

HΦ講習会: HΦの概要

山地洋平

東京大学大学院工学系研究科附属量子相エレクトロニクス研究センター

1. HΦとは?
2. HΦでできること
3. HΦをどう使うか
4. HΦの使用例



HΦとは

実験と理論の直接比較・数値計算手法開発促進を目指して

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)が開発された量子スピン模型に対する先駆的な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。2015/2016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>

HΦとは

実験と理論の直接比較・数値計算手法開発促進を目指して

数値厳密対角化法による量子格子模型ソルバー

-広汎な多体量子系に対応

-ランチョス法[1]: 基底状態及び低励起状態の波動関数

-熱的純粋量子(TPQ)[2]: 有限温度物理量計算

-ハイブリッド並列化

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

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

オープンソース・ソフトウェア

ライセンス: GNU GPL version3*

*自由に使ったり、変更したり、頒布してください。

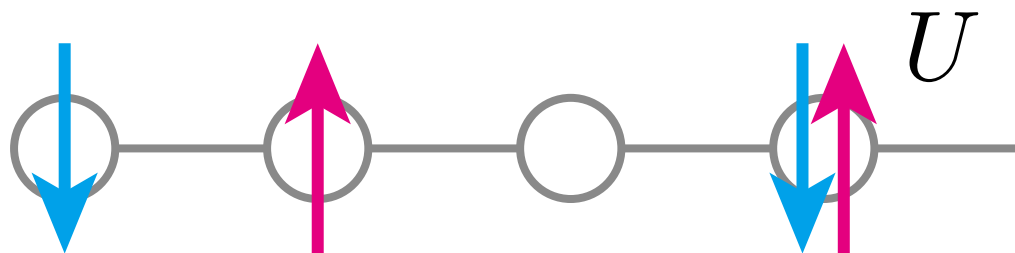
ただし、HΦの開発者の著作権をみとめ、変更を明示し、再配布もGPLv3で行ってください。

HΦでできること: 量子格子模型

- ・ 計算できる系

遍歴電子系: Hubbard-type model

$$H = -\mu \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - \sum_{i \neq j} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_{i=1}^N n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i \neq j} V_{ij} n_i n_j$$



Fermion Hubbard: 粒子数・トータル S_z 保存

HubbardNConserved: 粒子数保存・トータル S_z 非保存

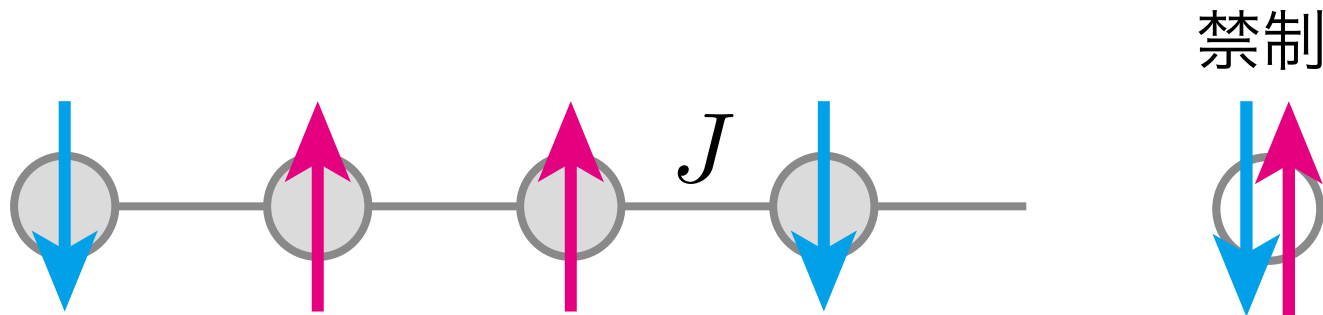
Fermion HubbardGC: 粒子数・トータル S_z 非保存

HΦでできること: 量子格子模型

- ・ 計算できる系

局在スピン系: Heisenberg-type model

$$H = -h \sum_{i=1}^N S_i^z + \Gamma \sum_i S_i^x + D \sum_i S_i^z S_i^z + \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta=x,y,z} J_{ij}^{\alpha\beta} S_i^\alpha S_j^\beta$$



