

# MateriApps LIVE! で始める 計算物性科学

東大物性研 本山裕一

2023-03-14 @ 計算物理春の学校2023 (沖縄)

# 自己紹介

- 2014/03 東大院工学系研究科物理工学専攻博士課程修了
  - 藤堂研 (初日の講義「プログラム開発の技術」の先生)
  - 量子スピン系の局所ベリー位相を経路積分モンテカルロ法で計算するアルゴリズムの開発
- 2014/04 - 2022/03 東大物性研・特任研究員
  - 連続空間の経路積分モンテカルロ法
  - 虚時間グリーン関数の安定な解析接続手法の開発
  - ソフトウェア開発・高度化プロジェクト
- 2022/04 - 現在 東大物性研・技術専門職員
  - ソフトウェア開発・高度化プロジェクト
- 言語
  - C/C++, Fortran, Python, Julia, shell script

# 目次

- ・ 計算物性科学=物性科学+計算科学
- ・ 量子格子模型
  - ・ ハバード模型・ハイゼンベルグ模型
- ・ 計算手法
  - ・ 厳密対角化
    - ・ Lanczos, TPQ
    - ・ 変分法
      - ・ 多変数変分モンテカルロ
  - ・ 既存のソフトウェアを使う
    - ・ 具体例としてHΦ

# 計算物性科学

- 計算科学
  - 計算機の力を使って手では到底解けないような大量の計算を実行することで科学研究を推し進める
  - 計算機シミュレーション、high-performance computation (HPC) など
  - 実験、理論に続く「第三の科学」
  - 最近は大量のデータに基づくデータ科学を「第四の科学」と位置づける人もいるらしい
  - 3日めの講義（機械学習・生成モデル・generating flow）

# 計算物性科学

- ・ 物性科学・物性物理
  - ・ 「物性=物の性質」を議論する物理
    - ・ 電気抵抗、比熱、帶磁率、誘電率、(自発)磁化、転移温度、etc...
  - ・ 微視的なアプローチで行うことが多い
    - ・ 原子・イオンとそのまわりの電子から始める
    - ・ 量子力学と統計力学を理論の基盤とする
  - ・ 物質ごとにどういう性質があるのか？
  - ・ 物質ごとの共通点や相違点はなにか？
  - ・ それらの性質はどういった機構で発生しているのか？
  - ・ より興味のある性質 (e.g., 高い超伝導転移温度) をもった物質はどうすれば得られるか？

# 計算物性科学

- 物性科学・物性物理
  - "More is different"
  - 構成要素の数がとても多い（多体問題）
  - 近似 and/or 数値シミュレーションが必要
    - Hartree-Fock、密度汎関数理論、模型計算（e.g. 対角化）、etc
  - 構成要素の種類がとても多い（see: 周期表）
  - まだ見ぬ物質がいくらでもある
    - 実験の代わりとしての数値シミュレーション
    - すべてを虱潰しに調べるのは無茶（組合せ爆発）
    - 効率的な最適化手法が必要（e.g. ベイズ最適化）

# ハミルトニアン

- 非相対論的ハミルトニアン（小文字は電子、大文字は原子核）

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = & - \sum_i \frac{\hbar}{2m} \nabla_i^2 - \sum_I \frac{\hbar}{2M_I} \nabla_I^2 \\ & + \sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{ij}} - \sum_{i,J} \frac{e^2 z_J}{r_{iJ}} + \sum_{I < J} \frac{e^2 z_I z_J}{r_{IJ}}\end{aligned}$$

- これを解けば電子や原子核の振る舞いがすべてわかる
  - もちろんほとんどすべての物質で解けない ( $O(10^{23})$  個の要素がある)
  - すこしづつ近似を入れていく

# ハミルトニアン

- 電子を内殻電子と価電子にわける
  - 内殻電子は原子核に強く束縛されており、合わせてイオンをなす
  - 価電子は原子核から離れて移動することができる
- イオン（原子核）は電子に比べて非常に重いため、電子を考えるときには静止しているという近似を行う（Born-Oppenheimer 近似）
  - 電子はイオンが作る「一体」ポテンシャルと他の電子からの相互作用を感じながら飛び回る

$$\mathcal{H} = \sum_i \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(r_i) \right] + \sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{ij}} \quad V(r_i) = \sum_J -\frac{e^2 \lambda_J}{r_{iJ}}$$

# ハミルトニアン

- だいぶマシになったがまだ難しい  $\mathcal{H} = \sum_i \left[ -\frac{\hbar}{2m} \nabla_i^2 + V(r_i) \right] + \sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{ij}}$
- 密度汎関数理論
  - ギリギリまで近似やパラメータを導入せずに頑張る
  - 詳しくは3日目のは常先生の講義・演習へ
- 模型計算
  - 現実を抽象・簡略化した「模型」を扱う
    - e.g., Hubbard model, Heisenberg model, Ising model
    - 本質を突いた模型を作ること自体が理論物理の偉大な仕事
  - 簡略化したとはいえ実際には計算機の力が必要なことが多い
  - この講義・演習の主題！

# ハバード模型

- 整然と並んだ原子核のまわりに「軌道」があり、電子は軌道間を飛び移る
  - 同一原子核だけでなく近くの原子核の軌道とも飛び移れる
  - 大雑把には $1s$  軌道とか  $2p$  軌道とかを思い出してください
- それぞれの軌道・スピンに関する生成消滅演算子を用いて、第二量子化のハミルトニアンは

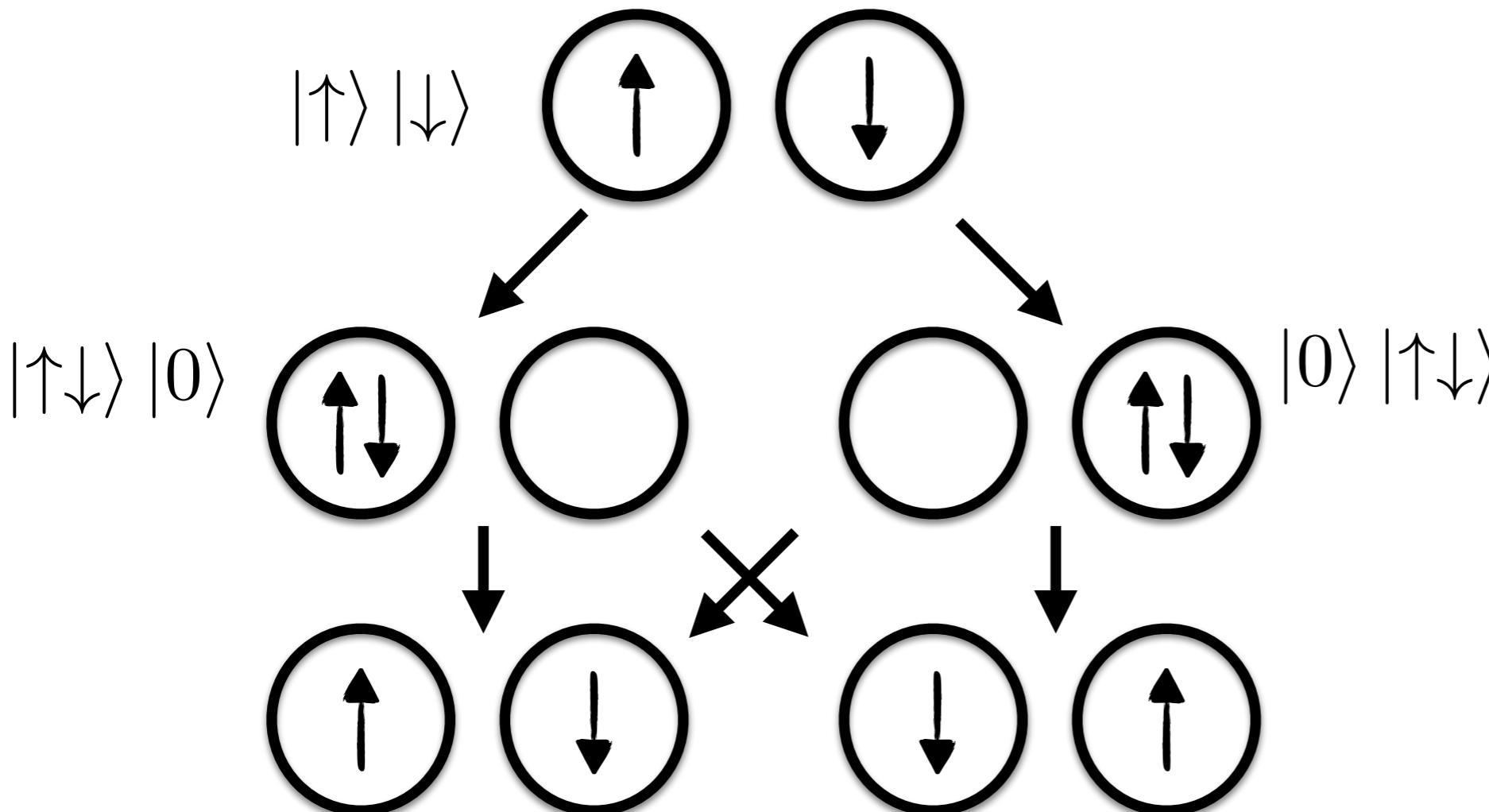
$$\mathcal{H} = \sum_{i < j} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left[ -t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.} \right] + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

- $t$  は飛び移りやすさを示すパラメータ（ホッピングパラメータ）で、 $U$  は同一軌道にある2電子にはたく（主にクーロン）相互作用
  - 拡張として別軌道上の2電子に働く相互作用  $V$  を入れることもある

# ハイゼンベルグ模型

- ・ ハバード模型で次の条件を考える
  - ・ 軌道の数と電子の数が等しい（ハーフフィリング）
  - ・ オンサイトクーロンUがtに比べてとても大きい（無限大ではない）
- ・ この時、電子はお互いに違う軌道にいたほうがエネルギー的に安定になる（電子が動かないので絶縁体になる）
- ・ tによるホッピングを摂動として取り入れると、互いにスピンが反対を向いたほうがエネルギーが下がる（反強磁性）
  - ・ 次ページ

# ハイゼンベルグ模型



$|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle$

$$-\frac{2t^2}{U}$$

$|\downarrow\rangle |\uparrow\rangle$

$$\frac{2t^2}{U}$$

- 中間状態ではオンサイトクーロンUを感じる（分母）
- 二次摂動で2回ホッピングするので $t^2$ （分子）
- 経路が2つあるので係数に2がつく
- 電子の反交換関係から符号反転

