initialize) = 1
(number of sampling) = 1
(truncation number of Lanczos) = 500
(truncation number of polynomial) = 1000
(iteration of polynomial expansion) = 1

# parameters for time dependent DDMRG
(delay time of pump laser) = 5
(half width of pump laser) = 2
!(irradiating laser time length) = 13
(irradiating laser time step) = 0.1
```

```
!(relaxation time length) = 100
(relaxation time step) = 1
```

3.2.2 計算結果

この計算の結果は以下の通りです。(一部省略)

```
number of vector parallelization: 4
matrix parallelization: 2 x 2
Temp/t= 0.0000
U/t=10.000 V/t= 2.000 omega/t= 0.000 gamma/t= 0.500
g/t= 0.000 g2/t= 0.000 alpha/t= 0.000
mts= 100
site= 10 pseudosite= 10 up= 5 down= 5
nph= 1
=====
Renormalization of  $c_{\{i,\sigma\}}^{\{+\}}$  and  $a_{\{i+1/2\}}^{\{+\}}$ 
superblock= 2(pseudo-sites)+2(sites) : lattice= 4(sites)
electron number= 4 : up= 2 : down= 2
(superblock dimension)= 36
myid_ene= 0 (elapsed time in "make..." )= 0.000034(sec.)
myid_ene= 0 (elapsed time in "sblock+preA" )= 0.000802(sec.)
eigenvalues, min: -11.11187147507978 , max: 12.17033422413115
myid_ene= 0 (elapsed time in "LANCZOS" )= 0.003347(sec.)
(GS energy Eg)= -11.1118716451 (Eg/site)= -2.7779679113
(Lanczos step)= 21
(norm of the wave function)= 1.000000000000
myid_ene= 0 (elapsed time in "t-state ")= 0.007116(sec.)
myid_ene= 0 (elapsed time in "curretstress1-2" )= 0.000205(sec.)
```

(中略)

```
Renormalization of  $c_{\{i,\sigma\}}^{\{+\}}$  and  $a_{\{i+1/2\}}^{\{+\}}$ 
```

```

superblock= 8(pseudo-sites)+2(sites) : lattice= 10(sites)
electron number= 10 : up= 5 : down= 5
(superblock dimension)= 16272
myid_ene= 0 (elapsed time in "make..." )= 0.000608(sec.)
myid_ene= 0 (elapsed time in "sblock+preA" )= 0.004364(sec.)
eigenvalues, min: -28.05098629570765 , max: 31.50993507666762
myid_ene= 0 (elapsed time in "LANCZOS" )= 0.115585(sec.)
(GS energy Eg)= -28.0511273400 (Eg/site)= -2.8051127340
(Lanczos step)= 73
(norm of the wave function)= 1.000000000000
myid_ene= 0 (elapsed time in "t-state ")= 0.322845(sec.)
myid_ene= 0 (elapsed time in "curretstress1-2" )= 0.001739(sec.)
Time W.F. norm. Energy < n_iupn_idw > < b_i ^ + b_i > < S_i ^ z S_{i+1} ^ z >
0.1000 1.00000000 -28.02460689 0.33517120 0.00000000 -3.04069550 ave.
0.2000 1.00000000 -28.03359383 0.33613919 0.00000000 -3.03999652 ave.
0.3000 1.00000000 -28.00556301 0.33596371 0.00000000 -3.03899357 ave.
0.4000 1.00000000 -27.92163695 0.34274306 0.00000000 -3.03079302 ave.
0.5000 1.00000000 -27.87191946 0.35916026 0.00000000 -3.01406900 ave.
0.6000 1.00000000 -27.87177093 0.36928243 0.00000000 -3.00436437 ave.
0.7000 1.00000000 -27.75296258 0.36711548 0.00000000 -3.00793413 ave.
0.8000 1.00000000 -27.45831189 0.38195145 0.00000000 -2.99803689 ave.
0.9000 1.00000000 -27.24609061 0.43325534 0.00000000 -2.95465620 ave.
1.0000 1.00000000 -27.24179495 0.48076887 0.00000000 -2.91082596 ave.
1.1000 1.00000000 -27.06041983 0.48419259 0.00000000 -2.90129852 ave.