Spin: トータル S_z 保存

SpinGC: トータル S_z 非保存

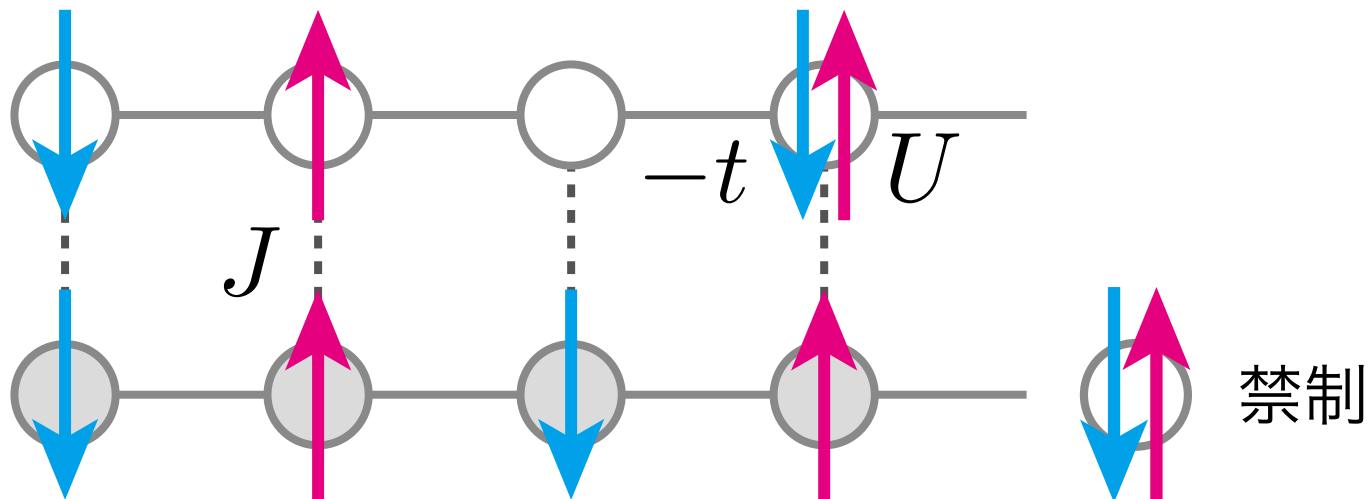
$S > 1/2$ にも対応

HΦでできること: 量子格子模型

- 計算できる系

複合系: Kondo-Lattice-type model

$$H = -\mu \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} - t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \frac{J}{2} \sum_{i=1}^N \left\{ S_i^+ c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} + S_i^- c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + S_i^z (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \right\}$$



Kondo Lattice: 粒子数・トータル S_z 保存

Kondo LatticeGC: 粒子数・トータル S_z 非保存

HΦでできること: 計算手法

・ 計算手法

完全対角化法

- ハミルトニアン行列の生成
- Lapackによる対角化: ZHEEV等
- 小さな系の計算とLanczos&TPQの精度確認

ハミルトニアン行列生成: SpinGC

$$\hat{H} = \sum_{i,j} J_{i,j}^{\alpha\beta} \hat{S}_i^\alpha \hat{S}_j^\beta \rightarrow H_{ij} = \langle i | \hat{H} | j \rangle$$

基底の例: 3スピン基底

$$\left\{ \begin{array}{l} |0\rangle = |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \\ |1\rangle = |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\ |2\rangle = |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \\ |3\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\ |4\rangle = |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\ |5\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \\ |6\rangle = |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\ |7\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \end{array} \right.$$

HΦでできること: 計算手法

- ・ 計算手法

Lanczos法:

ハミルトニアン行列を生成しない大規模粗行列解法

Krylov部分空間の一種

$$\begin{aligned}\mathcal{K}_L(\hat{H}, |\phi_0\rangle) &= \{|\phi_0\rangle, \hat{H}|\phi_0\rangle, \dots, \hat{H}^{L-1}|\phi_0\rangle\} \\ &= \{|\phi_0\rangle, |\phi_1\rangle, \dots, |\phi_{L-1}\rangle\} \quad (\text{正規直交基底})\end{aligned}$$

上手に正規直交化する場合、最小で波動関数2本を記憶すれば基底状態あるいは低励起状態を計算できる
→Lanczos法

HΦでできること: 計算手法

Lanczos法

do $k=1, N_{\text{step}}$ ($|\phi_{-1}\rangle = 0$)

$$|\tilde{\phi}_k\rangle = \hat{H}|\phi_{k-1}\rangle - \beta_{k-1}|\phi_{k-2}\rangle - \alpha_{k-1}|\phi_{k-1}\rangle$$

$$\alpha_k = \langle \phi_k | \hat{H} | \phi_k \rangle$$

$$\beta_k = \langle \phi_{k-1} | \hat{H} | \phi_k \rangle = \sqrt{\langle \tilde{\phi}_k | \tilde{\phi}_k \rangle}$$

$$|\phi_k\rangle = |\tilde{\phi}_k\rangle / \sqrt{\langle \tilde{\phi}_k | \tilde{\phi}_k \rangle}$$

enddo

$$\hat{H} \doteq \hat{H}_{\text{td}} = \begin{bmatrix} \alpha_0 & \beta_1 & 0 & 0 & \dots \\ \beta_1 & \alpha_1 & \beta_2 & 0 & \dots \\ 0 & \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & \\ 0 & 0 & \beta_3 & \alpha_3 & \\ \vdots & \vdots & & & \ddots \end{bmatrix}$$

→三重対角行列の固有値が
ハミルトニアンの固有値
-最大・最小固有値が高精度
-小さな H への適用は要注意

HΦでできること: 計算手法

- ・ 計算手法

Imada & Takahashi (1986)
Jaklic & Prelovsek (1994)
Hams & De Raedt (2000)

有限温度計算:

カノニカル平均を典型的な波動関数による期待値で置き換える

Imada & Takahashi (1986)

$$1) |\Phi_T\rangle = e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}} |\Phi_0\rangle \frac{1}{\sqrt{Z}} \sum_m |\phi_m\rangle \simeq (\text{random vector})$$

$$(\hat{H} |\phi_m\rangle = E_m |\phi_m\rangle)$$

$$2) |\Phi_T\rangle = e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}} |\Phi_0\rangle / \sqrt{\langle \Phi_0 | e^{-\beta\hat{H}} | \Phi_0 \rangle}$$

$$\Rightarrow \langle \Phi_T | \hat{O} | \Phi_T \rangle = \sum_m e^{-\beta E_m} \langle \phi_m | \hat{O} | \phi_m \rangle / Z$$

$$\text{for } [\hat{H}, \hat{O}] = 0$$

HΦでできること: 計算手法

- ・ 計算手法

有限温度計算:

