

Das ALPS-Projekt

Vorstellung & Anwendung

Konstantin Koschke Daniel Reith

Betreuer: Eberhard Jakobi
im Rahmen der Vorlesung
„moderne numerische Methoden der Festkörperphysik“
Prof. Dr. Nils Blümer

09. August 2007

Gliederung

Einleitung

Vorstellung des Projektes

Struktur

Anwendungsbeispiele

Eigene Ergebnisse

Exakte Diagonalisierung

Quanten-Monte-Carlo

Fazit

Literatur

Entwicklung freier (open-source) Bibliotheken und Programme zur Simulation stark korrelierter Quantensysteme auf Gittern

Designziele:

- ▶ Wiederverwertbarkeit des Codes bzw. der Algorithmen erhöhen
- ▶ Standardisierung eines Ein- und Ausgabeformats für physikalische Simulationen (XML und Binär)
- ▶ QMC für „Laien“

ALPS - Historie

- ▶ D. C. Johnston (Ames Laboratory) betonte den Nutzen von QMC Simulationen für Experimentalphysiker und deren Fits und lieferte die Idee für ALPS
- ▶ weitere Motivation: ψ -Mag Projekt, Oak Ridge Laboratories (Toolset für rechnergestützte Simulationen auf dem Gebiet des Magnetismus), sowie der Wunsch nach einfachem Code-Austausch
- ▶ Zusammenschluss vorhandener Bibliotheken und Algorithmen (PALM++ für MC, IETL für teilweise Diagonalisierung und dem open-source Looper code) ließ 2003 während eines Workshops in Guarda ALPS entstehen

Struktur

ALPS libraries

- ▶ XML Handling (Ein-, Ausgabe sowie Auswertung symbolischer Ausdrücke)
- ▶ ALPS scheduler (multithread)
- ▶ ALEA zur Durchführung von MC-Messungen und anschließender Fehleranalyse

ALPS applications

- ▶ vollständige und teilweise (Lanczos) Diagonalisierung
- ▶ klassisches Monte-Carlo (Ising-Modell)
- ▶ Quanten-Monte-Carlo (loop, dirloop_sse, qwl)
- ▶ Density Matrix Renormalisation Group (DMRG)

+ Skripte zur Umwandlung der XML Daten zur Weiterverarbeitung mit z.B. Gnuplot

Bereits definierte Modelle und Gitterkonfigurationen

lattices.xml

- ▶ Quadrat-, Rechtecks und Dreiecksgitter in verschiedenen Dimensionen
- ▶ fcc, hcp, bcc
- ▶ ...

mit **periodischen** oder **offenen Randbedingungen**

models.xml

- ▶ verallgemeinertes Heisenberg
- ▶ Hubbard
- ▶ t-J
- ▶ Kondo
- ▶ ...

Simple Beispiele

- ▶ Parameter werden mit Hilfe des XML Formats über entsprechende Tags festgelegt

```
<PARAMETERS>
  <PARAMETER name="LATTICE"> square </PARAMETER>
  <PARAMETER name="MODEL"> spin </PARAMETER>
  <PARAMETER name="L"> 10 </PARAMETER>
  <PARAMETER name="T"> 0.5 </PARAMETER>
</PARAMETERS>
```

- ▶ Auch die Ausgabe erfolgt auf die gleiche, standardisierte Weise

```
<SCALAR_AVERAGE name="Susceptibility">
  <MEAN> 421.3 </MEAN>
  <ERROR converged="yes"> 1.54 </ERROR>
  <VARIANCE> 1.06e+05 </VARIANCE>
</SCALAR_AVERAGE>
```

- ▶ Diese XML Dateien können mit gewöhnlichen Browsern betrachtet werden

Simple Beispiele II

- ▶ ALPS liefert allerdings auch einige Tools um Parametereingaben zu erleichtern und Observablen aus Simulationen bequem zu extrahieren
- ▶ Ising Modell, kritische Temperatur, lokale Updates, für verschiedene L

```
LATTICE="square lattice"  
LATTICE_LIBRARY="../lattices.xml"  
T=2.269186  
J=1  
THERMALIZATION=10000  
SWEEPS=50000  
UPDATE="local"  
MODEL="Ising"  
{L=2;}  
{L=4;}  
{L=8;}  
{L=16;}
```