# ハイゼンベルグ模型

- 他の状態もまとめると二次摂動のハミルトニアンは次の通り

$$\begin{aligned}\mathcal{H} + \frac{t^2}{U} &= \frac{4t^2}{U} \begin{pmatrix} 1/4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/4 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & -1/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/4 \end{pmatrix} \\ &= \frac{4t^2}{U} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2\end{aligned}$$

- 反強磁性ハイゼンベルグ模型  $\mathcal{H}_{ij} = J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$  が導かれた

# 計算したいこと

- ・ 物性物理での興味のひとつは、これらのモデルが極低温でどうなっているか
  - ・ 温度を下げるにしたがって熱ゆらぎが減って様々な秩序が現れる
    - ・ e.g.) 常磁性・強磁性の有限温度相転移
    - ・ 極低温では量子ゆらぎが効いてきてさらに様々な状態が現れる
      - ・ e.g.) 超流動や超伝導
    - ・ 基底状態および低エネルギー励起状態を求めたい
    - ・ 圧力や組成を変えると、有効模型のパラメータが変わり、それを反映して基底状態の性質が変わる（量子相転移）
  - ・ （もちろん、有限温度での性質も興味がある）

# 基底状態計算の数値手法

- ・ 厳密対角化
  - ・ 固有値問題  $H\Psi = E\Psi$  を解けば基底状態が得られるので、対角化する
  - ・ 文字通り「厳密」な基底状態・低励起状態が得られる
  - ・ ハミルトニアンは疎行列なので行列ベクトル積を駆使して計算量を減らす
  - ・ 有限温度や実時間発展なども計算可能
  - ・ 扱える格子の大きさに強烈な制限がある
  - ・ ヒルベルト空間の次元が格子サイズの指数関数で増えるため

今日は厳密対角化を主に扱います

# 基底状態計算の数値手法

- 変分法
  - 変分原理「任意の波動関数に対するエネルギーの期待値は基底エネルギー以上になる」に基づく手法
$$E = \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \geq E_0$$
  - 波動関数を調整してエネルギーを最小化する最適化問題に帰着させる
    - 如何に表現力のよい波動関数をつくるか、如何にそれを最適化するか、が問題になる
    - スレーター行列式、パフィアン、テンソルネットワーク、(ディープ)ニューラルネットワーク、(制限)ボルツマンマシン、ガウス過程、etc
    - 勾配法(自動微分)や虚時間発展など
    - 期待値をモンテカルロ法で計算する場合、変分モンテカルロと呼ばれる

# 基底状態計算の数値手法

- 経路積分モンテカルロ法
  - $d$  次元量子模型の分配関数  $Z = \text{Tr} \exp(-\beta H)$  を経路積分展開して  $d+1$  次元古典模型にmapping し、経路（世界線）をマルコフ連鎖モンテカルロ法で重み付きサンプリングする
  - 空間次元によらず、大規模系の有限温度計算が統計誤差の範囲内で可能
  - $\beta$ 無限大極限を取れば基底状態へとたどり着く
  - フラストレート系やフェルミオン系では世界線の重みが負になってしまう
  - 負符号問題

$$Z = \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H})$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \text{Tr} (-\beta \mathcal{H})^n \quad |\phi_0\rangle = |\phi_n\rangle$$

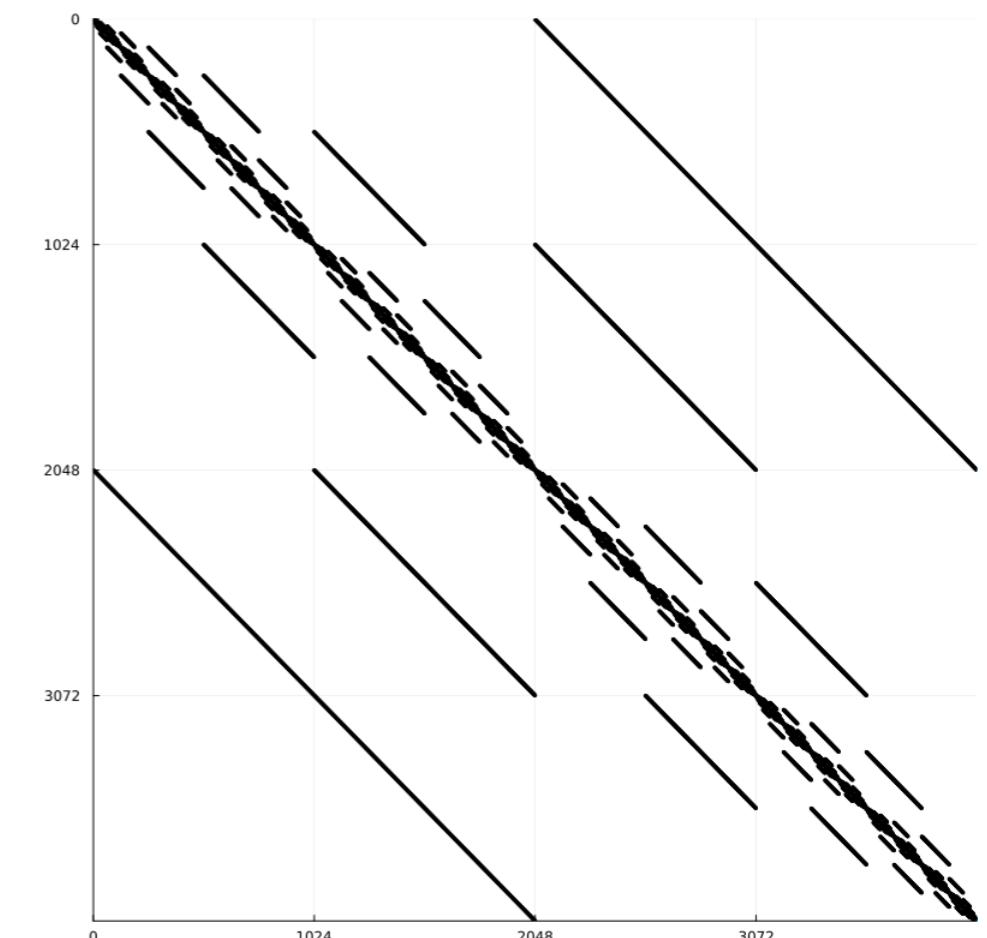
$$= \sum_n \frac{(-\beta)^n}{n!} \sum_{\phi_1, \dots, \phi_n} \prod_{k=1}^n \langle \phi_k | \mathcal{H} | \phi_{k-1} \rangle$$

# 厳密対角化法

- ・ ハミルトニアンの固有値問題を解けば基底状態が得られる
  - ・ 有限温度の計算も可能（カノニカル平均をとる）
  - ・ 全対角化は行列サイズ $N$ に対して計算量  $O(N^3)$ 
    - ・  $N$ （ヒルベルト空間の大きさ）はサイト数に対して指数関数的に増大！
      - ・ e.g.  $S=1/2$  スピン系は1スピンあたり2状態なので2のスピン数乗

# 厳密対角化法

- ・ ハミルトニアンを行列としてみるとゼロ成分がかなり多い（疎行列）
  - ・ ヒルベルト空間の大きさのたかだか定数倍
- ・  $S=1/2$  反強磁性ハイゼンベルグ模型 on 1D ring with  $L=12$  sites
  - ・ ハミルトニアン行列は  $4096 \times 4096 = 16,777,216$
  - ・ 非ゼロ要素の数はそのうち  $26,824$ 
    - ・ およそ 0.16% しかない
    - ・ 行列ベクトル積にかかる時間も 0.16%



# 厳密対角化法：べき乗法

- 基底状態を得る最も単純な方法
- 固有状態は完全系をなすので、任意の状態ベクトルを展開できる

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{n=0} a_n |\phi_n\rangle \quad \mathcal{H} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle$$
$$E_0 \leq E_1 \leq \dots$$

- これにハミルトニアンを複数回かけると

$$\begin{aligned} |\Psi_k\rangle &= (\mathcal{H} - C)^k |\Psi_0\rangle = \sum_{n=0} a_n (\mathcal{H} - C)^k |\phi_n\rangle \\ &= \sum_{n=0} a_n (E_n - C)^k |\phi_n\rangle \\ &= (E_0 - C)^k \sum_{n=0} a_n \left( \frac{E_n - C}{E_0 - C} \right)^k |\phi_n\rangle \end{aligned}$$

- $|E_n - C| / |E_0 - C|$  が1未満の成分はどんどん小さくなっていく
  - $C$  が十分大きければすべての  $n > 0$  でこれを満たすので基底状態を得られる
- 行列ベクトル積しか使わないので大規模疎行列で利用可能

# 厳密対角化法：Lanczos法

- べき乗法の問題点
  - エネルギーギャップが小さい =  $|E_n - C / E_0 - C|$  が 1 に近いと収束が悪くなる
  - $k$  回かけた最終結果  $|\Psi_k\rangle$  しか使わない (無駄が大きい)
- べき乗法よりも洗練された手法が多数存在する
  - そのうち一つが Lanczos 法
    - べき乗法と同様に行列ベクトル積を用いるので大規模疎行列に強い
    - べき乗法よりはるかに収束が早い (指数関数的に収束すること)

# 厳密対角化法：Lanczos法

初期状態  $\beta_1 \leftarrow 0$   $|v_0\rangle \leftarrow 0$

for  $j$  in  $1:m$

$$|w_j\rangle \leftarrow \mathcal{H}|v_j\rangle - \beta_j|v_{j-1}\rangle$$

$$\alpha_j \leftarrow \langle w_j | v_j \rangle$$

$$|w_j\rangle \leftarrow |w_j\rangle - \alpha_j|v_j\rangle$$

$$\beta_{j+1} \leftarrow \sqrt{\langle w_j | w_j \rangle}$$

$$|v_{j+1}\rangle \leftarrow |w_j\rangle / \beta_{j+1}$$

$$H_m = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & \cdots \\ & \beta_3 & \alpha_3 & \beta_4 & \\ & & \beta_4 & \alpha_4 & \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

- 三重対角行列  $H_m$  の固有値はハミルトニアン  $H$  の固有値の良い近似値

# 厳密対角化法：Lanczos法

- 三重対角行列  $H_m$  の固有値はハミルトニアン  $H$  の固有値の良い近似値
- 固有ベクトルは  $H_m$  の固有ベクトル  $|e_i\rangle$  に  $V$  をかけると得られる
  - $V$  は  $|v_j\rangle$  を並べたもの  $V = [|v_1\rangle |v_2\rangle \dots |v_m\rangle]$
  - $V$  を保存するわけにはいかないので、Lanczos をもう一度やり直して逐次かけていく
- あるいは逆反復法を用いる
  - $A(\lambda) = (H - \lambda)^{-1}$  の固有値は  $1/(E_n - \lambda)$  であり固有ベクトルは  $H$  と共通
  - $\lambda$  を  $H_m$  の最小固有値( $=E_0$  の近似値)にとって  $A(\lambda)$  でべき乗法を行う
    - 逆行列の計算は重いので連立一次方程式  $y_k = (H - \lambda)y_{k+1}$  を解く