カノニカル平均を典型的な波動関数による期待値で置き換える

Replacing canonical ensemble with *typical* wave functions

Thermal Pure Quantum (TPQ) States

Sugiura & Shimizu, PRL 108, 240401 (2012)

Initial state (at $T = +\infty$): $|\Phi_0\rangle =$ (Random vector)

do $k=1, N_{\text{step}}$ If possible, taking random average

$$|\Phi_k\rangle = (\ell - \hat{H}/N) |\Phi_{k-1}\rangle / \sqrt{\langle \Phi_{k-1} | (\ell - \hat{H}/N)^2 | \Phi_{k-1} \rangle}$$

$$u_k = \langle \Phi_k | \hat{H} | \Phi_k \rangle$$

$$\beta = 2(k/N) / (\ell - u_k) \quad (\beta = 1/k_B T)$$

$$\overline{O}(\beta) = \langle \Phi_k | \hat{O} | \Phi_k \rangle + \mathcal{O}(1/N) \quad \text{even for } [\hat{H}, \hat{O}] \neq 0$$

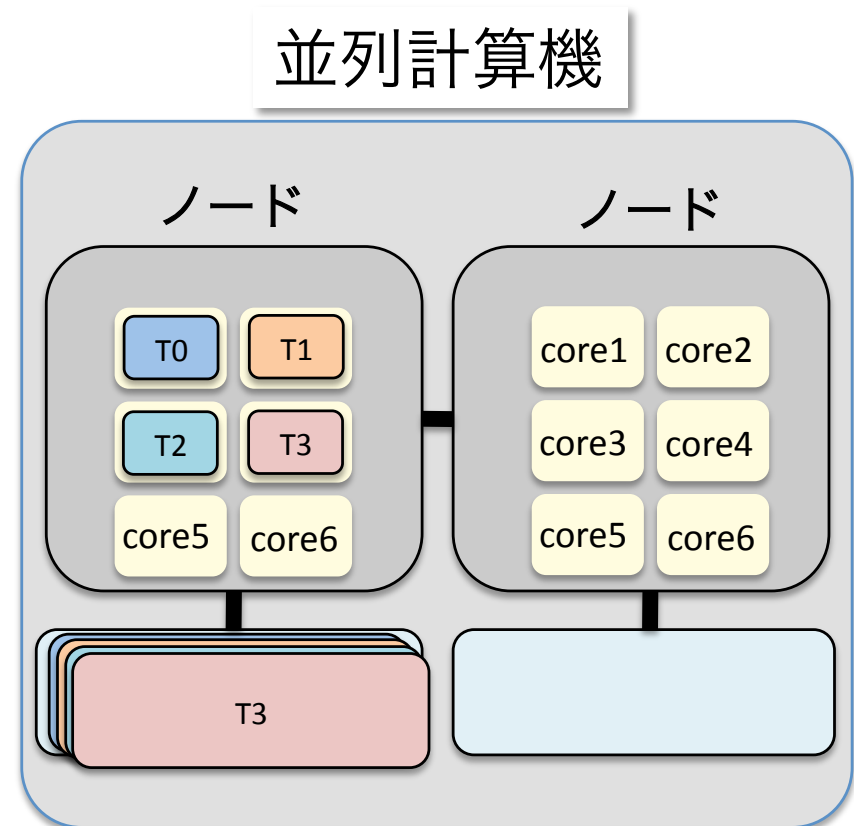
enddo

HPCでできること: 並列計算

- ・ハイブリッド並列

- 共有メモリ並列(OpenMP) スレッド
- 分散メモリ並列(MPI) プロセス

波動関数の分割例: 2プロセス



HΦでできること: 並列計算

- ・ハイブリッド並列

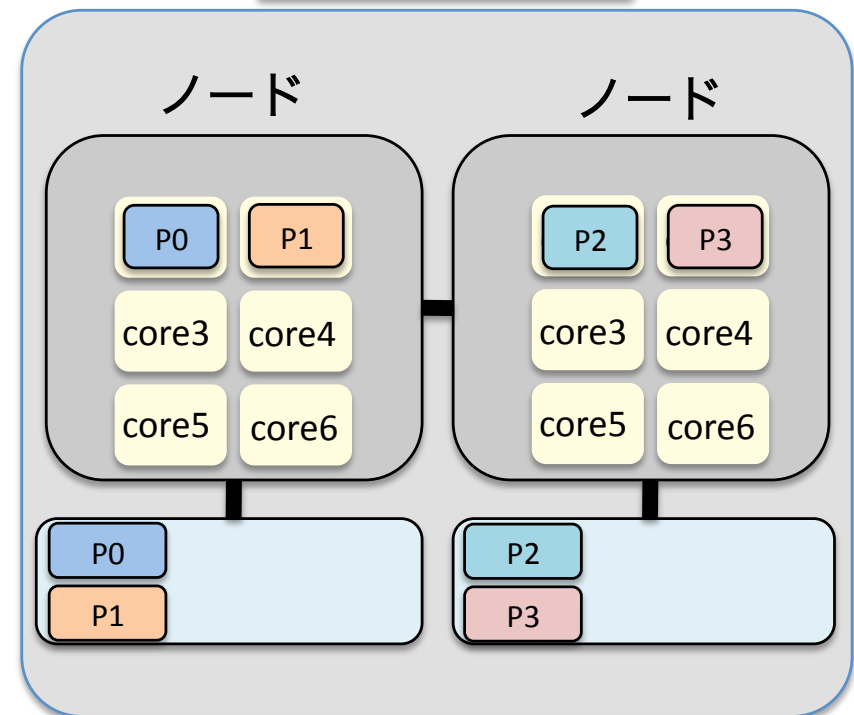
-共有メモリ並列(OpenMP) スレッド
-分散メモリ並列(MPI) プロセス

