

# 東大物性研ソフトウェア開発・高度化プロジェクト事例の紹介(1)

## ～有効模型ソルバー用オープンソースソフトウェア HΦ

東京大学 物性研究所<sup>A</sup>, 東京大学 大学院工学系研究科<sup>B</sup>, 東京大学 大学院理学系研究科<sup>C</sup>

吉見一慶<sup>A</sup>, 河村光晶<sup>A</sup>, 川島直輝<sup>A</sup>, 山地洋平<sup>B</sup>, 三澤貴宏<sup>B</sup>, 藤堂眞治<sup>A,C</sup>

2016年度ソフトウェア開発・高度化

現在募集中(※切: 2015/12/11)

ソフトウェア開発・高度化Webページ  
へのQRコード(概要・FAQなどが記載)



### 1. ソフトウェア開発・高度化プロジェクトとは?

#### 簡易概要

東京大学物性研究所では、物性研究所共同利用スーパーコンピュータ(以下、物性研スパコン)の利用促進を目指し、2015年4月からソフトウェア開発・高度化のプロジェクトを開始しました。本プロジェクトでは、並列計算の高度化・複雑化に対応するため、物性研究分野で特に重要であり、物性研スパコン上での利用が見込まれるプログラムを対象に、その開発または高度化を行います。利用者がより簡便に高度な並列計算を実施できる環境を整備することで、新規現象の予測や実験結果との検証などを迅速に可能とする、ユーザビリティの高い計算機資源の提供を行なっていきたいと考えています。

#### プロジェクトの流れ

対象とするプログラムは、毎年物性研究所の公募により募集を行い、共同利用委員会による審査の上、選定します。選定されたプロジェクトは、下記プロジェクト体制のもと、約1年の期間を通してソフトウェアの開発・高度化を行います。

<プロジェクト体制>

プロジェクトマネージャー(デベロッパー兼) 吉見一慶

デベロッパー 河村光晶

コーディネーター(1名/プロジェクト) 物性研スタッフ

高度化支援では開発だけではなく、付随するドキュメントの整備や普及支援(物性研スパコンへのインストールやウェブページへの掲載など)、物性研スパコンでのテスト計算実施なども行います。

2015年度採択案件

1. 高並列汎用量子格子模型ソルバー・パッケージの整備・公開

提案者: 山地洋平(東京大学 大学院工学系研究科)

2. 第一原理電子状態計算ソフトウェア OpenMX の高度化

提案者: 尾崎泰助(東京大学 物性研究所)

### 2. 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<sup>[1]</sup>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<sup>[2]</sup>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.0.1 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

・ソフトウェア開発・高度化提案者/協力者

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),

・ソフトウェア開発・高度化メンバー

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<sup>[1]</sup>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<sup>[2]</sup>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](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. 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 Heisenberg Chain 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(東大物性研スパコン システム B で計算実施)

#### 4-1. カゴメ格子(S=1/2)

計算時間 : Sz=0 は 1 時間 35 分程度 (40 スレッド)

