

有効模型ソルバー用オープンソースソフトウェア HΦの利用方法・使用事例の紹介

Introduction to HΦ: open source software for a wide range of quantum lattice models

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

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

Dep. of Applied Physics, Univ. of Tokyo^A, Dep. of Physics, Univ. of Tokyo^B, ISSP, Univ. of Tokyo^C

Y. Yamaji^A, T. Misawa^A, S. Todo^{B,C}, K. Yoshimi^C, M. Kawamura^C, N. Kawashima^C

<<HΦ公式ページへのアクセス方法>>

「MateriApps HPhi」で Google 検索

→ HΦ紹介ページのリンクからアクセス。

1. HΦの概要

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模型ソルバーパッケージ。広汎な多体量子系の有効模型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る。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。

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.0.1 公開中)

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

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

開発メンバー

山地洋平 (東京大学 大学院工学系研究科), 三澤貴宏 (東京大学 大学院工学系研究科),

藤堂眞治 (東京大学 大学院理学系研究科), 吉見一慶 (東京大学 物性研究所),

河村光晶 (東京大学 物性研究所), 川島直輝 (東京大学 物性研究所)

開発の歴史

量子格子模型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模型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。HΦ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模型に柔軟に適用でき、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>

2. HΦでできること

計算対象系

- スピン系
S=1/2 のスピン系の計算ができます (ver.0.2 で一般スピンへ対応予定)。
- 電子系
一般的な二体相互作用を取り扱うことが可能。
- 近藤格子模型
S=1/2 のスピン系と電子系を同時に取り扱うことができます。

計算対象模型

模型の選択は非常に柔軟に行え、電子生成消滅演算子で書けるあらゆる 1 体項と 2 体相互作用をユーザーは指定することができます。スピン系の場合は、下記の書き換えにより対応しています。

$$S_i^+ = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}, S_i^- = c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}, S_i^z = \frac{1}{2}(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow})$$

(*) 1, 2 次元の Heisenberg 模型、Kitaev 模型など特定のモデルに関してはスタンダードモードで事前に定義済み。相互作用の設定なども簡易に行うことが可能です。

手法

Lanczos 法, 熱的純粋量子状態, 完全対角化法

グランドカノニカル, Sz, 粒子数 (電子系・近藤格子模型) の指定によるカノニカル計算に対応。

求められる物理量

比熱, 磁化率, 磁化, 基底エネルギー, 自由エネルギー, 構造因子など

3. HΦを利用するには?

3-1. 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>

3-2. 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、HΦのコンパイル・使用には次のものが必須です。

・C コンパイラ (インテル、富士通、GNU など)

・LAPACK ライブラリ (インテル MKL、富士通 TCL、ATLAS など)

3-3. 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 リリース時に物性研システム B にインストール予定 (2016 年 2 月初旬予定)

3-4. 利用イメージ (スタンダードモード)

ここでは、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)

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。

パス/HPhi-s 入力ファイル

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)