1.2000 1.00000000 -26.36975894 0.49716833 0.00000000 -2.87792948 ave.
1.3000 1.00000000 -25.66371287 0.60116430 0.00000000 -2.77086189 ave.
1.4000 1.00000000 -25.52669559 0.74178291 0.00000000 -2.63570398 ave.
1.5000 1.00000000 -25.43696008 0.78365804 0.00000000 -2.59714190 ave.
1.6000 1.00000000 -24.35902379 0.76259472 0.00000000 -2.62472457 ave.
1.7000 1.00000000 -22.69320396 0.88673241 0.00000000 -2.52538747 ave.
1.8000 1.00000000 -21.97968755 1.16299509 0.00000000 -2.27825112 ave.
1.9000 1.00000000 -22.03456564 1.31779334 0.00000000 -2.12182190 ave.
2.0000 1.00000000 -21.12287973 1.26010360 0.00000000 -2.14211446 ave.
2.1000 1.00000000 -18.62081640 1.32177730 0.00000000 -2.05656748 ave.
2.2000 1.00000000 -16.89664926 1.68642978 0.00000000 -1.72653593 ave.
2.3000 1.00000000 -16.70957956 1.97219722 0.00000000 -1.48491896 ave.

```

2.4000 1.00000000 -16.50438852 1.87677605 0.00000000 -1.57643277 ave.
2.5000 1.00000000 -14.63158314 1.74865667 0.00000000 -1.70891656 ave.
2.6000 1.00000000 -12.80299165 2.04589281 0.00000000 -1.47373397 ave.
2.7000 1.00000000 -12.49501934 2.37274398 0.00000000 -1.19504702 ave.
2.8000 1.00000000 -12.46823033 2.25460316 0.00000000 -1.26990280 ave.
2.9000 1.00000000 -12.14478300 1.91826489 0.00000000 -1.51861190 ave.
3.0000 1.00000000 -11.67984897 1.99867964 0.00000000 -1.45766790 ave.
3.1000 1.00000000 -12.48360008 2.29307917 0.00000000 -1.25495326 ave.
3.2000 1.00000000 -12.34135057 2.20608494 0.00000000 -1.33019475 ave.
3.3000 1.00000000 -12.50410110 1.80778102 0.00000000 -1.62045351 ave.
3.4000 1.00000000 -12.22732136 1.63501245 0.00000000 -1.75710471 ave.
3.5000 1.00000000 -13.43494970 1.93306825 0.00000000 -1.55138416 ave.
3.6000 1.00000000 -13.68840945 2.08674565 0.00000000 -1.44382850 ave.
3.7000 1.00000000 -13.55861417 1.93314798 0.00000000 -1.53796715 ave.
3.8000 1.00000000 -13.31724851 1.62440233 0.00000000 -1.74011051 ave.
3.9000 1.00000000 -11.51265575 1.77351663 0.00000000 -1.63413325 ave.
4.0000 1.00000000 -11.57683085 2.19153427 0.00000000 -1.33929444 ave.
4.1000 1.00000000 -10.79389355 2.36182789 0.00000000 -1.21420549 ave.
4.2000 1.00000000 -11.40512645 2.16588381 0.00000000 -1.33877537 ave.
4.3000 1.00000000 -9.26940407 2.00003222 0.00000000 -1.46244569 ave.
4.4000 1.00000000 -7.98322395 2.43093014 0.00000000 -1.17651563 ave.
4.5000 1.00000000 -7.58137555 2.73061538 0.00000000 -0.97582051 ave.
4.6000 1.00000000 -7.50584151 2.68273370 0.00000000 -0.99162401 ave.
4.7000 1.00000000 -7.53543756 2.34738381 0.00000000 -1.19134994 ave.
4.8000 1.00000000 -5.85722871 2.51958661 0.00000000 -1.07471623 ave.
4.9000 1.00000000 -6.65338545 2.86685384 0.00000000 -0.86637534 ave.
5.0000 1.00000000 -5.91293686 2.90684469 0.00000000 -0.83069965 ave.
5.1000 1.00000000 -6.61284481 2.63376531 0.00000000 -0.97194923 ave.
5.2000 1.00000000 -5.26516676 2.48828607 0.00000000 -1.07131062 ave.
5.3000 1.00000000 -5.74833187 2.81167949 0.00000000 -0.88101363 ave.
