**MateriApps LIVE! を使ったDMRGの計算例**

**執筆： MateriApps 開発チーム (18/10/4)**

**1. はじめに**

ALPSは密度行列くりこみ群(DMRG)や厳密対角化(ED)、量子モンテカルロ(QMC)などの強相関系のための数値計算手法が実装されているライブラリ集です。チュートリアルが充実しているため、これらの手法に関わってこなかった方でも比較的簡単に実行できるようになっています。

ここではMateriApps LIVE! (MAL)を用いて、DMRGの正方格子上のSpin1/2 Heisenberg模型への適用を紹介します。MALとは様々な物性科学アプリがおさめられているLive Linux システムのことです。MALを使うことによってインストール作業を行わなくてもALPSを試してみることができます。詳細な使用法についてはMALのWikiが参考になります。使用したMALのバージョンはver. 2.0です。

**2. 実行方法**

それでは、実際にALPSを動かしてみたいと思います。System toolsからLXTerminalを起動し、HOMEディレクトリ下にサンプルディレクトリをコピーし移動します。

mkdir alps\_dmrg

cd alps\_dmrg

続いて、実行用のPythonスクリプトを用意します。wgetを使ってスクリプトfrustrated\_dmrg.pyをダウンロードして、テストディレクトリalps\_dmrgに持ってきてください。このスクリプトは[チュートリアルサイト](http://alps.comp-phys.org/mediawiki/index.php/ALPS_2_Tutorials:MC-08_Quantum_Phase_Transition/ja)にあるtutorial8a.pyをもとに作っています。そのため、スクリプトの説明はチュートリアルサイトを参考にしてください。

wget https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/wp-content/uploads/sites/3/2018/10/frustrated\_dmrg.py

最後に下記のコマンドを打つと、先ほどダウンロードしたスクリプトを用いた計算が実行されます。

python frustrated\_dmrg.py > log

だいたい数分程度でプログラムが終了すると思います。

**3. 実行結果**

スクリプトを実行するとlogに結果が出力されます。コマンドライン上で

tail log

と打つと

MAXSTATES: 100.0 Energy : -11.2202752135

MAXSTATES: 100.0 Truncation error : 0.000743459180131

MAXSTATES: 150.0 Energy : -11.2284831995

MAXSTATES: 150.0 Truncation error : 0.000323024895684

MAXSTATES: 50.0 Energy : -11.1759389244

MAXSTATES: 50.0 Truncation error : 0.00129111787183

MAXSTATES: 200.0 Energy : -11.2284832026

MAXSTATES: 200.0 Truncation error : 9.02242305509e-05

と出力されます。ALPSのEDを用いたエネルギー結果は-11.2284832084です。掃引時に残しておく状態数の最大値である”MAXSTATES”が大きくなると、”Truncation error”が小さくなっていき、DMRGのエネルギーがEDの結果に近づいて行っていることがわかります。

**4. 終わりに**

ここではALPSを用いたDMRG計算の例を紹介しました。QMCやEDを用いた計算方法や他のDMRGの計算例については、ALPSのレビュー記事や[チュートリアルサイト](http://alps.comp-phys.org/mediawiki/index.php/ALPS_2_Tutorials:Overview/ja)を参考にしてください。