- ▶ `parameter2xml` konvertiert dies nun in eine XML Datei, mit welcher die Simulation gestartet werden kann

Simple Beispiele III

```
you@earth:~$ extracttext plot.xml data.out.xml
2.269186      1.53865      0.00409
2.269186      5.39659      0.0255
2.269186      18.5115     0.146
...
```

wobei plot.xml folgenden Inhalt besitzt:

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<plot name="Susceptibility versus temperature">
  <legend show="true"/>
  <xaxis label="Temperature" type="PARAMETER" name="T"/>
  <yaxis label="Susceptibility" type="SCALAR_AVERAGE"/>
  <set label="One-dimensional chain"/>
</plot>
```

extractgp und extractxmgr erzeugen Dateien im *GNUPlot* bzw. *Xmgrace* Format

Elementare Monte-Carlo-Simulation

...

```
class MyMonteCarlo : public alps::scheduler::MCRun{
public :
    MyMonteCarlo(const alps::ProcessList &,const
        alps::Parameters &,int);
    static void print_copyright(std::ostream &);
    void save(alps::ODump &) const;
    void load(alps::IDump &);
    void dostep();
    bool is_thermalized() const;
    double work_done() const;
private :
    // your own internal data here ...
};
```

...

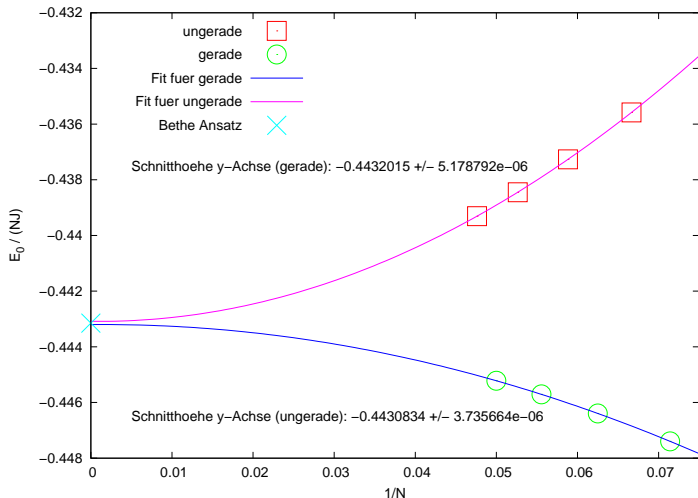
Das isotrope, antiferromagnetische Heisenbergmodell

- ▶ $H = \sum_{\langle i,j \rangle} \left[S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right]$
- ▶ periodische Randbedingungen

Im Folgenden:

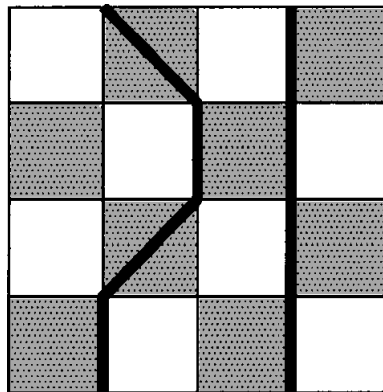
- ▶ Vergleich Quanten-Monte-Carlo mit Exakter Diagonalisierung
- ▶ Extrapolation der Grundzustandsenergie für $L \rightarrow \infty$
- ▶ Lokalisierung und Untersuchung möglicher Phasenübergänge in 2 und 3 Dimensionen

Extrapolation der Grundzustandsenergie $L \rightarrow \infty$ für $T=0$



► Bethe-Ansatz $E_G = \frac{1}{4}(1 - 4 \ln 2) \approx -0.44314718$

Zur Theorie von QMC - Der Worldline-Algorithmus



nach Evertz, The loop algorithm, S.6

- ▶ Abbildung: d-dimensionales Quantensystem \rightarrow d+1-dimensionales klassisches System
- ▶ Zurückführung der Zustandssumme durch Trotter-Zerlegung auf 2-Platz Problem
- ▶ Weltlinien beschreiben Evolution der Spin- \uparrow -Zustände in imaginärer Zeit

Nachteile der Trotter-Zerlegung

