

汎用量子格子モデルソルバー HPhi の利用方法・シミュレーション事例について

Introduction of usage and simulation examples for HPhi: open source software for a wide range of quantum lattice models

東京大学 物性研究所^A, 東京大学 大学院工学系研究科^B, 東京大学 大学院理学系研究科^C

吉見一慶^A, 河村光晶^A, 川島直輝^A, 山地洋平^B, 三澤貴宏^A, 藤堂眞治^{A,C}



HPhi 紹介ページ (MateriApps)

1. HPhi とは？

簡易概要

並列計算機に対応した数値厳密対角化法による有効モデルソルバーパッケージ。広汎な多体量子系の有効モデルの基底状態及び低励起状態の波動関数を並列計算によって求めます。ランチョス法^[1]による基底状態計算、熱的純粋量子状態を利用した比熱・帯磁率の温度依存性計算^[2]が可能です。

ライセンス：GNU GPL version3 (オープンソースソフトウェアとして ver.0.3 公開中)

[1] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. 66, 763–840 (1994).

[2] S. Sugiura, A. Shimizu, Phys. Rev. Lett. 108, 240401 (2012).

開発の歴史

量子格子モデルの数値厳密対角化法は、量子多体問題、とくに強相関電子系の数値的研究を行う際の最も基本的な手法です。西森秀稔教授(東京工業大学)が開発された先駆的な量子スピンモデルに対する数値対角化パッケージ TITPACK^[1] は、その公開以来 20 年以上にわたって幅広いユーザーに利用されてきました。HPhi は TITPACK に代わる並列計算機対応数値対角化パッケージを目指して開発されました。遍歴電子系を含む幅広い量子格子モデルに柔軟に適用でき、さらに高並列に対応するソフトウェアです。2015 年度東大物性研ソフトウェア開発・高度化支援^[2] を受け開発を進めています。

[1] http://www.stat.phys.titech.ac.jp/~nishimori/titpack2_new/index-e.html

[2] <http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/rsayh2/softwea-dev>

3. HPhi でできること

3-1. 基本機能

- ・解析手法 : 全対角化、Lanczos 法による厳密対角化、TPQ を利用した有限温度物理量計算
- ・計算可能な系 : 一般スピン系、Hubbard 模型、近藤格子模型
- ・計算モード : スタンダードモード…模型およびパラメータを指定し計算するモード
エキスパートモード…一般一体・二体相互作用を指定し計算するモード
一般一体相互作用: $t_{i\sigma j\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}$
一般二体相互作用: $I_{i\sigma_1 j\sigma_2 k\sigma_3 l\sigma_4} c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{l\sigma_4}$
- ・求められる物理量 : エネルギー、エネルギーの 2 乗値、一体 Green 関数、二体 Green 関数

3-2. スタンダードモード利用イメージ

ここでは、 $S=1/2$ の 1 次元 HeisenbergChain を例に説明します。

① 入力ファイルの作成

以下のパラメータをファイルで指定します(テキスト形式)。

L=16 格子のサイズ
model="Spin" 対象系の選択 (Spin, SpinGC, Hubbard, HubbardGC, Kondo, KondoGC)
method="Lanczos" 計算手法の選択 (Lanczos, TPQ, FullDiag)
lattice="chain lattice" 格子の設定 (Chain, Square, Triangular, Honeycomb)
J=1.0 相互作用の種類・強さ
2Sz=0 Sz の指定 (カノニカルの場合のみ利用)
2S=1 S の指定

② 計算実行

以下のコマンドを入力すると計算が開始されます。

MPI を使用しない場合 : パス /HPhi -s 入力ファイル

MPI を使用する場合 : mpirun -np xx パス /HPhi -s 入力ファイル (xx はプロセス数)