4. HΦ計算例

4-1. Kitaev 模型

サンプル : samples/Standard/Kitaev

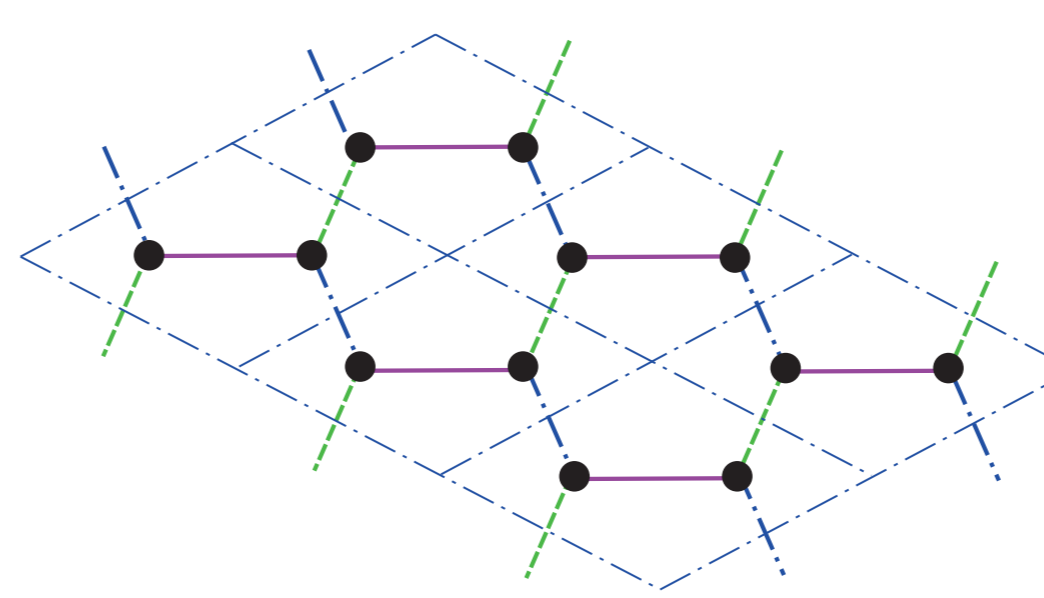
計算環境 : macbook air(2.2GHz, Intel Core7)、intel コンパイラ

計算手法 : TPQ 法 (run 4 回 × 2000 step/run)

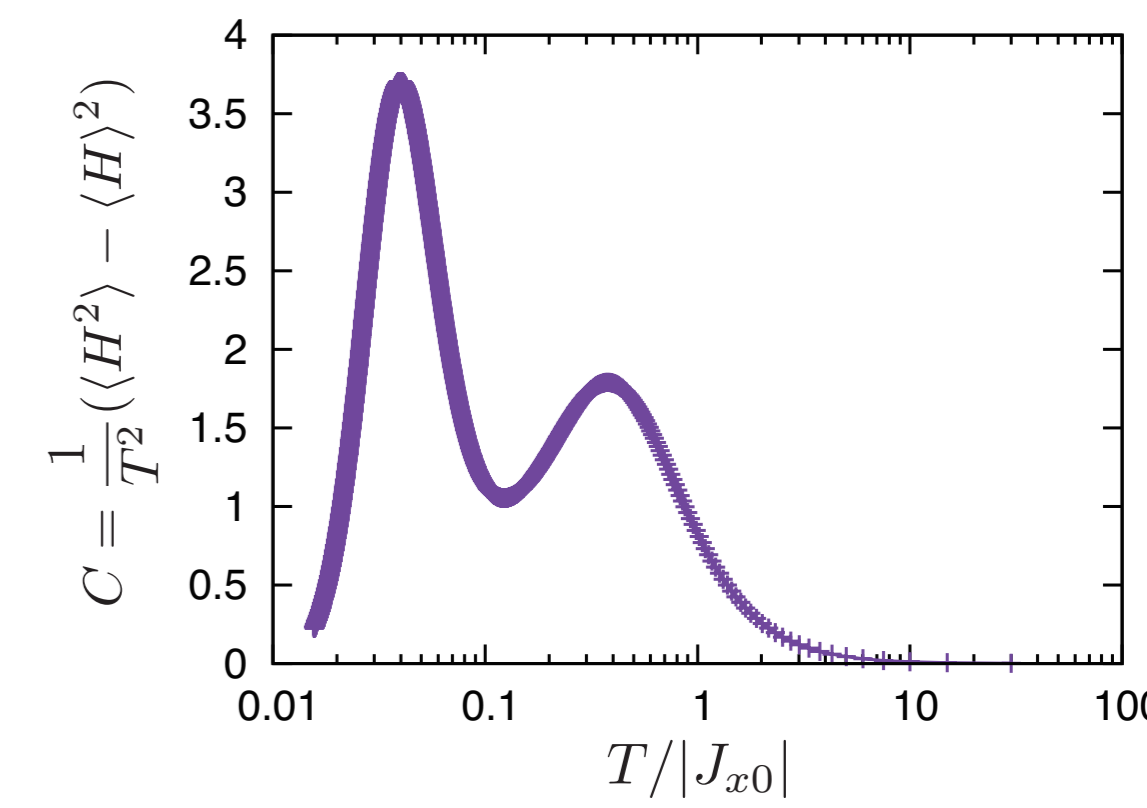
対象系 : スピングランドカノニカル

パラメータ : $J_{x0} = J_{y1} = J_{z2} = -1$

計算時間 : 112 s 程度 (OpenMP, 4 スレッド)