# Thermal Pure Quantum State

S. Sugiura and A. Shimizu, Phys. Rev. Lett. **108**, 240401 (2012)  
S. Sugiura and A. Shimizu, Phys. Rev. Lett. **111**, 010401 (2013)

- ランダムに生成した波動関数を  $\beta/2$  まで虚時間発展する

$$|\Psi(\beta)\rangle = e^{-\beta\mathcal{H}/2} |\psi\rangle$$

- この状態について物理量の期待値を計算すると、逆温度  $\beta$  のカノニカル平均と等しくなる
  - 二乗誤差のランダム平均が系のエントロピーの指数関数で押さえられる

$$\begin{aligned}\sigma_A^2 &= E \left[ \left( \frac{\langle \Psi(\beta) | A | \Psi(\beta) \rangle}{\langle \Psi(\beta) | \Psi(\beta) \rangle} - \langle A \rangle_\beta \right)^2 \right] \\ &\leq \exp[-S(\beta^*)/2] \quad (\beta < \beta^* < 2\beta)\end{aligned}$$

- こうして生成した波動関数を熱的純粹状態 (TPQ state) とよぶ

# micro canonical TPQ state

- ・ ハミルトニアンが指数関数の肩の上に載っているので一見計算しづらい
- ・ micro canonical TPQ 状態なら指数関数が不要

$$|\Psi_k\rangle = \frac{(\ell - \mathcal{H}/N |\Psi_{k-1}\rangle)}{|(\ell - \mathcal{H}/N |\Psi_{k-1}\rangle)|}$$

- ・ 逆温度 $\beta_k$ はエネルギー $E_k$ から求まる

$$\beta_k = \frac{2k/N}{\ell - E_k} \quad E_k = \frac{\langle \Psi_k | \mathcal{H} | \Psi_k \rangle}{N}$$

- ・ Lanczos と同様に、ハミルトニアンは行列ベクトル積でしか用いない
  - ・ Lanczos と同様のコストで有限温度計算が実行可能！

# Canonical TPQ & 実時間発展

- (虚) 時間発展演算子の指數関数をティラー展開

$$|\Psi_k\rangle = \exp(-\lambda\mathcal{H})|\Psi_{k-1}\rangle$$

$$\sim 1 + \sum_{n=1}^N \frac{(-\lambda)^n}{n!} \mathcal{H}^n |\Psi_{k-1}\rangle$$

$$\lambda = \begin{cases} \Delta\tau & \text{imaginary-time} \\ i\Delta t/\hbar & \text{real-time} \end{cases}$$

- 刻み幅を小さく取り、展開次数を大きく取れば近似がより良くなる
  - 実時間発展の場合、波動関数のノルムが保存しているかどうかで近似の良さを確認可能

# 動的グリーン関数

- 演算子Aによって励起された状態の動的応答関数 (e.g., 動的スピン構造因子)

$$G_A(\omega) = \left\langle \Psi_A \left| \frac{1}{\mathcal{H} - I\omega} \right| \Psi_A \right\rangle \quad | \Psi_A \rangle = A | \Psi \rangle$$

- 次の連立一次方程式を解いて

$$(\mathcal{H} - I\omega) |\Psi'\rangle = |\Psi_A\rangle$$

行列ベクトル積の繰り返しで解ける  
S.Yamamoto, et al., JPSJ 77, 114713 (2008).

- 内積を取ればよい

$$G_A(\omega) = \langle \Psi_A | \Psi' \rangle$$

# 有効模型と現実物質

- 有効模型のパラメータ ( $t, U, J, \dots$ ) は自由に変えることができる
  - どういったパラメータでどういう相が安定か？
  - 途中に現れる相転移の性質は？
  - どういうパラメータを取れば面白い物理や役に立つ性質が現れるか？
  - 近年は機械学習が活用される（マテリアルズ・インフォマティクス）
    - 回帰モデル
      - ベイズ最適化
      - データ同化

# 有効模型と現実物質

- ・ 現実物質はどのパラメータに対応するのか?
  - ・ 実験や第一原理計算で得られた結果と有効模型の結果とを比較する
    - ・ 結果の誤差が最小となるようなパラメータを探す最適化問題
  - ・ 第一原理計算で得られた結果から有効模型を直接導出
    - ・ ブロックホ関数から最局在ワニエ関数を導出
    - ・ 二中心積分 → hopping constant
    - ・ 電子相関を上手く取り入れる
      - ・ constraint RPA など
  - ・ 3日めのは常先生の講義でも簡単に扱われます（特にワニエ関数）

# アルゴリズム以外も大事

- ・ 有効模型を効率よく解くための手法がたくさん提案されてきた
  - ・ もちろん今現在も、そして将来も研究開発は進んでいきます
- ・ 実際に使うためには実装しないといけない!
  - ・ c.f. 初日の講義（言語やソフトウェア開発技法への習熟）
  - ・ 計算物理のアルゴリズム以外の一般的なデータ構造やアルゴリズムの知識も必要
  - ・ 格子や模型のパラメータを簡単に変えられるか？
  - ・ 大規模計算機で使うためには並列化も大事
    - ・ OpenMP, MPI, GPGPU(二日目午前の講義), etc
- ・ 計算結果に（のみ）興味がある人が一から実装するには難しそう
  - ・ →公開パッケージを使おう！

# 公開パッケージを探す：MateriApps

<https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp>

- ・ 計算物質科学のソフトウェアに関する情報を集めたポータルサイト
  - ・ 現在は東大物性研を中心となって運営している
  - ・ 2013年から始まって300以上
- ・ 各種ソフトウェアについて、公式サイトへのリンクやライセンス情報、できることがまとめられている
  - ・ やりたいこと（計算対象、物理量、アルゴリズムなど）から逆引き可能
- ・ 一部ソフトウェアは「レビュー」として、実際に使用した体験談が投稿されている
- ・ その他キーワード解説など

# 公開パッケージを探す：MateriApps

<https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp>

現在アプリ掲載数 305 件  
お問合せ / アプリ掲載依頼

JP / EN



■ MateriAppsについて ■ レビュー募集

Google 提供



› もっと詳しく探す

[NEWS / 講習会・イベント](#)

[アプリ一覧](#)

[アプリ詳細検索](#)

[キーワード解説](#)

[レビュー](#)

[事例](#)

[アプリコンシェルジュ](#)

インストールしないでアプリを試せる「MateriApps LIVE!」

[詳細はこちら](#)

カテゴリから探す

@materiappsによるツイート

電子状態計算  
(固体物理分野)

電子状態計算  
(量子化学分野)

分子動力学

可視化・モデリング

強相関系・有効模型計算

データ解析・補助ツール

連続体シミュレーション

データベース

統合環境

機械学習

量子計算

# 公開パッケージを使う：MateriApps LIVE!

<https://cmsi.github.io/MateriAppsLive/>

- 複数の計算物質科学ソフトウェアが最初からインストールされている Debian GNU/Linux 環境
  - 面倒なインストール作業が不要！
    - abinit, AkaiKKR, ALAMODE, ALPS, CONQUEST, Feram, DCore, DSQSS, HΦ, LAMMPS, mVMC, OCTA, OpenMX, Quantum ESPRESSO, PHYSBO, SMASH, TeNeS, xTAPP
    - VESTA や OVITO のような可視化ツールも入っています
  - すぐに試せるように Virtual BOX のスナップショットとして公開されている
  - Docker Image もある
    - 簡単に扱うためのスクリプトは現在 macOS のみ対応
- お試し環境として、とくに授業や講習会、演習で便利

# 公開パッケージを使う：MateriApps LIVE!

<https://cmsi.github.io/MateriAppsLive/>

- 電子状態計算
  - abinit, AkaiKKR, ALAMODE, CONQUEST, OpenMX, Quantum ESPRESSO, SMASH, xTAPP
- 厳密対角化
  - 動的平均場近似
- HΦ
  - DCore
- 変分モンテカルロ
  - 分子動力学法
- mVMC
  - Feram, LAMMPS, OCTA
- テンソルネットワーク
  - 機械学習
- ALPS, TeNeS
  - PHYSBO
- 経路積分モンテカルロ
  - ALPS, DSQSS

# 物性研ソフトウェア開発・高度化プロジェクト

## PASUMS

<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/>

- ・ 物性研究分野で特に重要なもので、物性研スパコンでの利用が見込まれるプログラムを対象としたプロジェクト
  - ・ 課題は公募（1,2件/年 を採択）
  - ・ 開発者・開発チーム以外にも広く使ってもらうことを目指す
  - ・ マニュアル・ドキュメントの整備
  - ・ 自動テストなど、開発環境整備
  - ・ 入出力の整理
  - ・ 新機能追加
  - ・ ソフトウェア自体のウェブサイトの作成（講習会資料の公開など）
- ・ リリース後にはソフトウェア論文を執筆する
- ・ 定期的にソフトウェア講習会を開催

# PASUM 過去課題

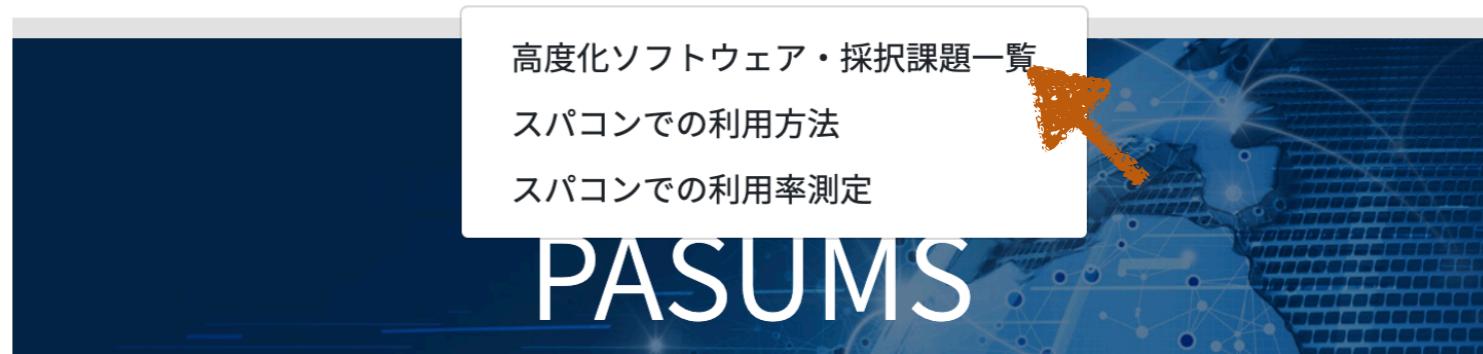
<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/>