- ・Hubbard/Kondo Lattice /HubabrdGC
→ 4^n プロセス
- ・Spin/SpinGC
→ $(2S+1)^n$ プロセス

波動関数の分割例: 2プロセス

| | | | |
|-------------|-----|--|--------|
| $ 0\rangle$ | $=$ | $ \downarrow\downarrow\downarrow\rangle$ | rank 0 |
| $ 1\rangle$ | $=$ | $ \uparrow\downarrow\downarrow\rangle$ | |
| $ 2\rangle$ | $=$ | $ \downarrow\uparrow\downarrow\rangle$ | |
| $ 3\rangle$ | $=$ | $ \uparrow\uparrow\downarrow\rangle$ | |
| <hr/> | | | |
| $ 4\rangle$ | $=$ | $ \downarrow\downarrow\uparrow\rangle$ | rank 1 |
| $ 5\rangle$ | $=$ | $ \uparrow\downarrow\uparrow\rangle$ | |
| $ 6\rangle$ | $=$ | $ \downarrow\uparrow\uparrow\rangle$ | |
| $ 7\rangle$ | $=$ | $ \uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ | |

並列計算機



HΦをどう使うか

- ・ 計算モード

- スタンダード・モード

StdFace.def for 1D S=1/2 Heisenberg model

```
L = 16
```

System size

```
model = "Spin"
```

Model

```
method = "Lanczos"
```

Method

```
lattice = "Chain Lattice"
```

Lattice

```
J = 1.0
```

Exchange coupling

```
2Sz = 0
```

Total Sz

```
2S = 1
```

Size of spin

計算実行

```
PATH/HPhi -s StdFace.def
```

```
mpirun -np xx PATH/HPhi -s StdFace.def (xx: # of process)
```

HΦをどう使うか

- StdFace.def内パラメータ

```

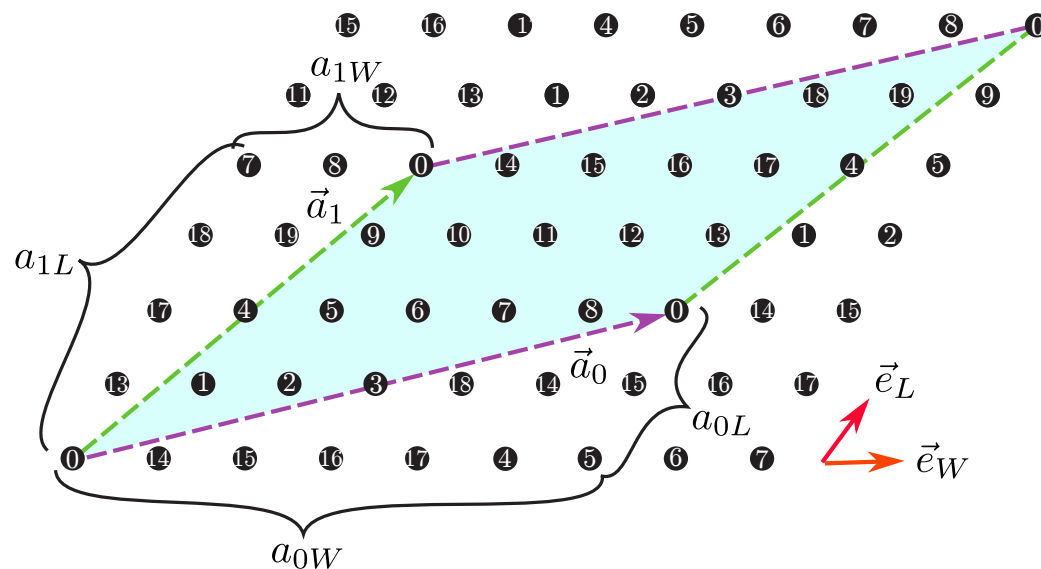
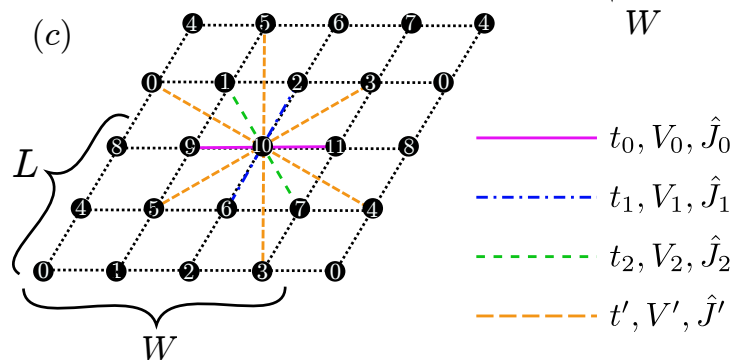
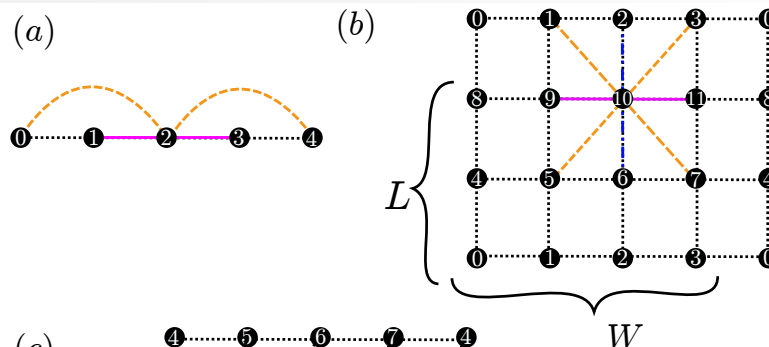
model:
Fermion Hubbard
Fermion HubbardGC
Spin
SpinGC
Kondo Lattice
    
```

```

method:
Lanczos
TPQ
Full Diag
    
```

```

lattice:
Chain Lattice
Square Lattice
Triangular Lattice
Honeycomb Lattice
Kagome Lattice
Ladder
& more
    
```