③ 結果出力・計算終了

計算手法に応じ、以下の結果がファイル出力されます。

Lanczos : 固有エネルギー、一体 Green 関数、二体 Green 関数

TPQ : 逆温度、 $\langle H \rangle$ 、 $\langle H^2 \rangle$ 、一体 Green 関数、二体 Green 関数など (指定間隔毎に出力)

FullDiag : エネルギー、ダブロン、 $\langle S^2 \rangle$ 、一体 Green 関数、二体 Green 関数など (固有値毎に出力)

3-3. エキスパートモード利用イメージ

① 入力ファイルの作成 (マニュアルにフォーマットに関する詳細説明あり)

キーワード - ファイル名指定ファイル : namelist.def

モデルを指定するパラメータファイル : zlnterAll.def, zTrans.def, zlocspn.def

計算条件を指定するパラメータファイル : modpara.def, calcmod.def

相関関数を指定するパラメータファイル : greenone.def, greentwo.def

zlnterAll.def, zTrans.def で一般的な相互作用を指定可能→汎用的なモデルへの適用が可能。

zlocspn.def で遍歴 or 局在の選択と局在スピンの S の値を指定可能。

② 計算実行

以下のコマンドを入力すると計算が開始されます。

MPI を使用しない場合 : パス /HPhi -e namelist.def (namelist.def は任意のファイル名で OK)

MPI を使用する場合 : mpirun -np xx パス /HPhi -e namelist.def (xx はプロセス数)

→計算出力はスタンダードモードと同様

2. HPhi を手に入れるには？

2-1. ダウンロード

GitHub でソースコード、マニュアルの zip ファイルのダウンロードが可能です。

URL: <https://github.com/QLMS/Hphi/releases>

2-2. コンパイル

make / cmake でのコンパイルが可能です。動作環境に応じ、

オプション : **sekirei**, **maki**, intel, gcc, gcc-mac

を選択しコンパイルします。なお、HPhi のコンパイル・使用には次のものがが必要です。

・C コンパイラ (インテル、富士通、GNU など, OpenMP 必須)

・LAPACK ライブラリ (インテル MKL、富士通、ATLAS など)

・MPI ライブラリ (MPI 並列を行わない場合は必要ありません)

2-3. 動作環境

東京大学物性研究所スーパーコンピューターシステム B 「**sekirei**」、システム C 「**maki**」、

Linux PC + intel コンパイラ、Linux PC + gcc、Mac + gcc、Mac + intel コンパイラ、

ver.1.0 リリース後、物性研システム B にインストール予定 (2016 年 3 月末予定)

4. HPhi 計算例 (東大物性研スパコン システム B で計算実施)

システム B 概要

・fat node: 1node(40 cores) 1TB のメモリ : 2nodes まで使用可 → 2TB

・cpu node: 1node (24cores) 128GB のメモリ : 144nodes まで使用可 → 17TB

潤沢なメモリ : spin1/2 39sites, Hubbard 20sites 程度であれば計算可能。

・速度 : 32sites $S=1/2$ Kitaev 模型について 24OpenMP スレッド × 1, 4, 8, 16 MPI プロセスで計算実施
1Lanczos ステップあたり 16 プロセス 21.8s、8 プロセス 40.8s、4 プロセス 84.1s、1 プロセス 277.5s

4-1. カゴメ格子 ($S=1/2$)

計算手法 : Lanczos 法 ($Sz=0$ は 1 時間 35 分程度, fatnode: 1node の 40 スレッドで計算)