- 量子格子模型
  - $H\Phi$ : 厳密対角化とTPQ
  - mVMC: 多変数変分モンテカルロ法
  - DSQSS: 経路積分モンテカルロ法
  - DCore: 動的平均場近似
  - TeNeS: テンソルネットワーク(特に2次元iTNS)
- 第一原理計算
  - abICS: 合金など不規則系の配置サンプリングの大規模並列計算
  - OpenMX: 局在基底を用いた  $O(N)$  第一原理計算
  - RESPACK: バンド計算の結果から有効模型のパラメータを導出するパッケージ
  - ESM-RISM: 溶媒を古典動力学法で、溶媒中の固体をDFTで解析するパッケージ
- 数理ライブラリ
  - PHYSBO:  $O(N)$  ベイズ最適化パッケージ
  - Kω: シフト型Krylov部分空間法に基づくソルバーライブラリ
  - 2DMAT: 種々の方法に基づく逆問題最適化・サンプリングフレームワーク



**PASUMS**  
東京大学物性研究所  
ソフトウェア開発・高度化プロジェクト

Top プロジェクトについて 高度化ソフトウェアについて 応募について News お問い合わせ



**PASUMS**

# ソフトウェア講習会

<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/>

- それぞれのソフトウェアについて講習会を開催しています
  - 本プロジェクトでウェブサイトを作っているソフトの場合、過去の講習会資料も公開
  - (今日の座学と講習も過去の講習会資料を参考にしています)

The screenshot shows the documentation page for the **HΦ** software. At the top, there is a logo of a black cat wearing glasses, followed by the text "HΦ" and "Quantum Lattice Model Simulator Package". A dark blue navigation bar at the bottom contains links: Top, HΦについて, インストール, ドキュメント, サンプル, 研究関連, News, and お問い合わせ. A mouse cursor is hovering over the "ドキュメント" link. A dropdown menu is open, listing: マニュアル, 開発者ノート, Doxygen, and 発表資料. The background of the page features a dark blue gradient with glowing green molecular structures.

# 量子格子模型厳密対角化パッケージHΦ

<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/hphi/>

- 量子格子模型の基底状態や有限温度の物理量などを厳密対角化法とTPQ 法で計算するためのオープンソースソフトウェア
  - 任意のトポロジーの格子・グラフ上で
  - 任意の二体相互作用の  $I_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4}^{ijkl} c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{l\sigma_4}$
  - 量子格子模型を取り扱える
- よく使われる模型や格子があらかじめ定義されている
  - 鎖、はしご格子、正方格子、三角格子、蜂の巣格子、カゴメ格子
  - ハバード模型、スピニン模型（任意のS, カップリング）

# 量子格子模型厳密対角化パッケージHΦ

<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/hphi/>

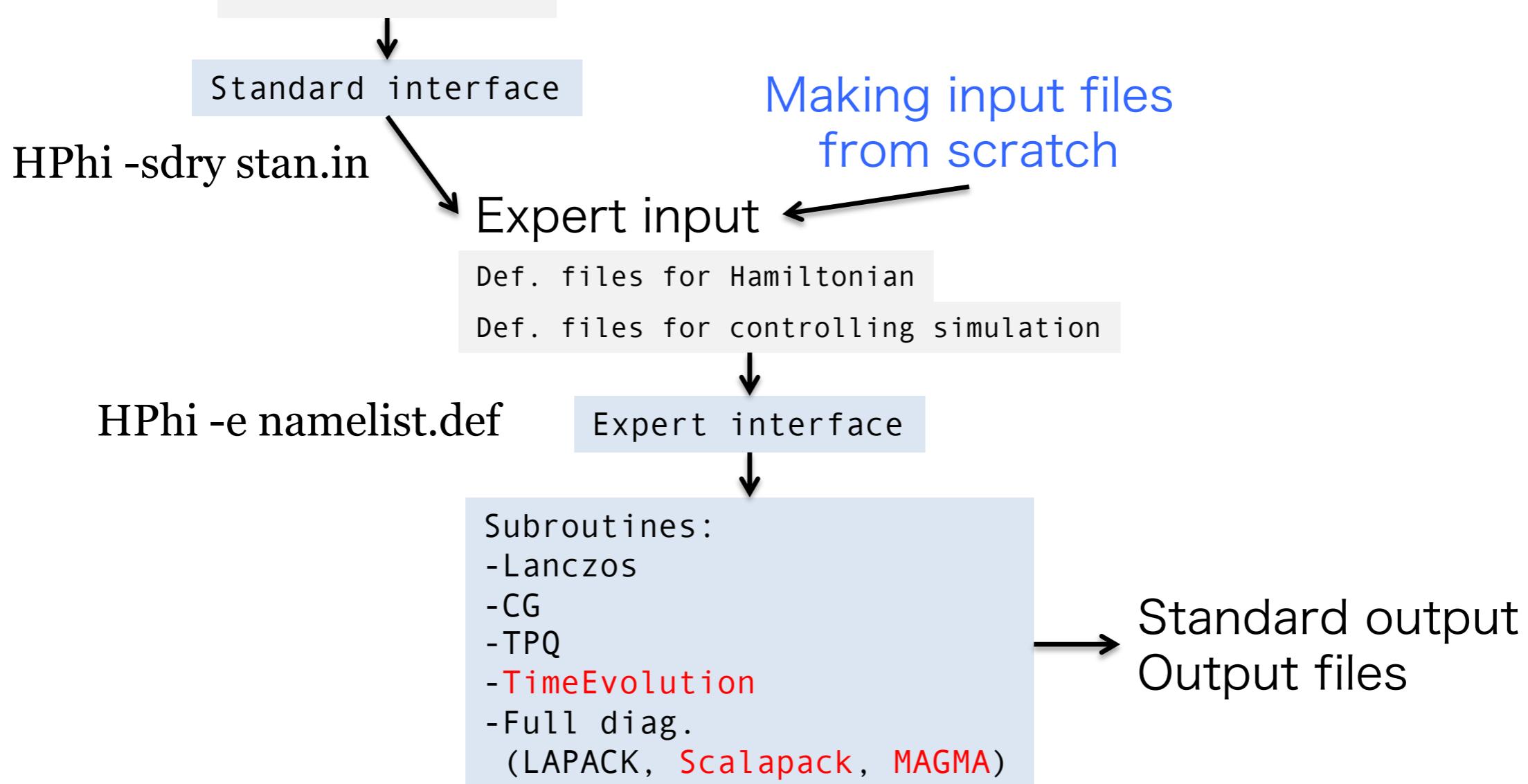
- 量子格子模型の基底状態や有限温度の物理量などを厳密対角化法とTPQ 法で計算するためのオープンソースソフトウェア
  - 全対角化
    - ScaLAPACK によるMPI 並列と MAGMA によるGPGPU に対応
  - 基底状態計算
    - Lanczos 法の他に LOBCG 法も利用可能（後者がオススメ）
  - 有限温度計算
    - TPQ 法
  - 実時間発展

よく使われる模型・格子を簡単に定義するファイル

## Standard input

```
W = 4
L = 4
model = "Hubbard"
method = "TPQ"
lattice = "Square"
t = 1.0
t' = 0.5
U = 8.0
nelec = 16
2Sz = 0
```

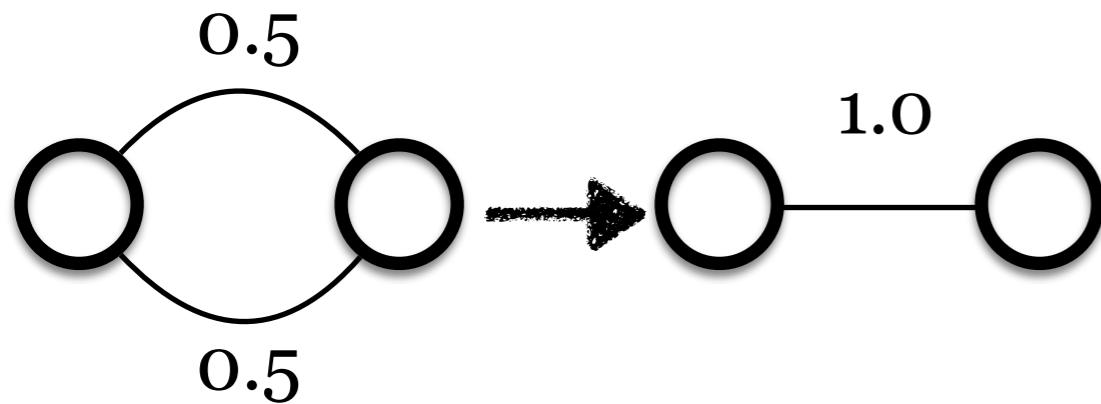
# Flow of Simulation



# $S=1/2$ 反強磁性ハイゼンベルグダイマーの計算

入力ファイル: stan.in

```
method = "FullDiag" # 全対角化
lattice = "chain"    # 一次元鎖 (周期的境界条件)
L = 2                # 2 サイト
model = "Spin"       # スピン系(全Sz固定)
J = 0.5              # ハイゼンベルグ相互作用
2S = 1               # スピンの大きさはS=1/2
2Sz = 0              # 全Sz = 0
```



実行方法  
HPhi -s stan.in

基底エネルギー  $-3/4$  が得られる

# $S=1/2$ 反強磁性ハイゼンベルグ鎖の計算

入力ファイル: stan.in

```
method = "CG"      # LOBCG method
lattice = "chain" # chain lattice
L       = 16        # L = 16
model   = "Spin"   # Spin model
2S     = 1          # S = 1/2
J      = 1          # J = 1
2Sz    = 0          # total Sz = 0
exct   = 2          # 基底状態と第一励起状態を計算
```

出力ファイル: output/zvo\_energy.dat

State 0

```
Energy -7.1422963606168066
Doublon 0.0000000000000000
Sz 0.0000000000000000
```