HΦをどう使うか

- ・ 計算モード

-スタンダード・モード

Output

| | |
|-----------|--|
| Lanczos | $\langle H \rangle, \langle c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} \rangle, \langle c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{l\sigma_4} \rangle$ |
| TPQ | $1/T, \langle H \rangle, \langle H^2 \rangle, \langle c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} \rangle, \langle c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{l\sigma_4} \rangle$ |
| Full Diag | $\langle H \rangle, \langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle, \langle (\sum_i \vec{S}_i)^2 \rangle, \langle c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} \rangle, \langle c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{l\sigma_4} \rangle$ |

HΦをどう使うか

・ 計算モード

-エキスパート・モード

$$H = \sum_{i,j} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} t_{i\sigma_1 j\sigma_2} c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} + \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4} I_{i\sigma_1 j\sigma_2; k\sigma_3 l\sigma_4} c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{l\sigma_4}$$

| | | |
|---|---------------------|---|
| Keyword & input file name list | <u>namelist.def</u> | |
| Parameter files for definition of model | zInterAll.def | $I_{i\sigma_1 j\sigma_2; k\sigma_3 l\sigma_4}$ |
| | zTrans.def | $t_{i\sigma_1 j\sigma_2}$ |
| | zlocspn.def | (To specify local spins) |
| Parameter files for calculation | <u>modpara.def</u> | |
| | calcmod.def | |
| List of Green functions to be output | greenone.def | $\langle c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} \rangle$ |
| | greentwo.def | $\langle c_{i\sigma_1}^\dagger c_{j\sigma_2} c_{k\sigma_3}^\dagger c_{l\sigma_4} \rangle$ |

計算実行

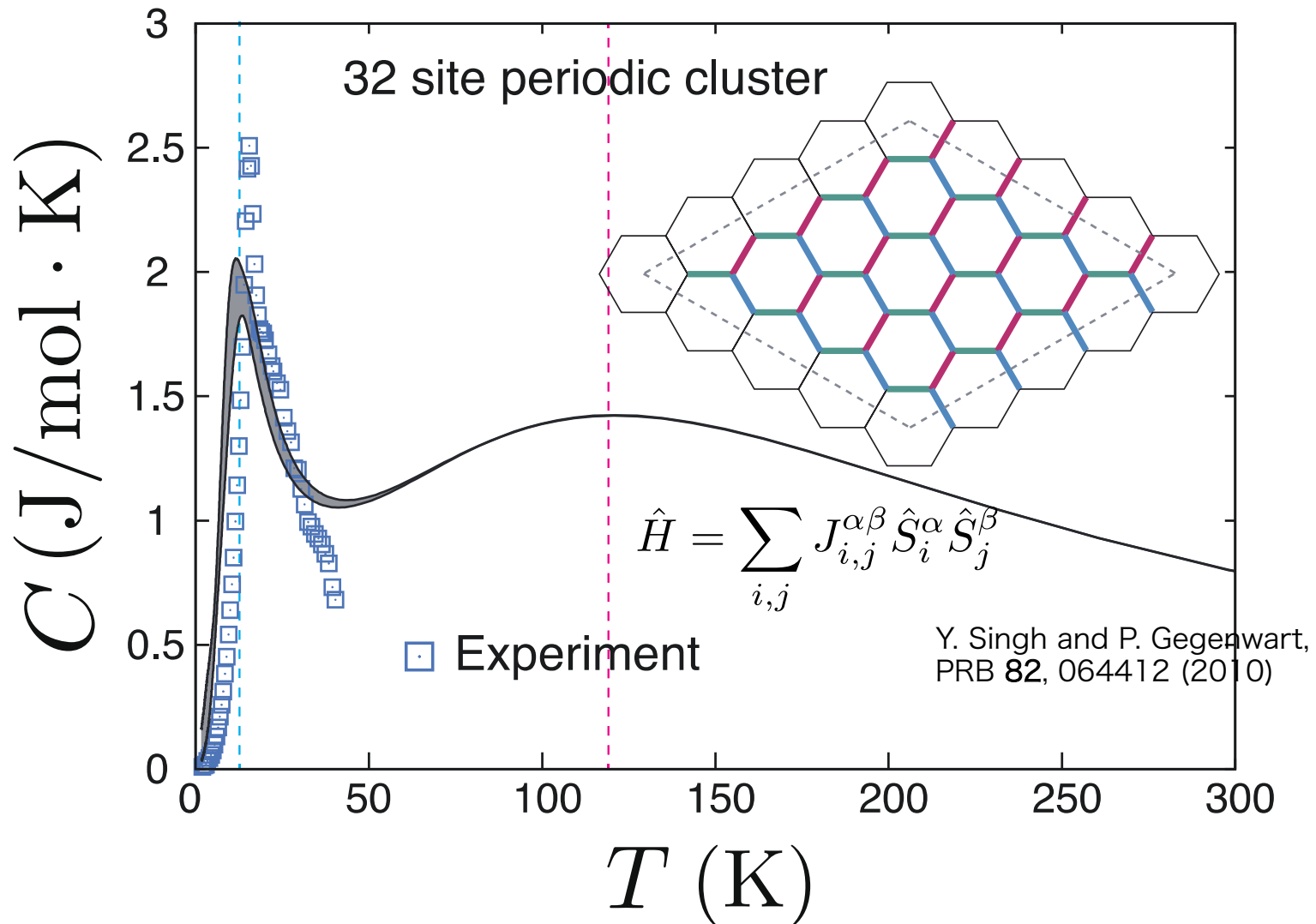
```
PATH/HPhi -e namelist.def  
mpirun -np xx PATH/HPhi -e namelist.def
```