計算手法 : Lanczos 法

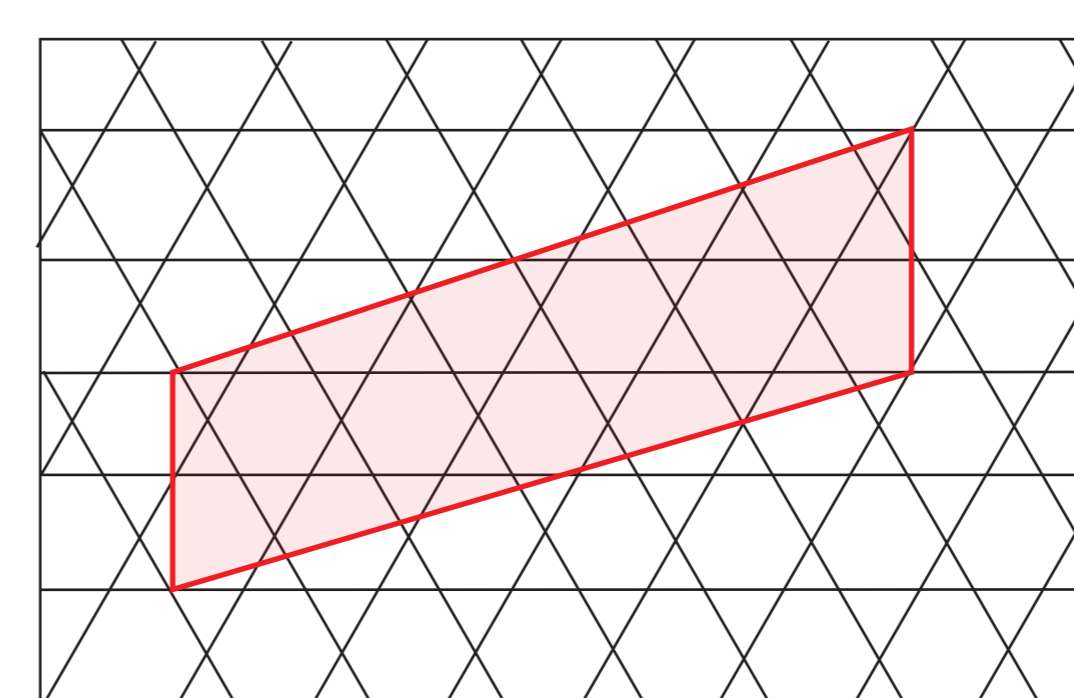
対象系 : スピノカノニカル

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)

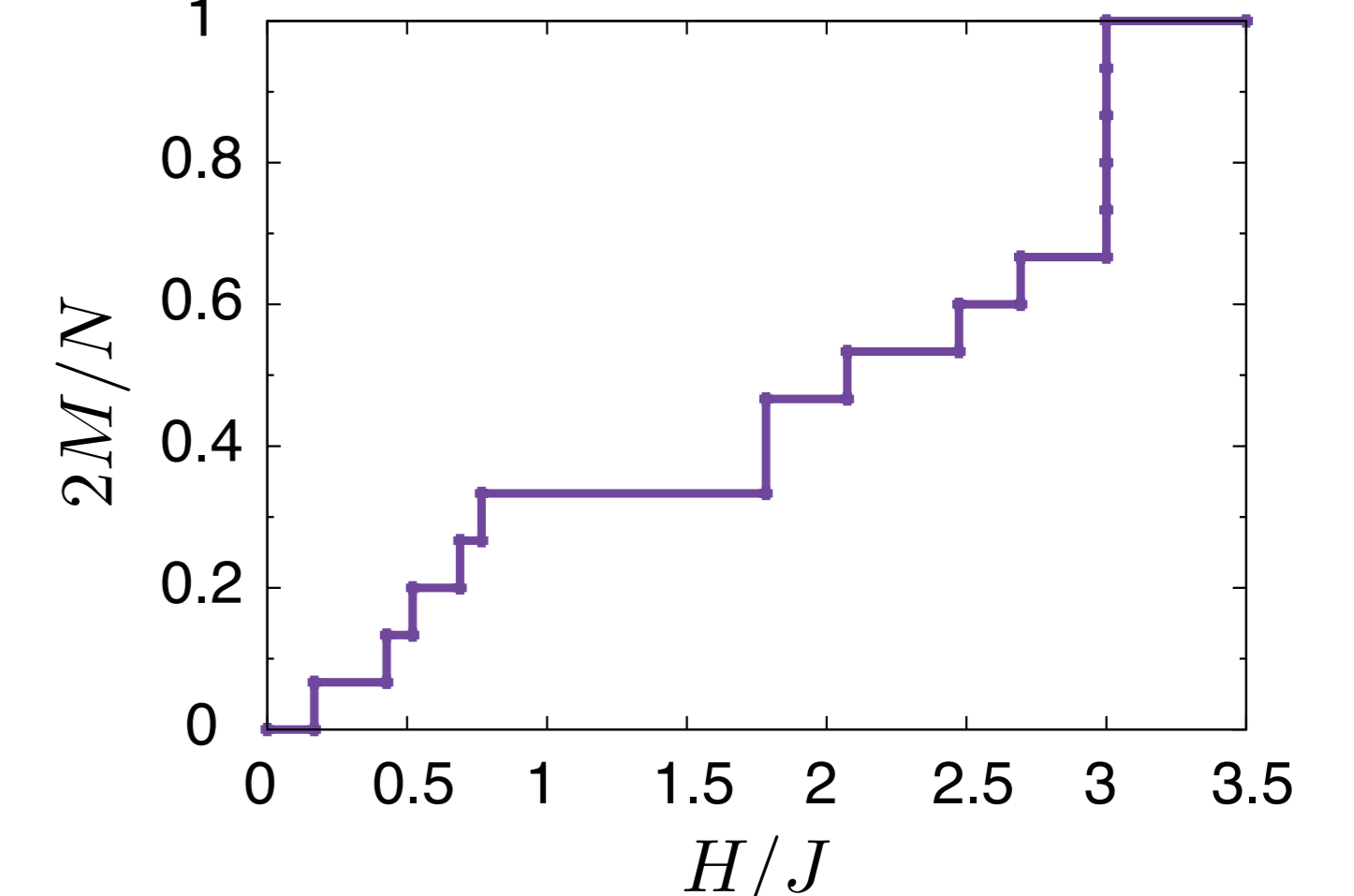
計算結果 : 基底エネルギー = -13.3768394247395 = -0.4458946475\*N (N=30)