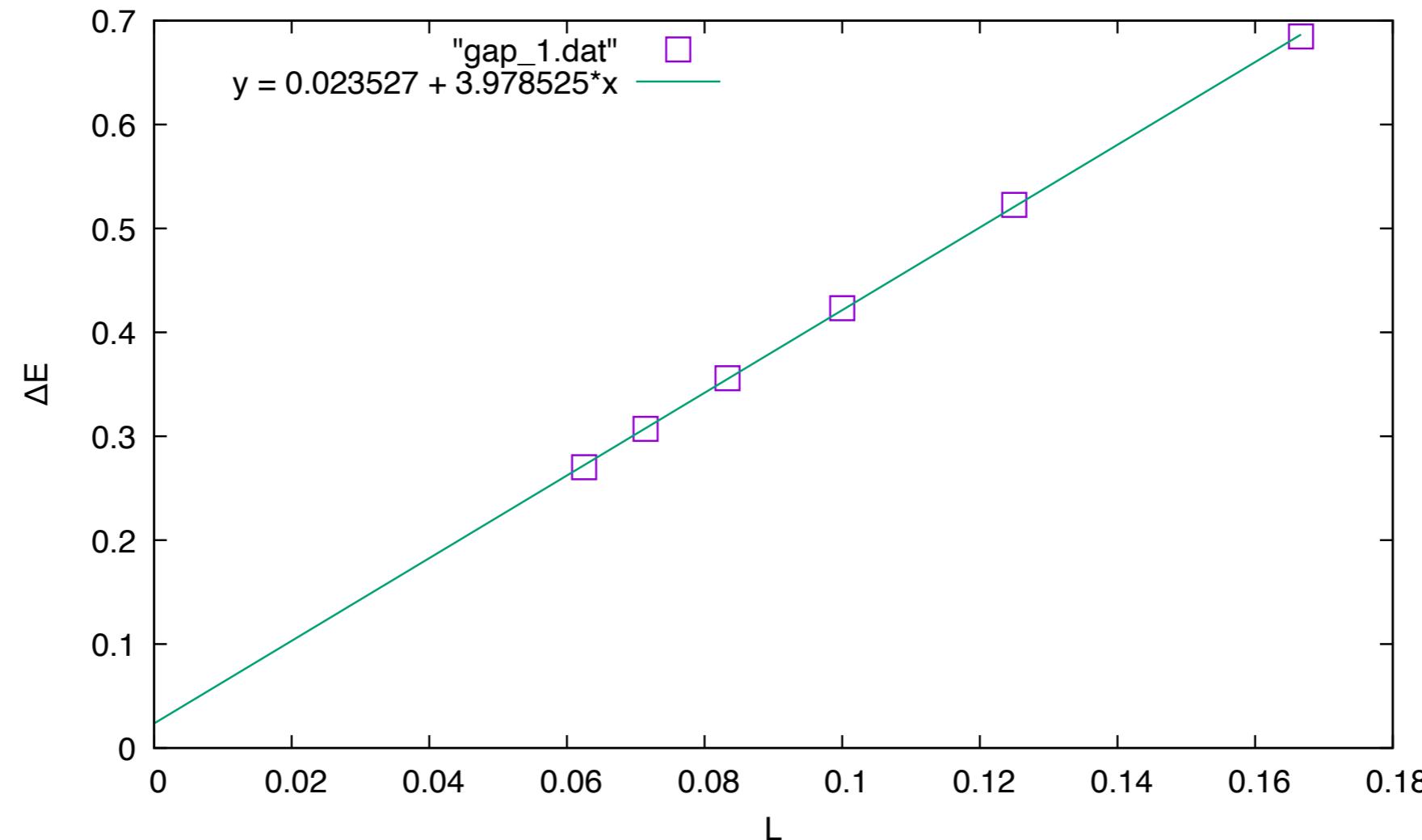
$$\Delta E(L=16) = 0.270\dots$$

State 1

```
Energy -6.8721066783661628
Doublon 0.0000000000000000
Sz 0.0000000000000000
```

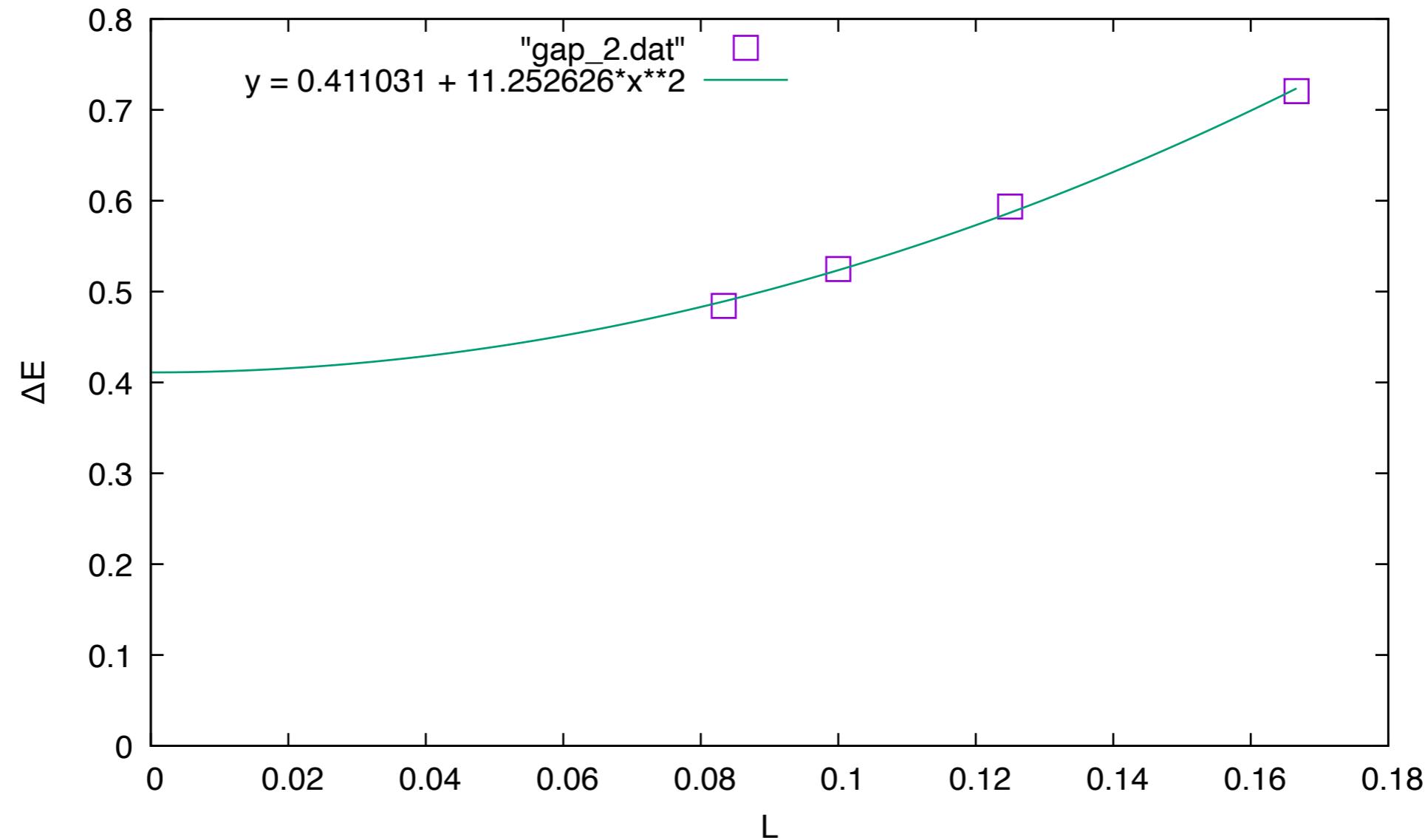
# $S=1/2$ 反強磁性ハイゼンベルグ鎖の計算

- いくつかのLでエネルギーギャップ  $\Delta E(L)$  を計算してプロットしてみる
  - 入力ファイルを書き換える
  - 実行する
  - 出力ファイルを読み取ってギャップを計算
  - $L$  と  $\Delta E(L)$  を適当なファイルに追記



# $S=1$ 反強磁性ハイゼンベルグ鎖の計算

- $S=1$  に変更して同様にやってみる
  - $2S=2$  と変更すれば良い
  - $S=1/2$  よりも扱える系のサイズが小さくなるので注意
  - ひとまず  $L=12$  ぐらいにしておくのが吉



# 反強磁性ハイゼンベルグ鎖のギャップ

- 数点程度なら手でやってもいいかもしれない
- 手作業が増えるようならばプログラムを書いたほうが良い
  - 何らかの言語でプログラミングはできたほうが良い
    - 速度よりは可読性を重視する
      - 一番重いのはHPhi を実行して対角化計算する部分！
    - 文字列・配列・辞書 (a.k.a. 連想配列)を簡単に使えると便利
    - 場合によっては後処理として簡単な計算（積分や行列演算など）をすることもある
    - この分野だとPython かJulia が無難