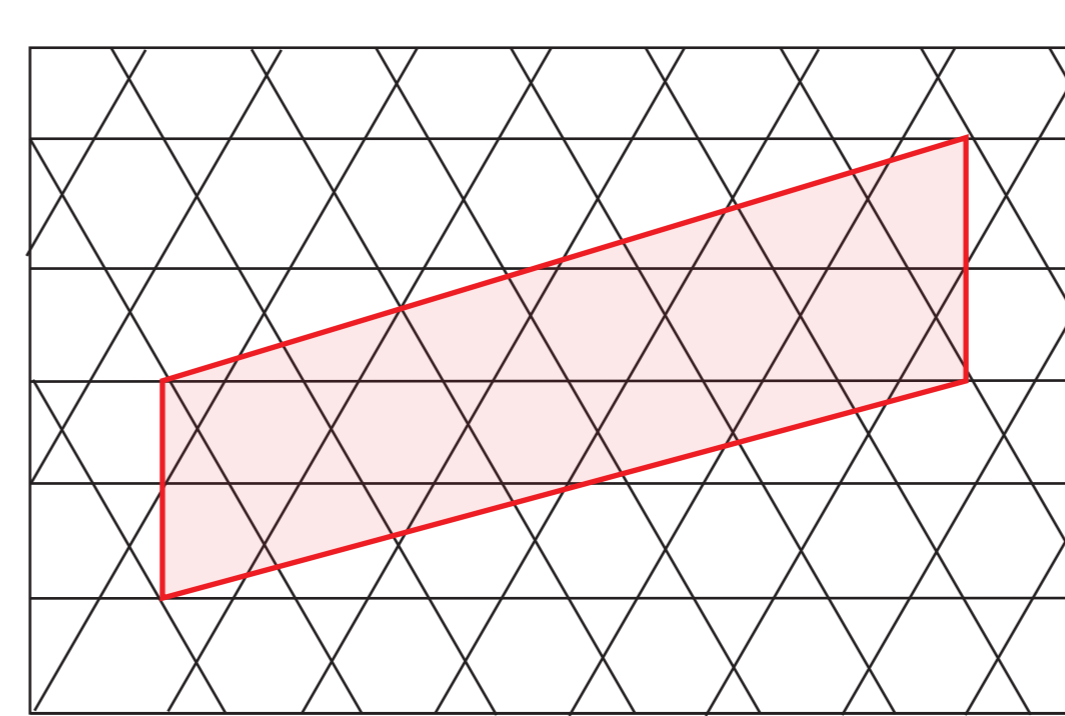
対象系 : スピンカノニカル

ハミルトニアン : $\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} JS_i \cdot S_j - H \sum_i S_i^z$ (パラメータは $J=1, N=30$)