(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)



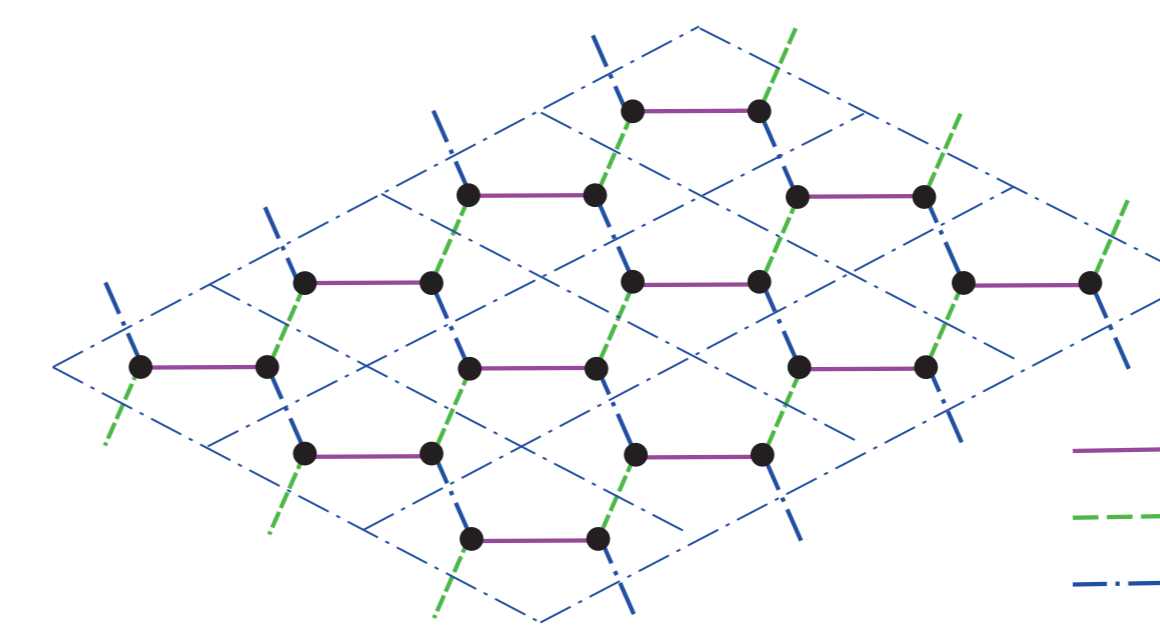
#### 4-2. Kitaev 模型(S=1/2)

計算時間 : 約 8 時間 (7 時間 58 分) 程度 (40 スレッド)