L=3, W=2 の Honeycomb 格子



SS_rand0.dat の計算結果 (gnuplot で加工)

4-2. カゴメ格子

サンプル : samples/Expert/Kagome (ver.0.2 で追加予定)

計算環境 : 東大物性研スパコン システム B (sekirei)

FAT ノードで 1TB (S=1/2 スピングランドカノニカルで 34 スピン程度まで計算可能)

計算手法 : Lanczos 法

対象系 : スピнкаノニカル

パラメータ : J = 1, N=30, Sz=0

計算時間 : Lanczos step 204 回 + CG 法

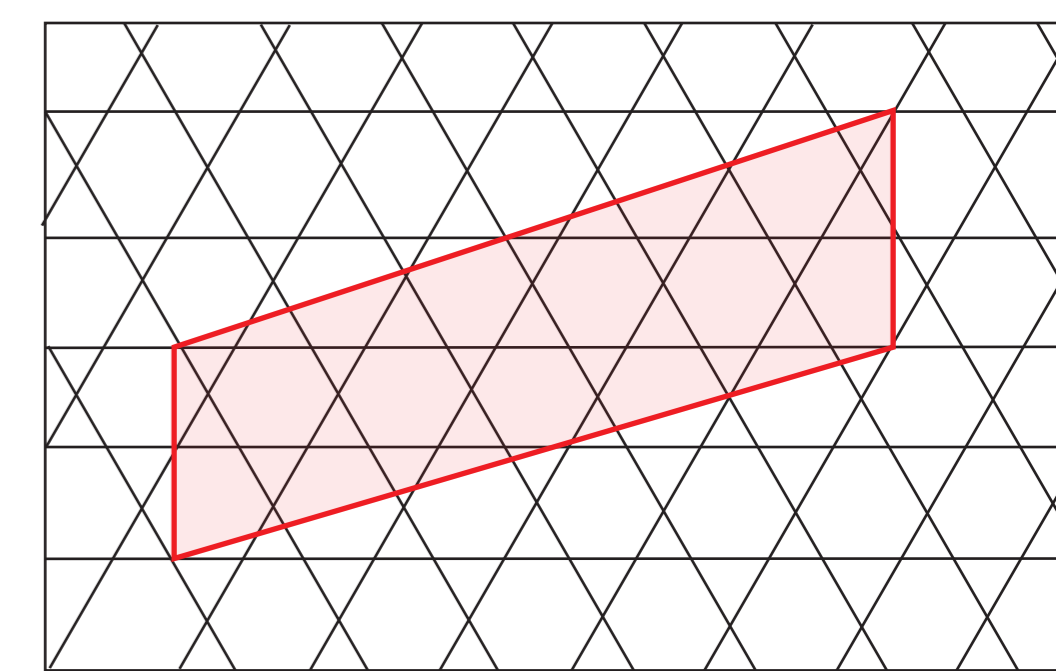
5735 s (40 スレッド)

10398 s (20 スレッド)

18691 s (10 スレッド)

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)



Expert モードでのサイト

5. 今後の計画

追加機能については要望のあったものについても順次検討し、対応可能なものは実装する予定です。

ver.0.1.1 での対応実績: イジング相互作用入力機能作成、入力・出力情報の変更等)

2015 年 12 月中旬 : ver. 0.2 リリース (実装予定主機能: 一般スピン、ハイブリッド並列対応)

2016 年 2 月中旬 : ver. 1.0 リリース (実装予定主機能: 一部モデルブースト機能実装予定)

2016 年 3 月以降 : 講習会開催 (現在検討中)。



← HΦ紹介ページ (MateriApps) への QR コード