TPQの使用例: Na_2IrO_3 の比熱

-32サイト 64GB

-1000 Lanczos step

$$C = \left(\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2 \right) \beta^2$$



TPQの使用例: Na_2IrO_3 の構造因子

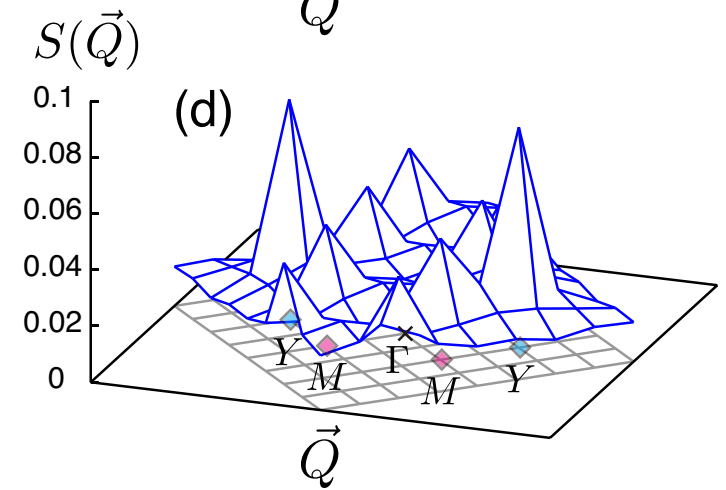
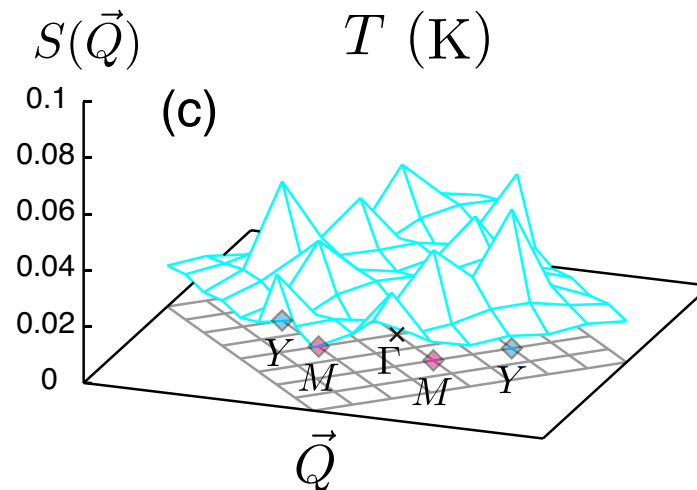
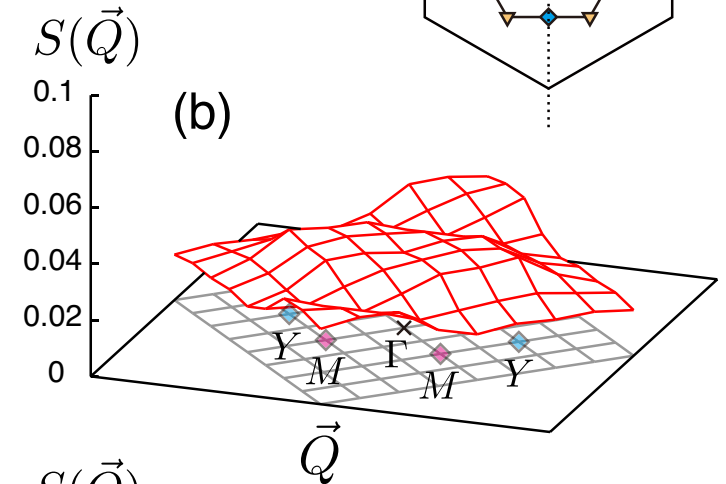
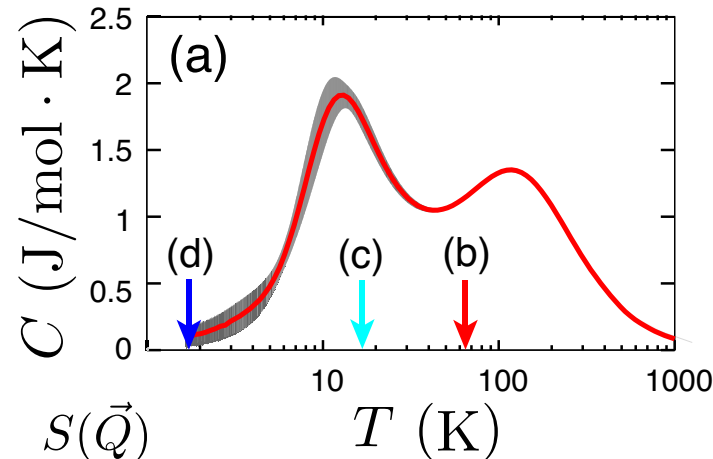
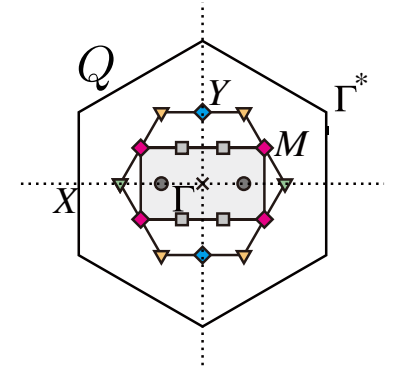
計算例 (hybrid 64 process)