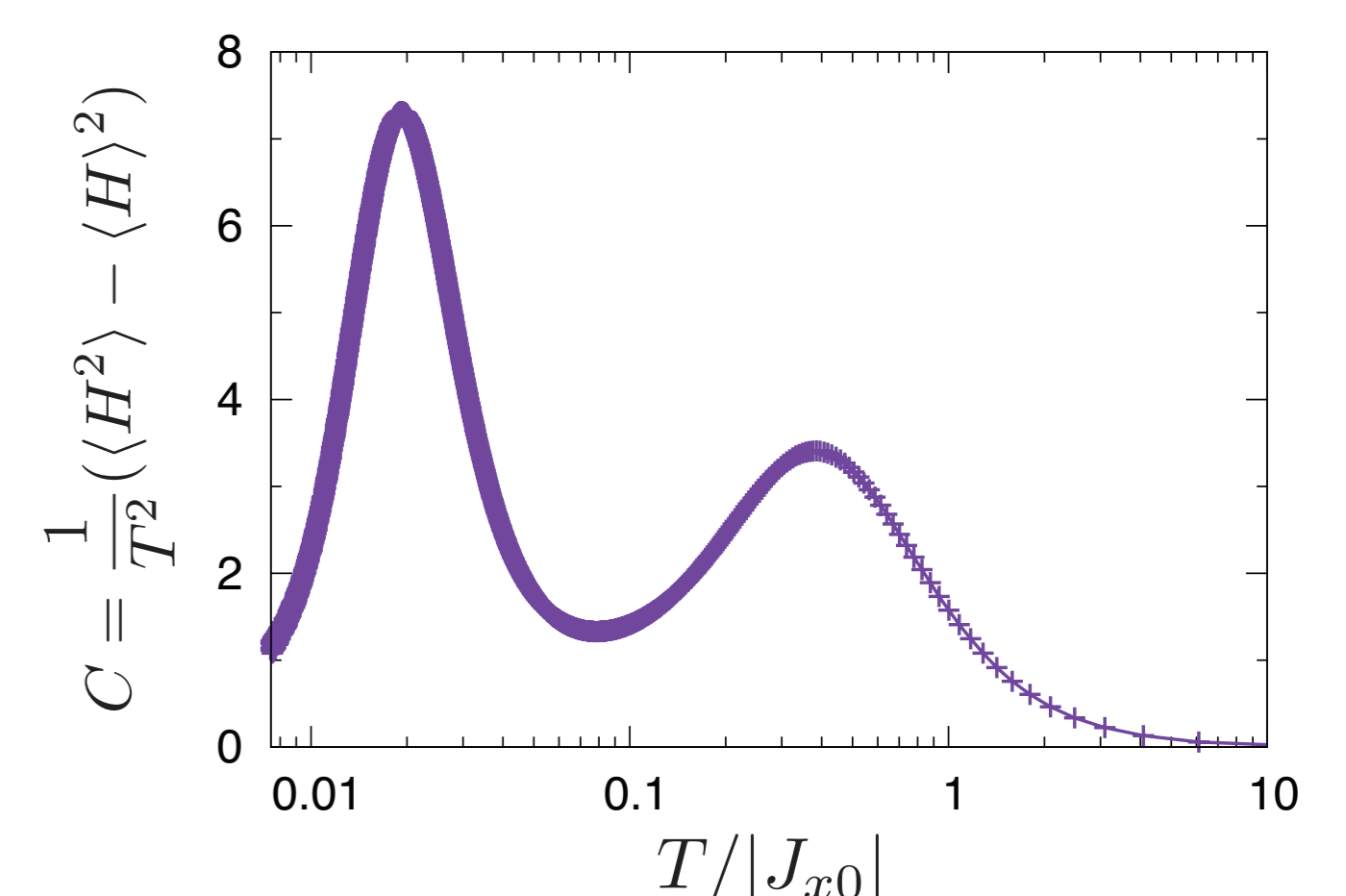
計算手法 : TPQ 法 (run 5 回 × 2000 step/run)

対象系 : スピンランドカノニカル

パラメータ : L=3, W=4,  $J_{x0} = J_{y1} = J_{z2} = -1$



ex.) Honeycomb 格子 (L=3, W=4)



### 5. 今後の計画

2015年12月中旬 : ver. 0.2 リリース (実装予定機能: 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 (実装予定機能: 一部モデルの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

「第6回 CMSI 研究会 (HPCI 戦略プログラム分野2 最終報告会)」2015/12/07(月) ポスター発表 東京大学 小柴ホール