5.4000 1.00000000 -5.74666549 2.97567988 0.00000000 -0.77456052 ave.
5.5000 1.00000000 -5.79724694 2.86251993 0.00000000 -0.81805604 ave.
5.6000 1.00000000 -5.54266766 2.56382289 0.00000000 -0.96769993 ave.
5.7000 1.00000000 -4.55858121 2.69803396 0.00000000 -0.89334975 ave.
5.8000 1.00000000 -5.44603352 2.96395181 0.00000000 -0.74212285 ave.
5.9000 1.00000000 -5.23529240 2.97508779 0.00000000 -0.72966372 ave.

6.0000 1.00000000 -5.33020454 2.71380695 0.00000000 -0.87043491 ave.
6.1000 1.00000000 -4.06524202 2.61963801 0.00000000 -0.91570057 ave.
6.2000 1.00000000 -4.57810650 2.86298442 0.00000000 -0.77350462 ave.
6.3000 1.00000000 -4.91148128 2.98495760 0.00000000 -0.70699495 ave.
6.4000 1.00000000 -4.91973493 2.85163505 0.00000000 -0.78665097 ave.
6.5000 1.00000000 -4.13478125 2.64265405 0.00000000 -0.89953837 ave.
6.6000 1.00000000 -3.56489091 2.73890591 0.00000000 -0.83246280 ave.
6.7000 1.00000000 -4.25964835 2.92220219 0.00000000 -0.73729080 ave.
6.8000 1.00000000 -4.39878724 2.90781204 0.00000000 -0.76191689 ave.
6.9000 1.00000000 -4.02790444 2.71424798 0.00000000 -0.88185593 ave.
7.0000 1.00000000 -3.18617978 2.66306335 0.00000000 -0.90800023 ave.
7.1000 1.00000000 -3.65949918 2.81972332 0.00000000 -0.80497976 ave.
7.2000 1.00000000 -4.17924172 2.88375662 0.00000000 -0.75836043 ave.
7.3000 1.00000000 -4.08878001 2.75855402 0.00000000 -0.82423773 ave.
7.4000 1.00000000 -3.54905153 2.63167577 0.00000000 -0.88505253 ave.
7.5000 1.00000000 -3.55946641 2.67412830 0.00000000 -0.84687879 ave.
7.6000 1.00000000 -4.13043742 2.74295343 0.00000000 -0.80401126 ave.
7.7000 1.00000000 -4.28980956 2.69586762 0.00000000 -0.83373345 ave.
7.8000 1.00000000 -3.99515157 2.59951251 0.00000000 -0.88556770 ave.
7.9000 1.00000000 -3.81127023 2.59087988 0.00000000 -0.87372003 ave.
8.0000 1.00000000 -4.12444501 2.64233109 0.00000000 -0.82127778 ave.
8.1000 1.00000000 -4.40855184 2.64725098 0.00000000 -0.80151924 ave.
8.2000 1.00000000 -4.31827113 2.59283906 0.00000000 -0.82362086 ave.
8.3000 1.00000000 -4.05402600 2.56232137 0.00000000 -0.83471989 ave.
8.4000 1.00000000 -4.06208874 2.58249353 0.00000000 -0.81752348 ave.
8.5000 1.00000000 -4.27316054 2.59034464 0.00000000 -0.80969689 ave.
8.6000 1.00000000 -4.33283256 2.55730607 0.00000000 -0.82518863 ave.
8.7000 1.00000000 -4.17685750 2.53159138 0.00000000 -0.83082774 ave.
8.8000 1.00000000 -4.08621166 2.55011758 0.00000000 -0.80418485 ave.
8.9000 1.00000000 -4.18997481 2.57424373 0.00000000 -0.77551167 ave.
9.0000 1.00000000 -4.28836005 2.56526118 0.00000000 -0.77485619 ave.
9.1000 1.00000000 -4.24682317 2.54047175 0.00000000 -0.78920331 ave.
9.2000 1.00000000 -4.16804028 2.53241944 0.00000000 -0.79407785 ave.
9.3000 1.00000000 -4.18788012 2.53938033 0.00000000 -0.78880273 ave.
9.4000 1.00000000 -4.25819076 2.54285368 0.00000000 -0.78526719 ave.