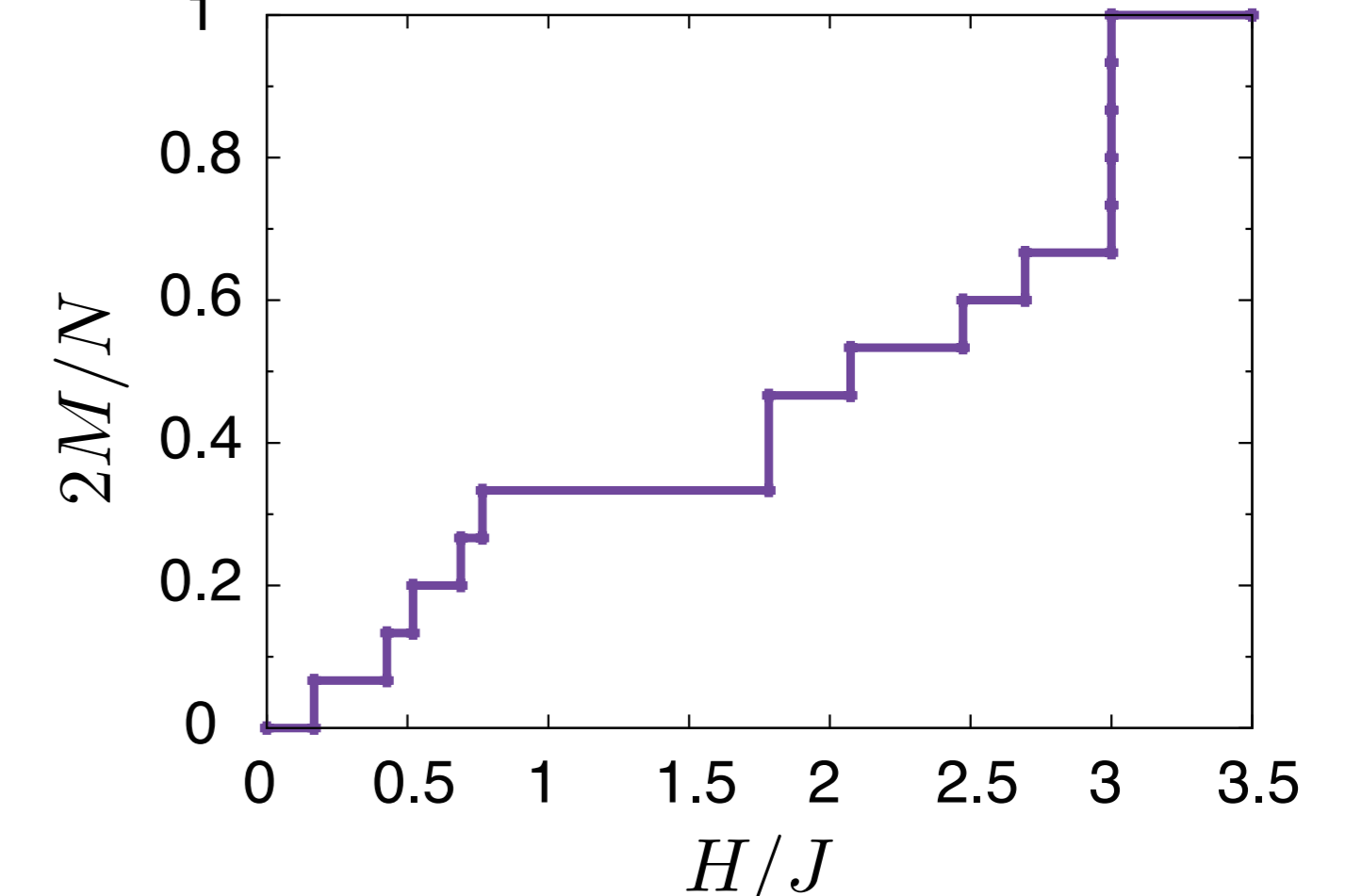
計算結果 : 基底エネルギー = -13.3768394247395 = -0.4458946475*N (N=30)

(H. Nakano, T. Sakai, JPSJ 80, 053704 (2011) の Table I, Fig.1 (g) と一致)

計算した模型 (N=30)



磁化曲線 (N=30)