- ▶ Verlässliche Ergebnisse nur bei Berechnung mehrerer $\Delta\tau$ s und anschließender Extrapolation $\Delta\tau \rightarrow 0$
- ▶ Aus Bequemlichkeit wird oft nur $\Delta\tau = \frac{1}{32}$ oder $\frac{1}{20}$ berechnet
⇒ **unbekannte, systematische Diskretisierungsfehler**
- ▶ Benötigte Zeit für Sweep $\propto 1/\Delta\tau$
- ▶ Autokorrelationszeit für lokale Updates $\propto (1/\Delta\tau)^2$

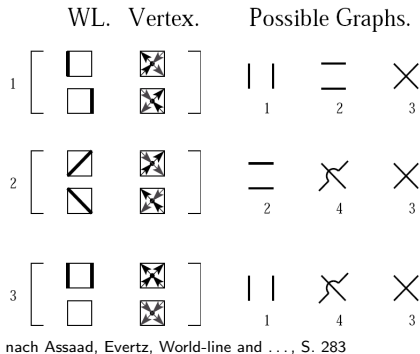
Mögliche Alternativen

- ▶ Continuous Time
- ▶ Stochastic Series Expansion

Loop-Updates

Aufteilung in

- ▶ vertical breakup (Graph 1)
- ▶ horizontal breakup (Graph 2)
- ▶ frozen (Graph 3)



nach Assaad, Evertz, World-line and ..., S. 283

Weiter im isotropen Heisenbergmodell ($J = J_x = J_z$)

- ▶ nur vertical und horizontal breakups

Wahrscheinlichkeit für horizontal breakup

- ▶ $\tanh(\Delta\tau J/2)$ für AF-Plakette
- ▶ 1 für diagonaler Plakete
- ▶ 0 für FM-Plakette

Continuous Time

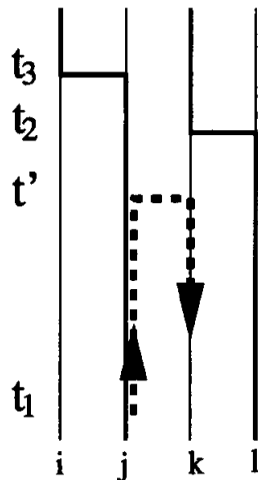
Verhalten der Weltlinien wird durch Wahrscheinlichkeit für einen „horz. breakup“