後で演習時間に実演します

# 座学のまとめ

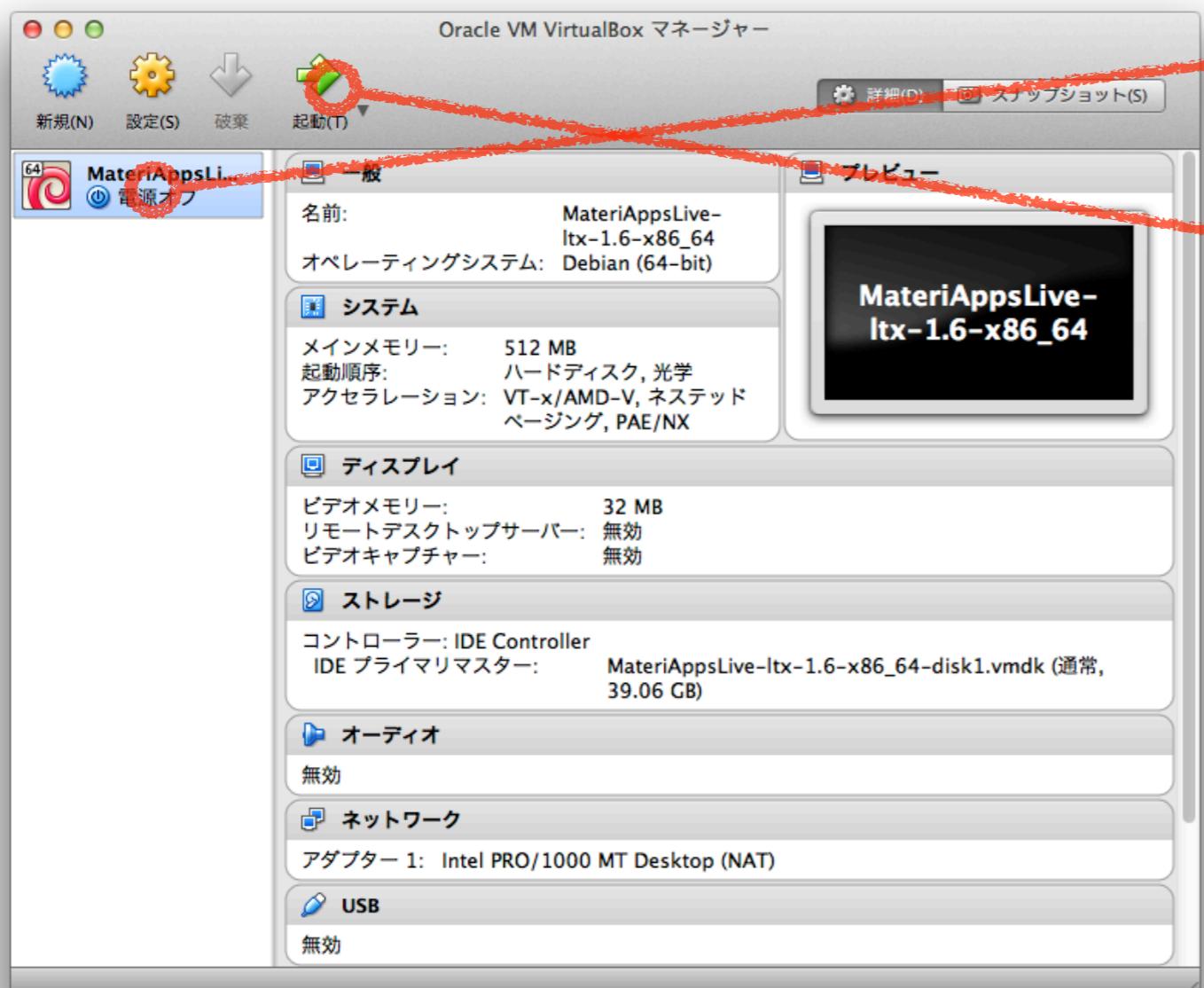
- ・ 計算物性物理は物質の性質を理解・予測するために計算機を活用する学問
  - ・ ミクロな構成要素（量子力学）の集団的な振る舞い（統計力学）
- ・ すべてを完璧に解くことはできないので、物理現象を鋭く切り取った「有効模型」というのを考える
- ・ 有効模型であっても手では解けないので計算機でどうにかする
  - ・ その手法のひとつが厳密対角化および関連手法
- ・ アルゴリズムそのものだけではなく、並列化や入出力など、実際のプログラムには必要なことがとても多い
  - ・ すでにあるプログラムを活用しよう！
    - ・ MateriApps, MateriApps LIVE! をつかうとプログラムを探しやすい＆試しやすい
- ・  $H\Phi$ をつかえば量子格子模型の厳密対角化や有限温度計算などが簡単に実行可能
  - ・ このあとは実習です

# MateriApps LIVE! を用いた HΦの演習

# MateriApps LIVE! の準備

- Windows, Linux の場合はVirtualBOX の上で MateriApps LIVE! を動かす
- macOS (Intel CPU) の場合は VirtualBOX か docker を利用する
- macOS (Apple Silicon) の場合は docker を利用する
- 詳しくは公式wiki <https://github.com/cmsi/MateriAppsLive/wiki> を参照
- VirtualBOX 版は <https://github.com/cmsi/malive-tutorial/raw/master/setup/setup.pdf> という資料も参考になる
  - 次ページ以降は関係する部分を抜粋

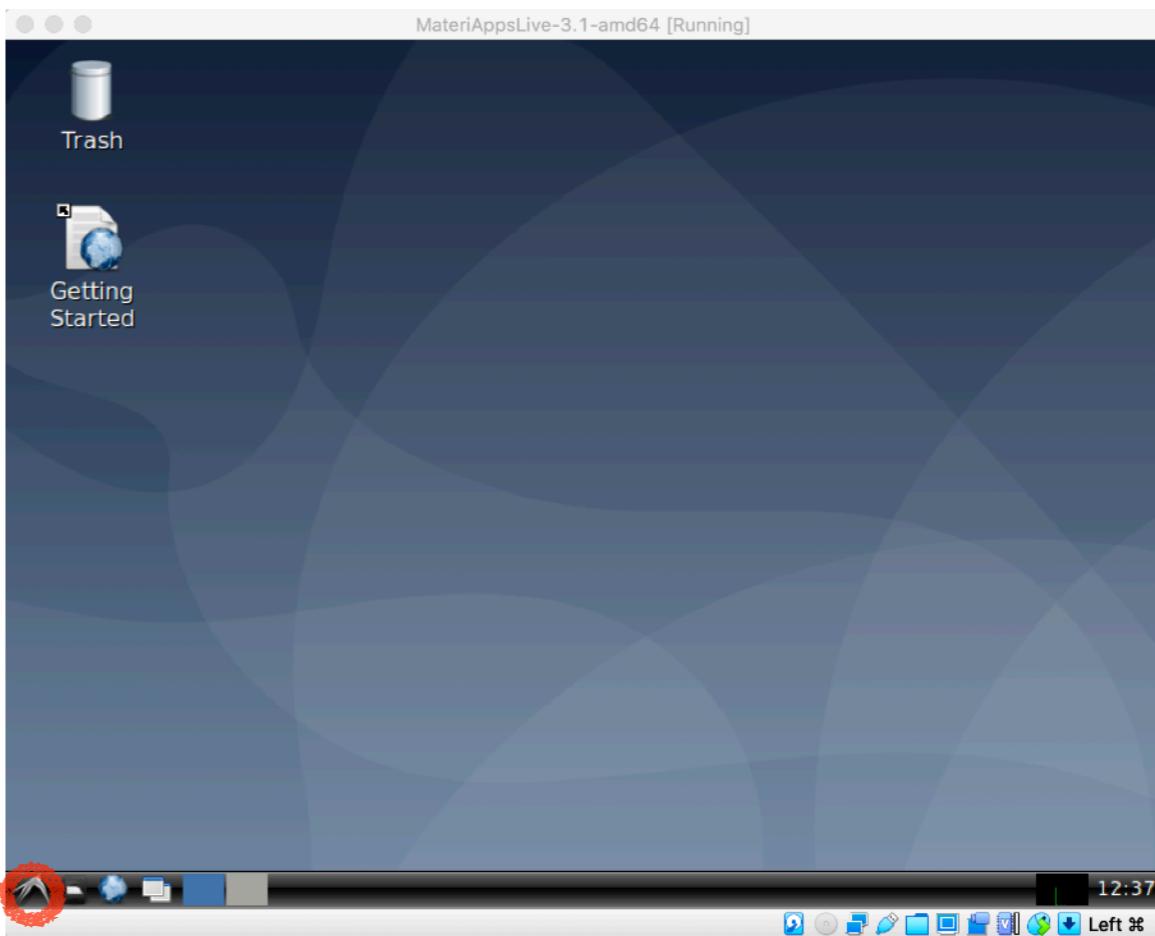
# VirtualBox からの起動



1. 「MateriAppsLive...」を選択
2. 起動ボタンを押す
3. ログイン画面ができるまでそのまま待つ

# MateriApps LIVE! へのログイン

- 下記の情報をを使ってログイン
    - ユーザ名 (login): *user*
    - パスワード (password): *live*
  - 右のデスクトップ画面が出れば成功
- 
- スタートメニュー
  - ターミナルの開き方  
「スタートメニュー」 ⇒ 「System Tools」 ⇒ 「LXTerminal」
  - 仮想マシンの終了 (シャットダウン)  
「スタートメニュー」 ⇒ 「Logout」 → 「Shutdown」



# 追加の設定 (1/2)

- ✓ キーボード: 日本語キーボード(「@」が「P」の右にある)を使っている場合
  - 「スタートメニュー」 ⇒ 「System Tools」 ⇒ 「Switch to Japanese Keyboard Layout」
  - 「@」が正しく入力できることを確認
- ✓ 仮想マシンウインドウの解像度・スケールの変更
  - 解像度(画素数): デフォルトでは「800 x 600」
  - スケール(画素密度): デフォルトでは「200%」
  - 解像度とスケールはホストOSの「ビュー」メニュー ⇒ 「仮想スクリーン 1」から変更できる
  - VESTA, OVITO, ParaViewなどの可視化ソフトを使う場合は解像度を「1024 x 768」以上に設定するとよい
  - 文字が小さくて見にくい場合にはスケールを大きくする

## 追加の設定 (2/2)

### ✓ ファイル共有: ホストOSと仮想マシン間のファイル共有

- ・仮想マシンをいったんシャットダウン
- ・VirtualBox マネージャー画面で MateriAppsLive-\* を選択し「設定」
- ・「共有フォルダー」タブを開き、右側の「+」をクリック
- ・「フォルダーのパス」の右側の「v」マークをクリックし、「その他」を選択。共有するフォルダーを選択、「自動マウント」をチェックし「OK」
- ・仮想マシンを起動。上で選択したフォルダが、/media/sf\_... の下に見える

### ✓ コピー & ペースト: ホストOSでPDFファイルからコピーした文字列を、仮想マシンのターミナル等でペーストする方法

- ・ターミナル上で右クリック ⇒ 「Paste」(あるいは「shift + control + V」)
- ・文字列のコピーは、右クリック ⇒ 「Copy」(あるいは「shift + control + C」)

# docker 版 MALIVE! のTIPS

- X11 転送 (gnuplot など)
  - XQuartz をインストール
  - XQuartz のメニューから環境設定→セキュリティタブ
    - 2つあるチェックボックスの両方をON にする
  - XQuartz を再起動
- 共有ディレクトリ
  - 起動前にホームディレクトリ直下に share という名前のディレクトリを作つておく
  - すでに実行していた場合は終了後、 malive remove でアンインストールしてやり直す

# ディレクトリ構成

- /usr/bin
  - インストール済みの実行ファイル (e.g., HPhi)
- /usr/share/ソフトウェア名
  - サンプルファイルなどの補助ファイル
    - 例えば /usr/share/hphi/samples はHΦのチュートリアルファイル

# パッケージの更新

- HΦなどのプリインストールアプリはすべて Debian パッケージとして提供されている
- apt を利用して更新をインストール可能
  - インストール・更新時には管理者権限が必要
  - sudo apt update
    - パッケージ一覧の更新
  - sudo apt install パッケージ名
    - 最新版のインストール or 更新
- NOTE: Julia はプリインストールされていませんが、Debian パッケージがあるので簡単にインストールできます (2023-03-14 現在 v1.5.3)
  - sudo apt install julia