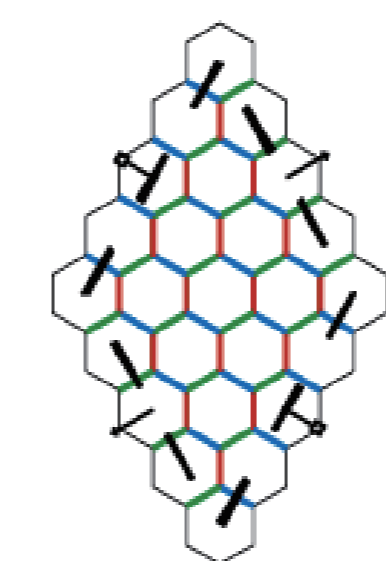


4-2. Kitaev 模型 ($S=1/2$) : 19pBF-5 領域 8 山地他 で発表予定

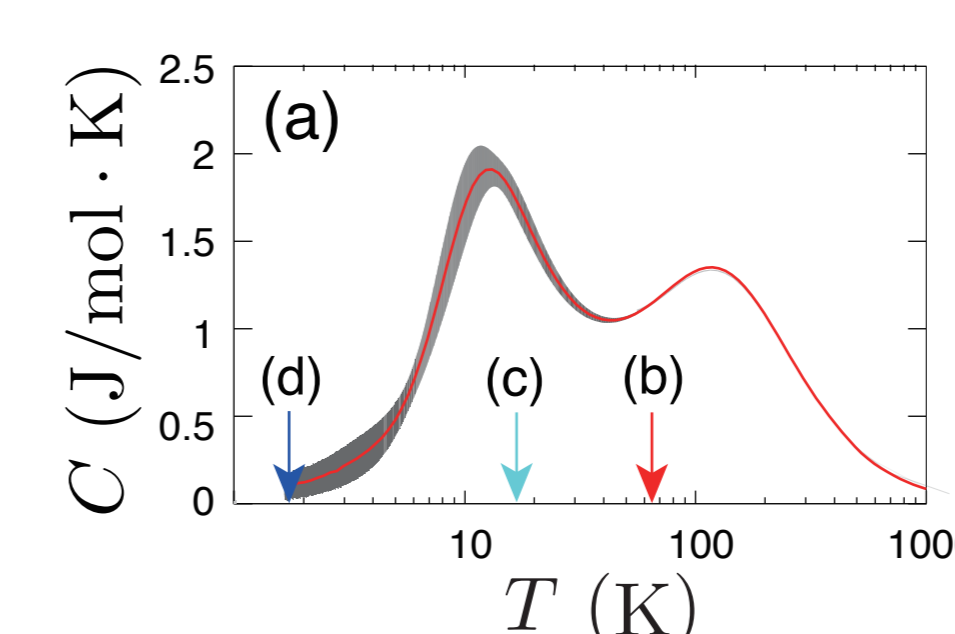
計算手法 : TPQ 法

対象系 : Na_2IrO_3 を対象にスピングランドカノニカル (32 サイト) で計算

ref.) Y. Yamaji, T. Suzuki, T. Yamada, S. Suga, N. Kawashima, and M. Imada, arXiv:1601.05512.