@ISSP system C

-32サイト
(Sz非保存)

-TPQ

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



付録: Na₂IrO₃のハミルトニアン

$$\hat{H} = \sum_{\Gamma=X,Y,Z,Z_{2\text{nd}},3} \sum_{\langle \ell,m \rangle \in \Gamma} \vec{\hat{S}}_{\ell}^T \mathcal{J}_{\Gamma} \vec{\hat{S}}_m \quad \vec{\hat{S}}_{\ell}^T = (\hat{S}_{\ell}^x, \hat{S}_{\ell}^y, \hat{S}_{\ell}^z)$$

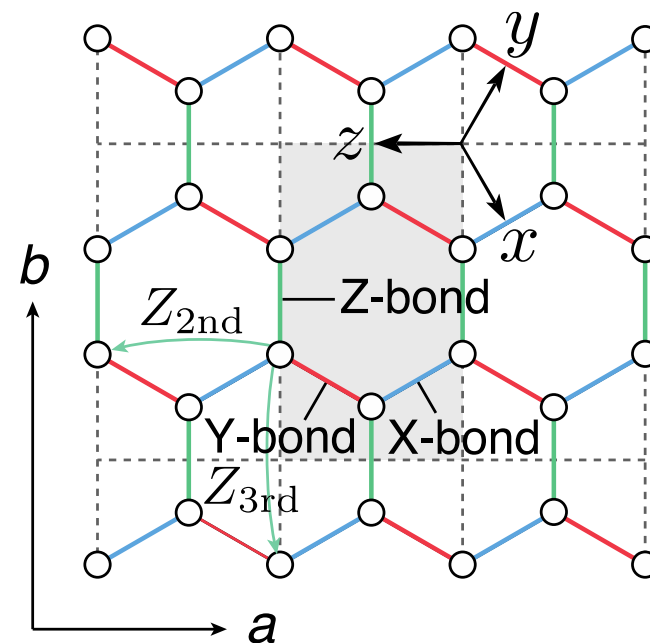
$$\mathcal{J}_X = \begin{bmatrix} -23.9 & -3.1 & -8.4 \\ -3.1 & 3.2 & 1.8 \\ -8.4 & 1.8 & 2.0 \end{bmatrix} \text{ (meV)}$$

$$\mathcal{J}_Y = \begin{bmatrix} 3.2 & -3.1 & 1.8 \\ -3.1 & -23.9 & -8.4 \\ 1.8 & -8.4 & 2.0 \end{bmatrix} \text{ (meV)}$$

$$\mathcal{J}_Z = \begin{bmatrix} 4.4 & -0.4 & 1.1 \\ -0.4 & 4.4 & 1.1 \\ 1.1 & 1.1 & -30.7 \end{bmatrix} \text{ (meV)}$$

$$\mathcal{J}_{Z_{2\text{nd}}} = \begin{bmatrix} -0.8 & 1.0 & -1.4 \\ 1.0 & -0.8 & -1.4 \\ -1.4 & -1.4 & -1.2 \end{bmatrix} \text{ (meV)}$$

$$\mathcal{J}_3 = \begin{bmatrix} 1.7 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 1.7 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 1.7 \end{bmatrix} \text{ (meV)}$$

