



HΦ紹介ページ (MateriApps)

1. HΦ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。なお、本ソフトウェアは 2015, 2016 年度東大物性研ソフトウェア開発・高度化支援^[3]を受け開発されています。

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.1.1.1 公開中)

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

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

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

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>

動作環境

東京大学物性研究所スーパーコンピュータシステム 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

sekirei には HΦはプリインストール済。

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. HΦでできること

2-1. 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

2-2. スタンダードモード利用イメージ

① 入力ファイルの作成 (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)

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、<H>、<H²>、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、<S²>、一体 Green 関数、二体 Green 関数など (固有値毎に出力)

2-3. 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

模型を指定するパラメータファイル：zInterAll.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

② 計算実行 (以下のコマンドを入力、計算出力はスタンダードモードと同様)。

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)

3. HΦの並列化効率

sekirei, 京コンピュータで並列化効率を検証

検証方法：TPQ 計算での 1 時間あたりのステップ数 v.s. コア数

シングルノードの性能

	sekirei	京コンピュータ
CPU	Xeon E5-2680v3×2	SPARC64™VIIIfx
コア数	24	8
演算性能	960GFlops	128GFlops
主記憶	128GB	16GB
メモリバンド幅	136.4GB/s	64GB/s
トポロジー	enhanced hyper cube	6 次元メッシュトーラス
ネットワークバンド幅	7GB/s×2	5GB/s×2

3-1. 3072 コア数までの並列化効率検証 (sekirei)

18 サイト Hubbard 模型 (正方格子)
half-filling, Sz=0
次元数 =2,363,904,400
sekirei では同一コア数の場合
スレッド数 減、プロセス数 増
の計算の方が早い傾向。

3-2. 32,768 コア数までの並列化効率検証 (京コンピュータ)

36 サイト Heisenberg 模型 (カゴメ格子)
グランドカノニカル計算 (Sz 保存なし)
次元数 =2³⁶=68,719,476,736
京コンピュータでは同一コア数であれば、
ほぼ同じ速度での計算が行われる傾向。

4. HΦの新機能 ～ 動的グリーン関数の計算

4-1. 計算の手順

1. 励起ベクトルの生成 (励起演算子の定義)

シングル励起状態： $|\Phi'\rangle \equiv \sum_{i,\sigma_1} A_{i\sigma_1} c_{i\sigma_1}^\dagger (c_{i\sigma_1}) |\Phi\rangle$

ペア励起状態： $|\Phi'\rangle \equiv \sum_{i,j,\sigma_1,\sigma_2} A_{i\sigma_1 j\sigma_2} c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} (c_{i\sigma_1} c_{j\sigma_2}^\dagger) |\Phi\rangle$

(*) 生成 or 消滅演算子はフラグで選択可能

2. 動的グリーン関数の計算

動的グリーン関数： $G(z) = \langle \Phi' | \left[\mathcal{H} - z\hat{I} \right]^{-1} | \Phi' \rangle$

z については刻み幅および実部、虚部の最大値、最小値をそれぞれ指定する。

計算方法の種類 (下記 2 つの手法を実装)

・連分数展開を活用した計算 (ref. E. Dagotto, Rev. Mod. Phys 66, 763 (1994))

・全固有ベクトルを利用した計算方法 (全対角化用)

4-2. 計算例

分子性導体 EtMe₃Sb[Pd(dmit)₂]₂ の第一原理有効模型

ref. K. Nakamura, Y. Yoshimoto, & M. Imada, Phys. Rev. B 86, 205117 (2012)

HΦで有効模型について光学スペクトル解析。

$$\mathcal{H} = \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,\sigma_1,\sigma_2} V_{ij} c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{i\sigma_1} + \sum_{i \neq j, \sigma_1, \sigma_2} J_{ij} (c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2}^\dagger c_{i\sigma_2} c_{j\sigma_1} + c_{i\sigma_1}^\dagger c_{i\sigma_2}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{j\sigma_1})$$

Lanczos 法で基底ベクトルの計算。

→ 動的グリーン関数計算機能で光学スペクトルを計算 (右図)。

2016 年 10 月末：ver. 2.0 の機能として動的 Green 関数計算機能をリリース予定

→ リリース時は HΦML で告知 (ML の登録は「MateriApps」 - 「HΦ」 - 「HΦ query form」 から可能)