9.5000 1.00000000 -4.27100298 2.54119942 0.00000000 -0.78635654 ave.

9.6000 1.00000000 -4.22957300 2.54506477 0.00000000 -0.78672757 ave.
9.7000 1.00000000 -4.21756014 2.55406234 0.00000000 -0.78599243 ave.
9.8000 1.00000000 -4.25097952 2.55685381 0.00000000 -0.78819465 ave.
9.9000 1.00000000 -4.27442761 2.55119063 0.00000000 -0.79231824 ave.
10.0000 1.00000000 -4.26312746 2.54581222 0.00000000 -0.79300907 ave.
10.1000 1.00000000 -4.24992262 2.54584677 0.00000000 -0.79073090 ave.
10.2000 1.00000000 -4.26041490 2.54665968 0.00000000 -0.79271604 ave.
10.3000 1.00000000 -4.27652800 2.54547838 0.00000000 -0.80024521 ave.
10.4000 1.00000000 -4.27800047 2.54760159 0.00000000 -0.80669413 ave.
10.5000 1.00000000 -4.27101703 2.55416511 0.00000000 -0.80801661 ave.
10.6000 1.00000000 -4.27051868 2.55604760 0.00000000 -0.80623585 ave.
10.7000 1.00000000 -4.27648259 2.54734591 0.00000000 -0.80582464 ave.
10.8000 1.00000000 -4.27987016 2.53624735 0.00000000 -0.80605313 ave.
10.9000 1.00000000 -4.27781783 2.53542701 0.00000000 -0.80178547 ave.
11.0000 1.00000000 -4.27595332 2.54588378 0.00000000 -0.79469337 ave.
11.1000 1.00000000 -4.27856110 2.55689972 0.00000000 -0.79165976 ave.
11.2000 1.00000000 -4.28201561 2.55967115 0.00000000 -0.79460232 ave.
11.3000 1.00000000 -4.28211127 2.55513605 0.00000000 -0.80085043 ave.
11.4000 1.00000000 -4.28132300 2.54954517 0.00000000 -0.80552666 ave.
11.5000 1.00000000 -4.28305028 2.54629014 0.00000000 -0.80512362 ave.
11.6000 1.00000000 -4.28576328 2.54510034 0.00000000 -0.80130996 ave.
11.7000 1.00000000 -4.28664770 2.54504208 0.00000000 -0.79715003 ave.
11.8000 1.00000000 -4.28638512 2.54576782 0.00000000 -0.79463000 ave.
11.9000 1.00000000 -4.28718274 2.54597787 0.00000000 -0.79529887 ave.
12.0000 1.00000000 -4.28858565 2.54366430 0.00000000 -0.79847974 ave.
12.1000 1.00000000 -4.28918520 2.54017301 0.00000000 -0.79992331 ave.
12.2000 1.00000000 -4.28918123 2.53918224 0.00000000 -0.79655323 ave.
12.3000 1.00000000 -4.28948119 2.54121171 0.00000000 -0.78921230 ave.
12.4000 1.00000000 -4.29013551 2.54281458 0.00000000 -0.78012902 ave.
12.5000 1.00000000 -4.29055283 2.54168836 0.00000000 -0.77386989 ave.
12.6000 1.00000000 -4.29059842 2.53932170 0.00000000 -0.77537585 ave.
12.7000 1.00000000 -4.29065685 2.53838522 0.00000000 -0.78311523 ave.
12.8000 1.00000000 -4.29091715 2.54120737 0.00000000 -0.78944662 ave.
12.9000 1.00000000 -4.29116484 2.54856595 0.00000000 -0.78728692 ave.
13.0000 1.00000000 -4.29122615 2.55697059 0.00000000 -0.77792489 ave.