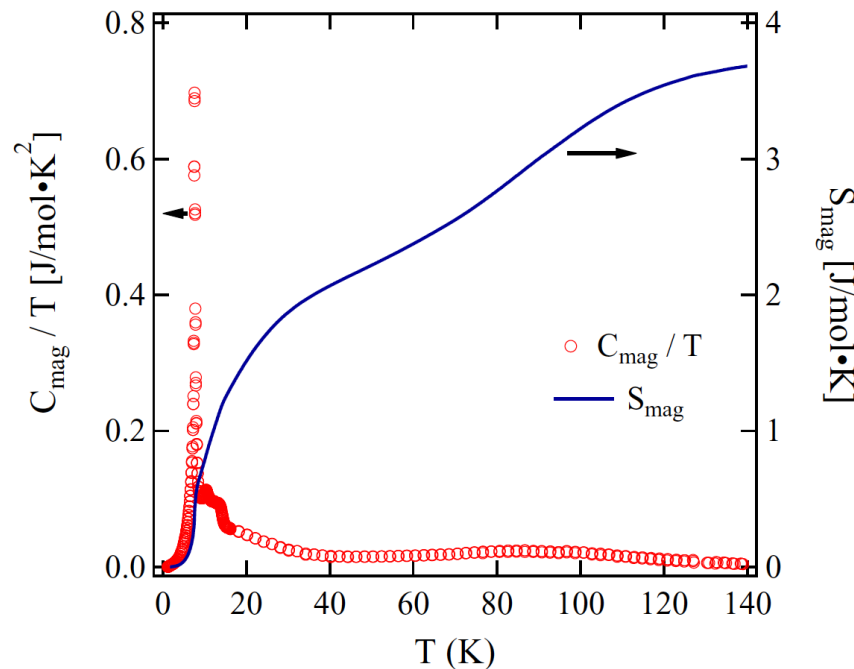


TPQの使用例: 実験データと理論模型の比較

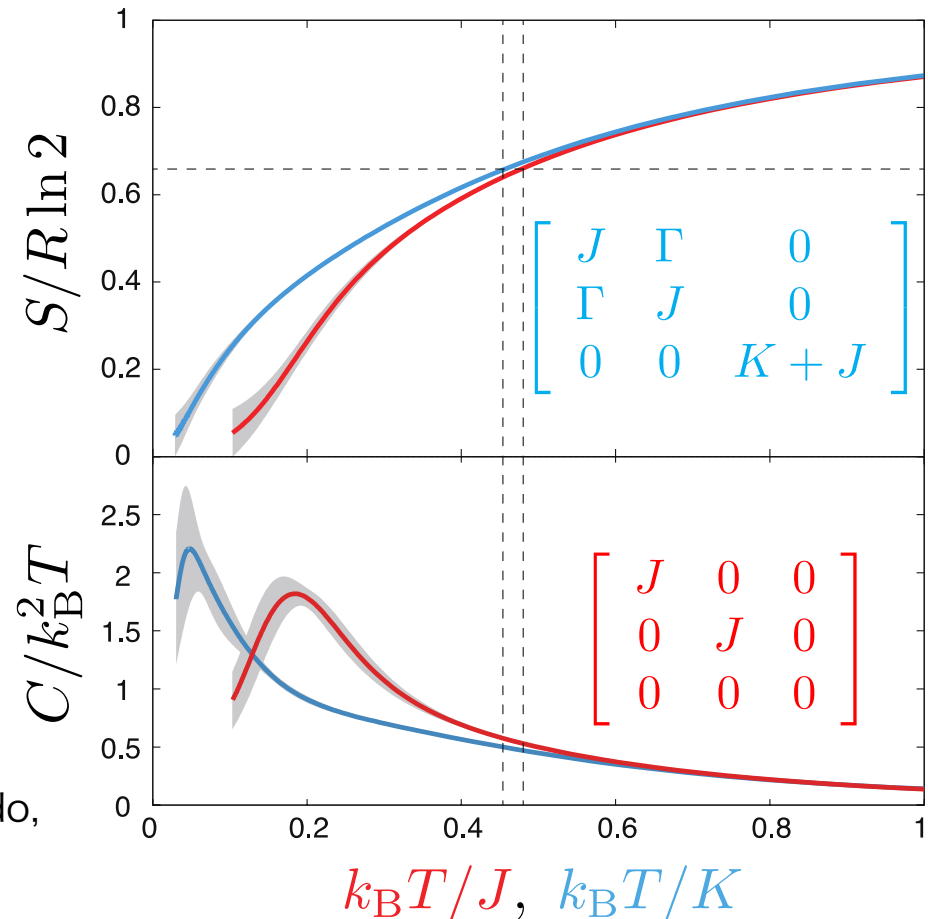
α -RuCl₃の有効模型の検証

- 24サイト 0.25GB
- 2000 Lanczos step
- 計算時間 < 1時間

$$\hat{H} = \sum_{i,j} J_{i,j}^{\alpha\beta} \hat{S}_i^\alpha \hat{S}_j^\beta$$



Y. Kubota, H. Tanaka, T. Ono, Y. Narumi, and K. Kindo,
Phys. Rev. B 91, 094422 (2015)



HΦを使ってみましょう!

実験と理論の直接比較・数値計算手法開発促進へ

- 広汎な量子格子模型に対応した高並列数値ソルバー
- Lanczos法による基底状態計算
- TPQ法による有限温度計算

演習問題

1. $S=1/2$ dimer (完全対角化)
2. $S=1/2$ dimer (Lanczos)
3. J_1 - J_2 Heisenberg model (Lanczos, TPQ)
4. Kitaev model (Lanczos, TPQ)
5. Hubbard chain (Lanczos, TPQ)

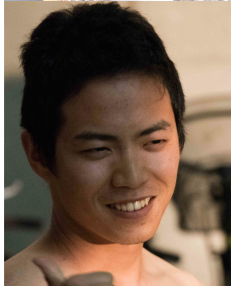
チームHΦ (敬称略、順不同)



三澤貴宏
東京大学物性研究所



藤堂眞治
東京大学大学院
理学系研究科



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



吉見一慶
東京大学物性研究所



謝辞: 本山裕一、
星健夫、曾我部知広