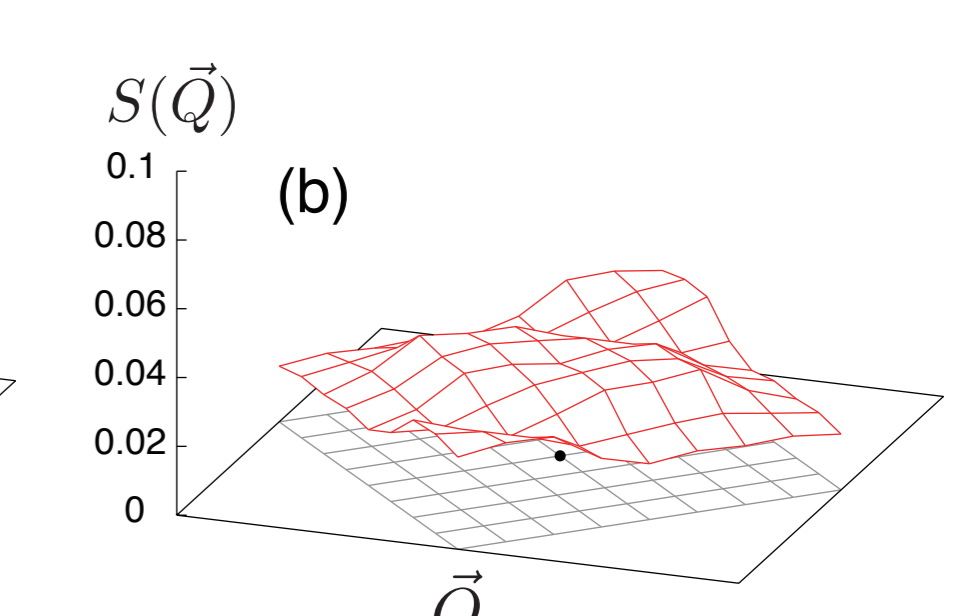
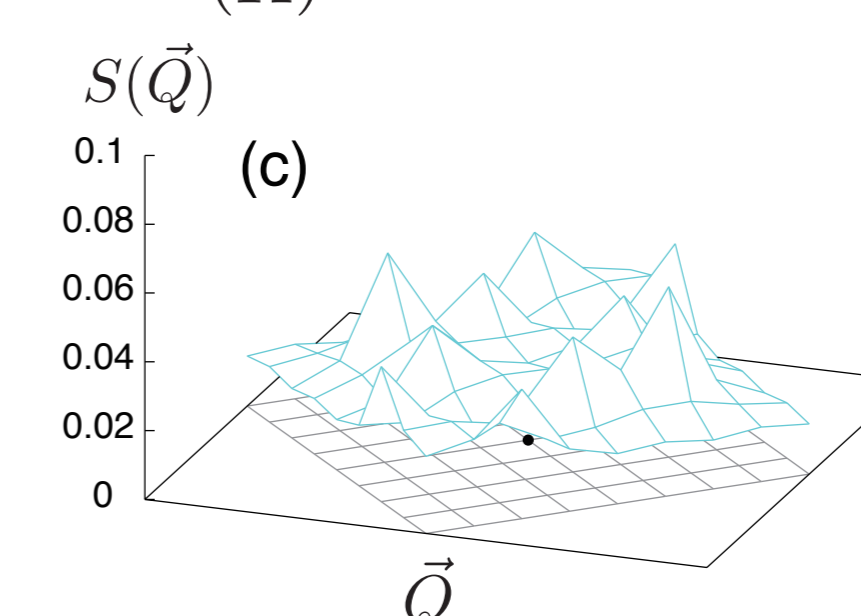
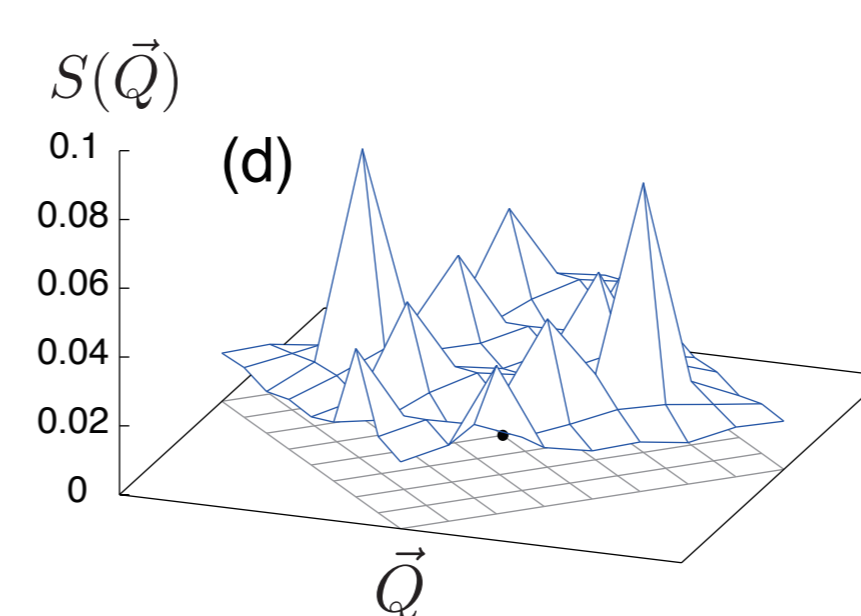
計算した模型



スピン構造因子を計算

$$S(\vec{Q}) = \frac{1}{N} \sum_{\gamma=x,y,z} \sum_{j=0}^{N-1} \langle S_0^{(\gamma)} S_j^{(\gamma)} \rangle \cos(\vec{Q} \cdot \vec{R}_j)$$

スピン液体 → 磁気秩序が発達



5. 今後の計画

2016 年 3 月末 : ver. 1.0 リリース ($S=1/2$ スピン系 : Honeycomb 格子等、一部モデルの計算を高速化)

今後追加予定の機能 : Lanczos 法を用いた線形応答係数計算、シフト型クリロフ理論への拡張