13.0000 1.00000000 -4.29122615 2.55697059 0.00000000 -0.77792489

14.0000	1.00000000	-4.29122615	2.54072808	0.00000000	-0.76752877
15.0000	1.00000000	-4.29122615	2.53348351	0.00000000	-0.76808617
16.0000	1.00000000	-4.29122615	2.52850370	0.00000000	-0.75146037
17.0000	1.00000000	-4.29122615	2.53064575	0.00000000	-0.75595993
18.0000	1.00000000	-4.29122615	2.52966925	0.00000000	-0.75096081
19.0000	1.00000000	-4.29122615	2.52856892	0.00000000	-0.74144136
20.0000	1.00000000	-4.29122615	2.51681426	0.00000000	-0.75475682
21.0000	1.00000000	-4.29122615	2.52364587	0.00000000	-0.74093059
22.0000	1.00000000	-4.29122615	2.51597859	0.00000000	-0.74127120
23.0000	1.00000000	-4.29122615	2.50611396	0.00000000	-0.74220974
24.0000	1.00000000	-4.29122615	2.52083602	0.00000000	-0.72549673
25.0000	1.00000000	-4.29122615	2.51282269	0.00000000	-0.72429062
26.0000	1.00000000	-4.29122615	2.51857522	0.00000000	-0.72210642
27.0000	1.00000000	-4.29122615	2.50356570	0.00000000	-0.73656128
28.0000	1.00000000	-4.29122615	2.50995576	0.00000000	-0.72933745
29.0000	1.00000000	-4.29122615	2.51832565	0.00000000	-0.72230381
30.0000	1.00000000	-4.29122615	2.51795287	0.00000000	-0.71339777
31.0000	1.00000000	-4.29122615	2.50416647	0.00000000	-0.71724973
32.0000	1.00000000	-4.29122615	2.50243070	0.00000000	-0.72346537
33.0000	1.00000000	-4.29122615	2.50876102	0.00000000	-0.73579510
34.0000	1.00000000	-4.29122615	2.50620835	0.00000000	-0.71691242
35.0000	1.00000000	-4.29122615	2.50759036	0.00000000	-0.71305667
36.0000	1.00000000	-4.29122615	2.51378176	0.00000000	-0.71183636
37.0000	1.00000000	-4.29122615	2.50325091	0.00000000	-0.72251545
38.0000	1.00000000	-4.29122615	2.50332226	0.00000000	-0.72716270
39.0000	1.00000000	-4.29122615	2.50580101	0.00000000	-0.74265057
40.0000	1.00000000	-4.29122615	2.49795888	0.00000000	-0.73719663
41.0000	1.00000000	-4.29122615	2.49669491	0.00000000	-0.71536582
42.0000	1.00000000	-4.29122615	2.50770755	0.00000000	-0.71146186
43.0000	1.00000000	-4.29122615	2.49671148	0.00000000	-0.71955895
44.0000	1.00000000	-4.29122615	2.49575926	0.00000000	-0.72621537
45.0000	1.00000000	-4.29122615	2.50549470	0.00000000	-0.72922300
46.0000	1.00000000	-4.29122615	2.49722372	0.00000000	-0.72691993
47.0000	1.00000000	-4.29122615	2.50088459	0.00000000	-0.70708105
48.0000	1.00000000	-4.29122615	2.50052076	0.00000000	-0.71513654
49.0000	1.00000000	-4.29122615	2.49546047	0.00000000	-0.70229606

50.0000 1.00000000 -4.29122615 2.49672455 0.00000000 -0.70051131
51.0000 1.00000000 -4.29122615 2.49129785 0.00000000 -0.71196137
52.0000 1.00000000 -4.29122615 2.49928476 0.00000000 -0.70915070
53.0000 1.00000000 -4.29122615 2.50313410 0.00000000 -0.69978248
54.0000 1.00000000 -4.29122615 2.49034053 0.00000000 -0.71012610
55.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48748984 0.00000000 -0.71657718
56.0000 1.00000000 -4.29122615 2.49988487 0.00000000 -0.71414400
57.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48935496 0.00000000 -0.70329741
58.0000 1.00000000 -4.29122615 2.50311251 0.00000000 -0.70395618
59.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48279579 0.00000000 -0.71528793
60.0000 1.00000000 -4.29122615 2.49541022 0.00000000 -0.70513317
61.0000 1.00000000 -4.29122615 2.49414539 0.00000000 -0.72597588
62.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48523762 0.00000000 -0.70274801
63.0000 1.00000000 -4.29122615 2.49441521 0.00000000 -0.70543146
64.0000 1.00000000 -4.29122615 2.49493048 0.00000000 -0.70883992
65.0000 1.00000000 -4.29122615 2.49708315 0.00000000 -0.71961961
66.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48628075 0.00000000 -0.72958791
67.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48815552 0.00000000 -0.70985642
68.0000 1.00000000 -4.29122615 2.49341803 0.00000000 -0.72694398
69.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48892488 0.00000000 -0.72077001
70.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48865152 0.00000000 -0.71847581