# HΦ チュートリアル

- HΦ のチュートリアルは <https://issp-center-dev.github.io/HPhi/manual/master/tutorial/en/html/index.html> にあります
- チュートリアルに対応するサンプルファイルは HΦ のソースコードでは HPhi/samples にあります
  - MateriApps LIVE! では /usr/share/hphi/samples
  - サブディレクトリ tutorial\_X.Y がそのままチュートリアル X.Y 節に対応

```
$ cd  
$ mkdir work  
$ cd work  
$ cp -r /usr/share/hphi .  
$ cd hphi/samples
```

# HΦ チュートリアル

- 各ディレクトリにサンプルが置いてあります
  - `stan.in` や `stan1.in` などはスタンダードモードの入力ファイル  
`HPhi -s stan.in`
  - その他、`python` スクリプト `*.py` がおいてあるチュートリアルもあります
    - これらはチュートリアル以外でも好きに使ってください

# チュートリアル一覧

- 1 章 基底状態計算・低エネルギー励起状態計算
  - 1.1 ハイゼンベルグダイマー
  - 1.2 ハバードダイマー
  - 1.3 ハバードトリマー (発展課題)
  - 1.4 反強磁性ハイゼンベルグ鎖
  - 1.5 J1-J2 正方格子ハイゼンベルグ模型
  - 1.6 エキスパートモード (発展課題)
  - 1.7 固有ベクトル (発展課題)

# 1.1 ハイゼンベルグダイマー

- 1章では基底状態ないしは低エネルギー励起状態を計算する手法を学ぶ
- 1.1 ではもっとも基本的な量子模型である、ハイゼンベルグダイマーを調べる

$$\mathcal{H} = JS_0 \cdot S_1$$

- $S=1/2$  の場合は  $4\times 4$  という非常に小さな行列であり、手で対角化が可能
  - それ故に検算が容易であり、教育的な模型といえる
  - 1.1.1 固有状態のエネルギーを求めてみよう
  - 1.1.2 スピンの大きさ  $S$  を変えてみよう
  - 1.1.3 縦磁場をかけてみよう
  - 1.1.4 Lanczos 法をためしてみよう
  - 1.1.5 LOBCG 法をためしてみよう

# 1.2 2site-Hubbard

- 1.2 では電子が動く最小の模型としてハバードダイマーを考える

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left( c_{0\sigma}^\dagger c_{1\sigma} + \text{h.c.} \right) + U \sum_{i=0,1} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

- 電子数  $n=2$ , スピンz成分  $S_z=0$  の部分空間はこれまた  $4\times 4$  と小さい
  - 1.2.1 エネルギーを計算して厳密解と比較しよう (fulldiag)
  - 1.2.2 LOBCG 法で求めてみよう

# 1.3 3site- Hubbard

- 1.3 では三角形の頂点間を飛び回る電子を考える

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left( c_{0\sigma}^\dagger c_{1\sigma} + c_{1\sigma}^\dagger c_{2\sigma} + c_{2\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + \text{h.c.} \right) + U \sum_{i=0,1,2} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

- 電子数を  $n=2$  として斥力ポテンシャル  $U>0$  を考える
  - 見た目は（比較的？）単純ながら結果は非自明となる
  - 1.3.1 ホッピング  $t < 0$  で基底状態が完全強磁性になることを確かめよう
    - ヒント： $S^2$  の値を見てみよう (output/zvo\_phys\_Nup1\_Ndown1.dat)
  - 1.3.2 ホッピング  $t$  や斥力ポテンシャル  $U$  を変えて  $S^2$  の変化を調べてみよう
    - $t > 0$  にしてみよう
    - $t_{01} = t_{12} = t_{20}/2 = -1$  のもとで、 $U = 2, 4$  の結果を比較してみよう
      - ヒント： trans.def を編集後、 HPhi -e namelist.def で実行

# 1.4 ハイゼンベルグ鎖

- 1.4 では鎖上に並んだスピンを考える

$$\mathcal{H} = J \sum_{i=1}^L \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \quad \mathbf{S}_i = \mathbf{S}_{i+L}$$

- 流石に  $L = 16$  とすると手では対角化できない
- 1.4.1  $S=1/2$  の基底エネルギーを求めてみよう
- 1.4.2 励起状態のエネルギーを求めてみよう
- 1.4.3 エネルギーギャップの  $L$  依存性を調べてみよう
  - 横軸を  $x=1/L$  にしたとき  $x=0$  が熱力学的極限
- 1.4.4  $S=1$  で同様にやってみよう
  - $S=1/2$  と  $S=1$  とでどのような変化があるか？
  - 扱えるサイト数が小さくなることに注意

# 1.5 J1-J2 正方格子ハイゼンベルグ

- 1.5 では正方格子上に並んだスピンを考える

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$

- $\langle i,j \rangle$  は最近接ペア、 $\langle\langle i,j \rangle\rangle$  は次近接ペア (対角線上)
- 2次元系の基本的な模型かつフラストレートスピニ系の基本的な模型
  - $J_2/J_1$  の値に応じて基底状態の相が移り変わる (量子相転移)
- 1.5.1 基底状態のスピン構造因子を計算しよう
  - $J_2/J_1 = 0, 1$  のそれぞれでピークの波数はどうなるだろうか?
  - gnuplot では `splot "Sq_eigen0.dat" with surface` とすると見やすい
- 1.5.2 励起状態のスピン構造因子を計算しよう

# 1.6 エキスパートモード

- 任意の2スピン相互作用は次のようにかける

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta} J_{i,j}^{\alpha,\beta} S_i^\alpha S_j^\beta$$

- HΦでは係数テンソル  $J$  を任意に設定可能
- もちろん 1スピン項（磁場）なども可能
- ハバード模型では更に複雑に設定できる
- $i,j$  のつなぎ方を変えることで、任意の格子・クラスターを表現可能
- スタンダードモードは代表的な模型・格子に関するエキスパートモード表現を自動生成している
- 1.6.1 いろいろな模型を考えてみよう
  - あなたの研究対象はどのように表現できるだろうか？

# 1.7 固有ベクトル

- ・ 厳密対角化法の利点として、固有状態そのものが得られることがある
  - ・ 波動関数そのものが得られるため、相関関数やトポロジカル物理量などいくらでも計算できる
- ・ 1.7.1  $S=1/2$ ,  $L=8$  の反強磁性ハイゼンベルグスピン鎖の基底状態と第一励起状態が直交していることを数値的に確かめよう

# チュートリアル一覧

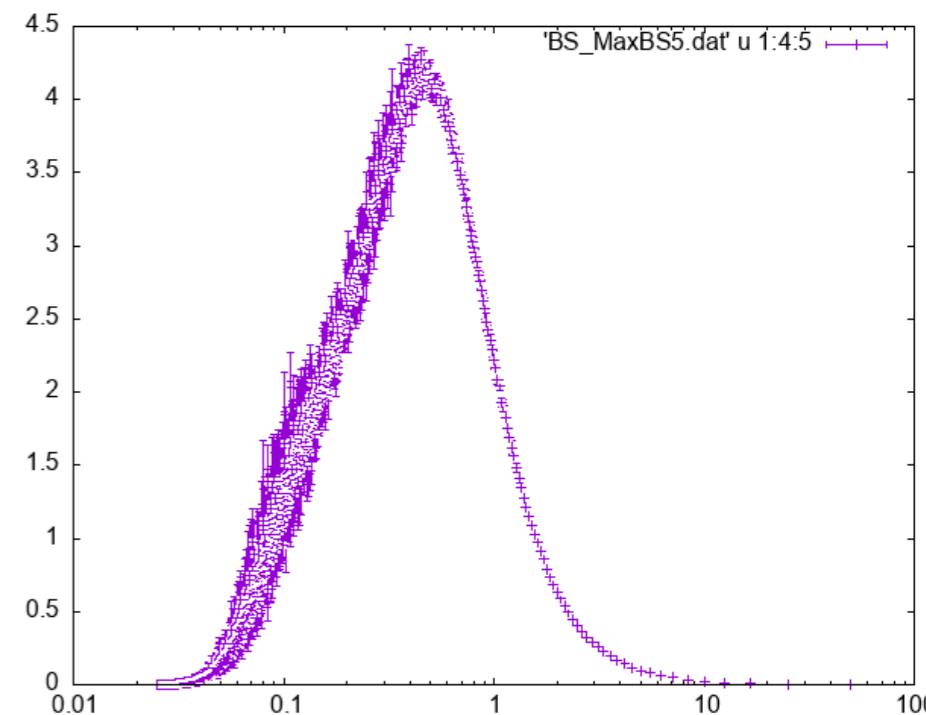
- 2 章 有限温度計算
  - 2.1 ハイゼンベルグ鎖
  - 2.2 Kitaev 模型 (発展課題)

# 2.1 ハイゼンベルグ鎖の有限温度計算

- 2.1.1 全対角化を用いた有限温度計算
  - すべての固有エネルギーがわかっているので、カノニカル平均の定義どおりに重みつき平均をとればよい (Finite.py)
- 2.1.2 mTPQ 法による有限温度計算
  - 熱的純粋量子状態 (TPQ state) を使うとLanczos や CG と同様のコストで有限温度計算が可能
    - 初期ベクトルを変えた複数の計算が必要なので定数倍の時間はかかる
    - AveSSrand.py
    - 全対角化の結果と比較してみよう
- 2.1.3 有限温度帯磁率計算
  - Sz のゆらぎから帯磁率が計算できる
    - AveFlct.py

# 2.1 ハイゼンベルグ鎖の有限温度計算

- 2.1.4 cTPQ 計算
  - スタンダードモードで実行するには develop ブランチの HPhi が必要
  - 再インストールしたくない場合
    - stan4.in の method を TPQ に変更
    - HPhi -sdry stan4.in で入力ファイルを作成
    - calcmod.def の CalcType を 5 に変更
    - HPhi -e namelist.def を実行
  - mTPQ は温度が揺らぐが、cTPQ は確定しているのが大きな違いのひとつ

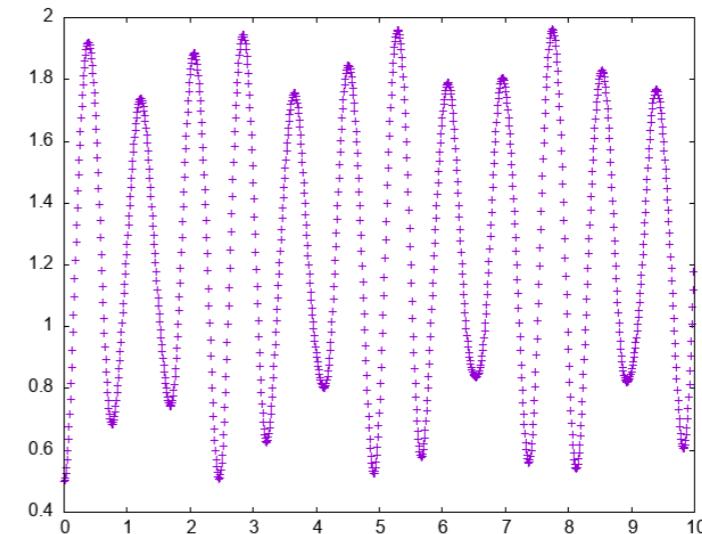


# チュートリアル一覧

- 3章 実時間発展
  - 3.1 ハバード模型のクエンチダイナミクス
  - 3.2 横磁場イジング模型の動的相転移（発展課題）

# 3.1 ハバード模型の実時間発展（クエンチ）

- 実時間発展演算子  $\exp(-itH)$  をかけることで実時間発展を実現
  - 初期状態として基底状態をCG法で計算 (stan1.in)
    - EigenvecIO = "out" で固有状態ベクトルが保存される
  - 基底状態からスタートして実時間発展 (stan2.in)
- 3.1.1 保存量
  - ノルムとエネルギーは保存量なので、クエンチダイナミクスでは不变
- 3.1.2 非保存量
  - ダブロンは非保存量（ハミルトニアンと非可換）なので、時間発展で変化する



## 3.2 クエンチダイナミクスによる量子相転移観測

- ・ クエンチ前後でハミルトニアンが同じ量子相に属するか否かでダイナミクスの振る舞いが定性的に異なる
  - ・ 量子相を分類可能
- ・ 横磁場イジング鎖
  - ・  $\Gamma / |J| < 0.5$  で強磁性 ( $\uparrow$ 、 $\downarrow$  の自発的対称性の破れ)
  - ・  $\Gamma / |J| > 0.5$  で「常磁性」 (x 方向に向く)
- ・  $\Gamma$  が 0.5 より小さい状態から 0.5 より大きい状態にクエンチする
  - ・ 磁化が振動するのが観測される

# チュートリアル一覧

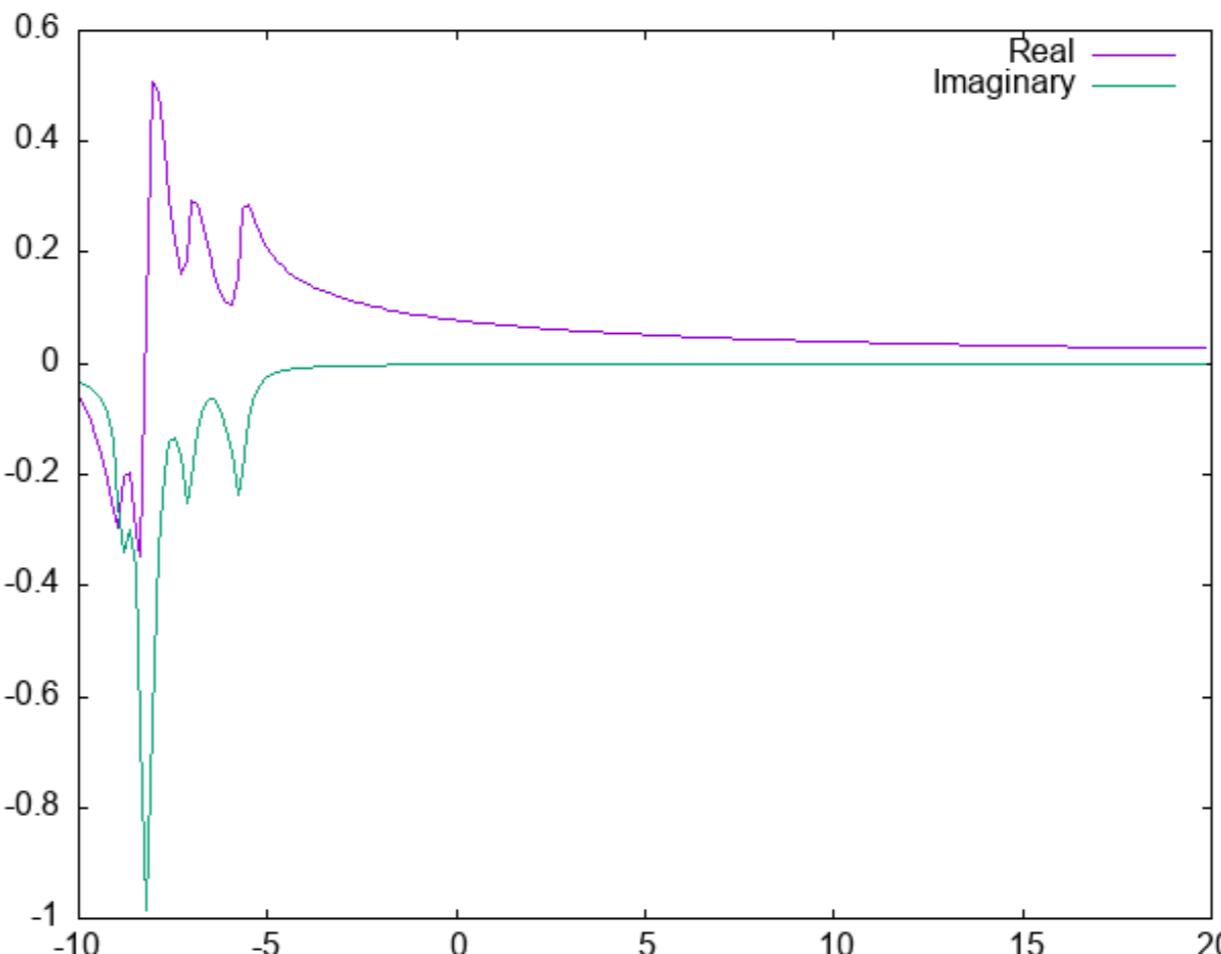
- 4 章 動的な物理量
  - 4.1 動的構造因子
  - 4.2 ハバード鎖の光学応答（発展課題）
  - 4.3 ハイゼンベルグ鎖のスピン波（発展課題）

# 4.1 動的 спин構造因子

- 動的構造因子を計算する

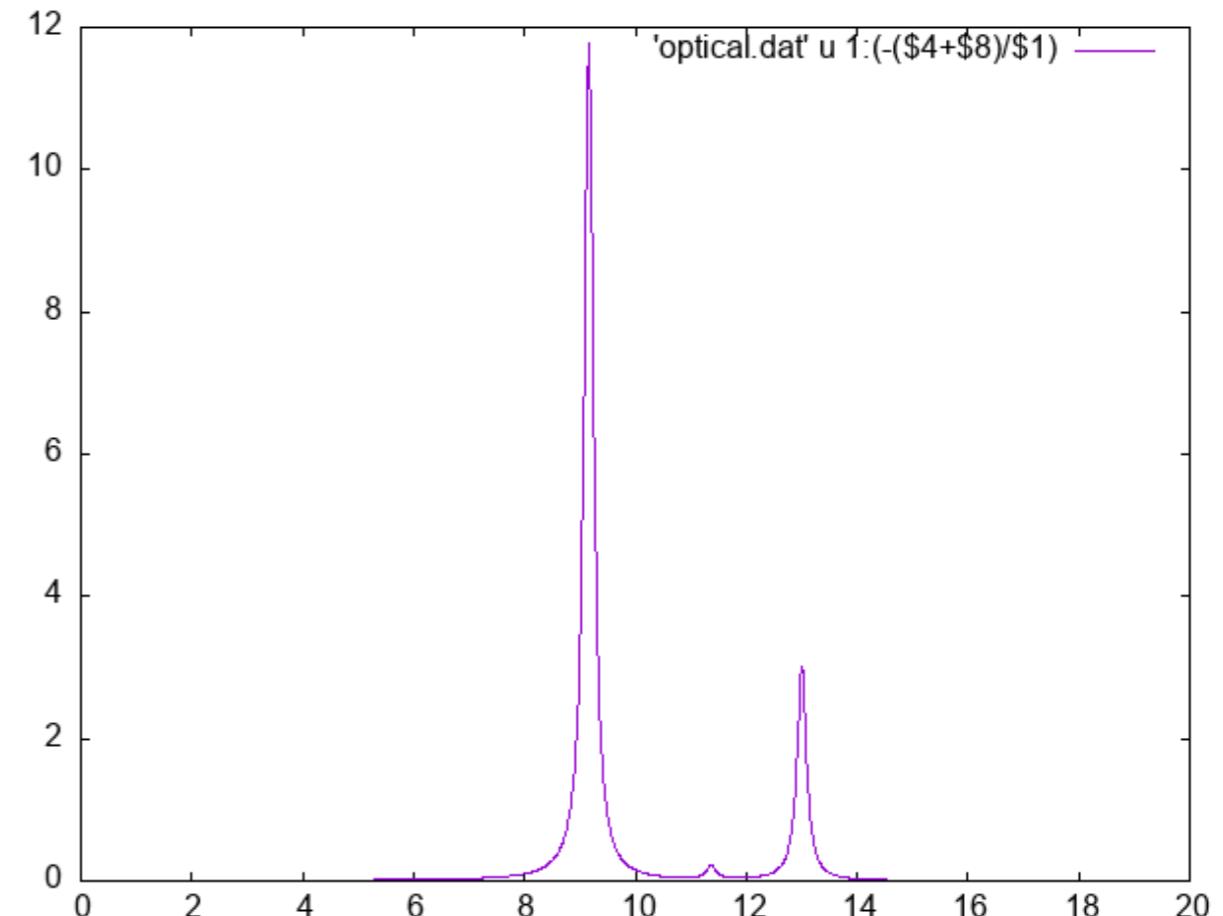
$$G_{S_z, S_z}(Q = (\pi, \pi), \omega) = \left\langle S_z(-Q) \left| [\mathcal{H} - \omega - \omega_0 + i\eta]^{-1} \right| S_z(Q) \right\rangle$$

- まず基底状態をCG法で得る (stan1.in)
  - EigenvecIO = "out" で固有状態ベクトルが保存される
- 演算子の種類や波数、振動数の範囲などを指定してスペクトル計算 (stan2.in)



## 4.2 光学伝導度

- 励起状態を得るための演算子を自分で定義することで、より複雑なスペクトルを計算可能
- ハバード模型の光学伝導度は電流・電流相関として得られる
  - 電流は隣り合うサイト間のホッピングについて、向きに応じて符号を変えることで実現可能



# 4.3 分散関係

- ・ 波数を変えながらスペクトルを計算することで分散関係が得られる
- ・  $S=1/2$  反強磁性ハイゼンベルグ鎖のSzSz分散を計算してみましょう
  - ・ des Cloizeaux Pearson モード