71.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48436344 0.00000000 -0.71183311
72.0000 1.00000000 -4.29122615 2.49967100 0.00000000 -0.70115936
73.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48030082 0.00000000 -0.72104162
74.0000 1.00000000 -4.29122615 2.47398806 0.00000000 -0.72654850
75.0000 1.00000000 -4.29122615 2.49190045 0.00000000 -0.70840220
76.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48483262 0.00000000 -0.71552226
77.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48836750 0.00000000 -0.72755299
78.0000 1.00000000 -4.29122615 2.49055899 0.00000000 -0.72628699
79.0000 1.00000000 -4.29122615 2.47978288 0.00000000 -0.74685366
80.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48484023 0.00000000 -0.72725575
81.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48508595 0.00000000 -0.72829308
82.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48019039 0.00000000 -0.73126133
83.0000 1.00000000 -4.29122615 2.49245088 0.00000000 -0.71469625
84.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48463669 0.00000000 -0.73264253
85.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48659880 0.00000000 -0.72307326

```

86.0000 1.00000000 -4.29122615 2.50024707 0.00000000 -0.71083712
87.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48306424 0.00000000 -0.73104700
88.0000 1.00000000 -4.29122615 2.49053790 0.00000000 -0.72809564
89.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48696658 0.00000000 -0.72370621
90.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48640440 0.00000000 -0.72380162
91.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48183093 0.00000000 -0.72201671
92.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48312277 0.00000000 -0.72506503
93.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48279774 0.00000000 -0.72036694
94.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48020409 0.00000000 -0.73209258
95.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48270205 0.00000000 -0.73110695
96.0000 1.00000000 -4.29122615 2.47790906 0.00000000 -0.73896824
97.0000 1.00000000 -4.29122615 2.47683559 0.00000000 -0.73209294
98.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48495806 0.00000000 -0.71415851
99.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48007658 0.00000000 -0.71941729
100.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48395078 0.00000000 -0.71786697
101.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48334913 0.00000000 -0.72157950
102.0000 1.00000000 -4.29122615 2.47797842 0.00000000 -0.71840987
103.0000 1.00000000 -4.29122615 2.47961454 0.00000000 -0.71327468
104.0000 1.00000000 -4.29122615 2.47910903 0.00000000 -0.73133861
105.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48361633 0.00000000 -0.73342544
106.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48627937 0.00000000 -0.72527887
107.0000 1.00000000 -4.29122615 2.47888433 0.00000000 -0.72556864
108.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48026031 0.00000000 -0.71965443
109.0000 1.00000000 -4.29122615 2.47749279 0.00000000 -0.73052819
110.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48132212 0.00000000 -0.73267660
111.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48191112 0.00000000 -0.73257733
112.0000 1.00000000 -4.29122615 2.48543999 0.00000000 -0.72477127
113.0000 1.00000000 -4.29122615 2.47945698 0.00000000 -0.72579986

```

myid= 0 , elapsed time: 87.02605509757996 (sec.)

結果は、

Time W.F. norm. Energy $\langle n_{iupn} \rangle$ $\langle b_i^\dagger + b_i \rangle$ $\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle$
と書かれた部分以下に、それぞれ、時間、状態ベクトルのノルム、エネルギー、2
重占有サイトの期待値、フォノン数の期待値、最近接サイト間のスピン相関関数
の順に与えられています。ほかの部分は、先に示しました動的密度行列繰り込み

群法による計算とほぼ共通ですので、省略いたします。

3.3 今後のバージョンアップの予定と不具合・要望等

近々実施する本アプリのバージョンアップとして予定しております主なものとして、

- ・非線形光学応答の計算
- ・スピン・フラストレート系の計算

への対応を予定しております。また、これらのほかに計算したい量やモデルなどございましたら、開発者までご連絡いただけますよう、よろしくお願い致します。

また、本アプリにおきまして不具合などございましたら、開発者までご連絡いただけますよう、よろしくお願い致します。