$$p = \begin{cases} 0, & 2 \text{ oder } 0 \\ \tanh\left(\frac{\Delta\tau}{2} J\right) & 1 \text{ gerade} \\ 1, & \text{Sprung} \end{cases}$$

beschrieben.

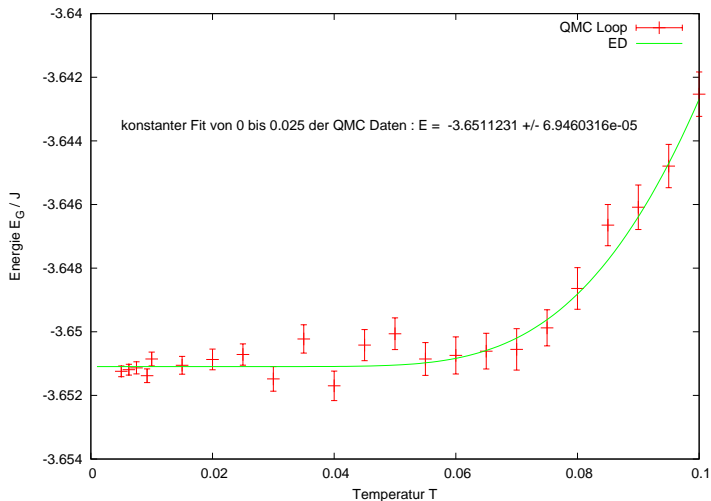
Entwickle nun für kleine $\Delta\tau$

$$\Rightarrow \tanh\left(\frac{\Delta\tau}{2} J\right) \rightarrow \frac{J}{2} \Delta\tau$$

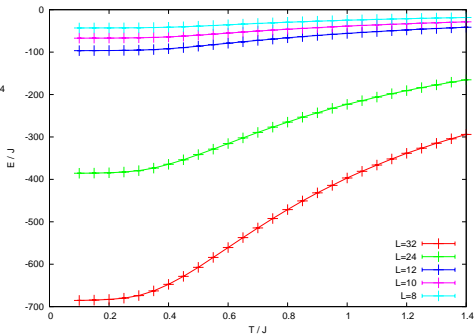
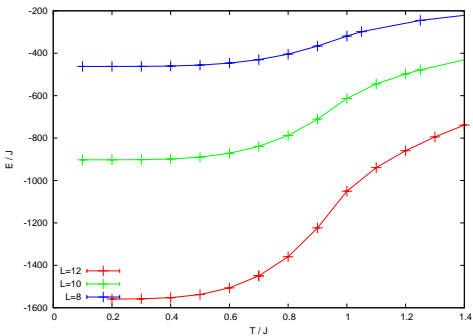


nach Evertz, The loop algorithm, S.25

Vergleich QMC & ED für L=8

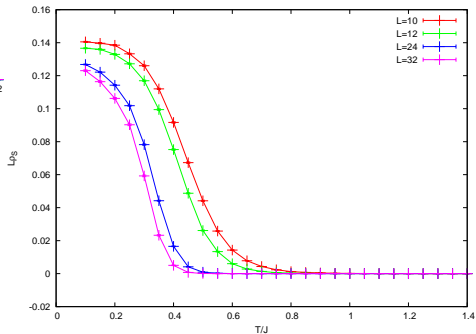
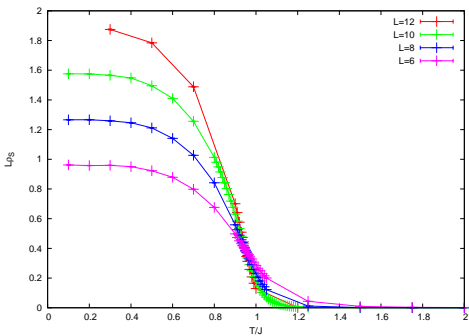


Energie



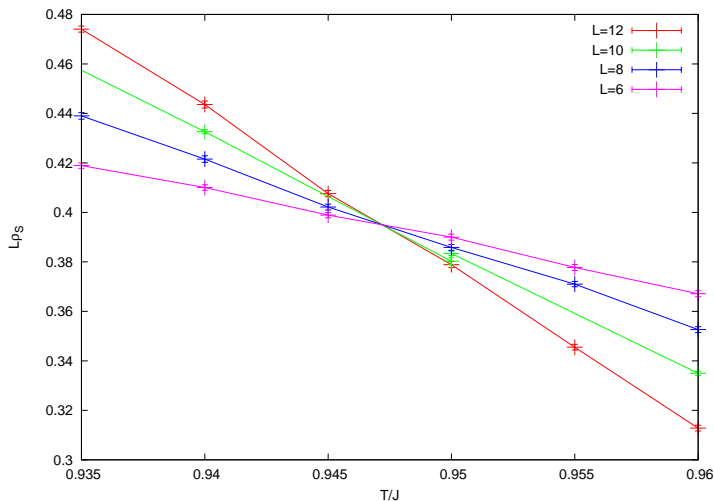
Vergleich: Energie des 3D- (links) und des 2D-Gitters (rechts)

Stiffness



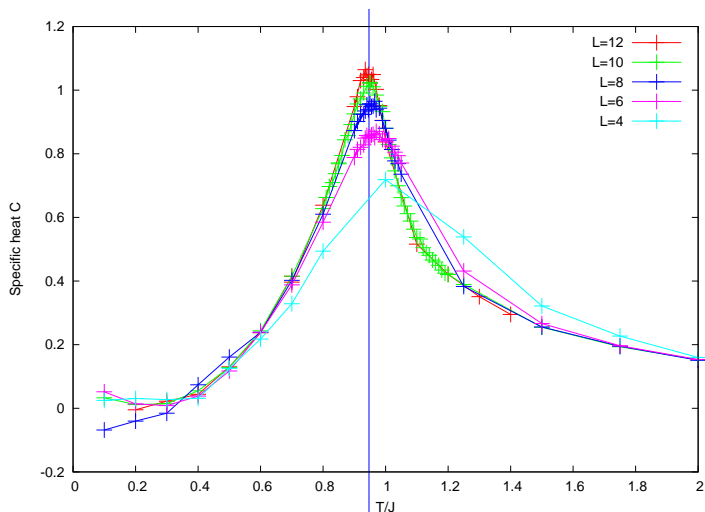
Vergleich: Stiffness des 3D- (links) und des 2D-Gitters (rechts)

Stiffness



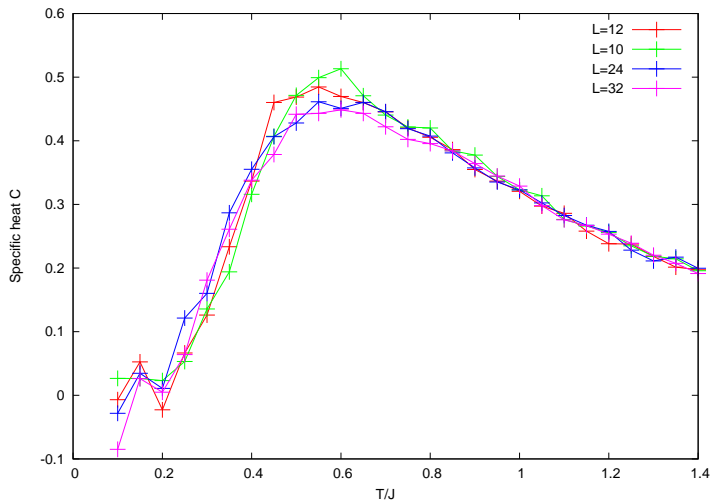
- Geradenfits für $L=12$, $L=10$ und Schnittpunktberechnung
⇒ $T_C \approx 0.947$

spezifische Wärme (3D-Gitter)



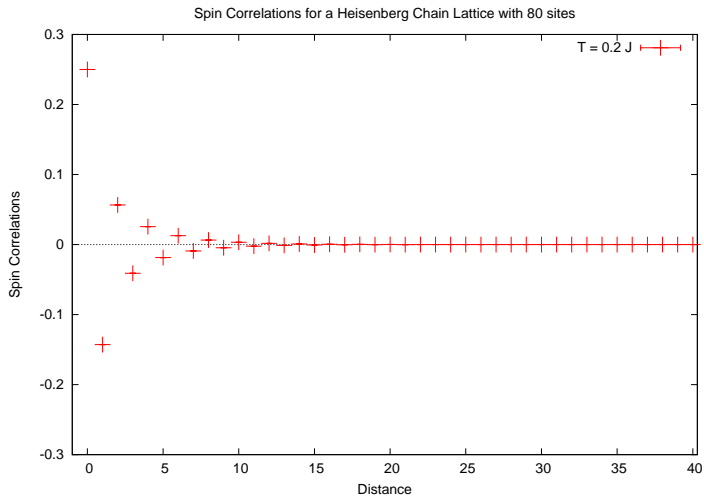
► senkrechter Strich markiert auf vorheriger Folie bestimmte T_C

spezifische Wärme (2D-Gitter)



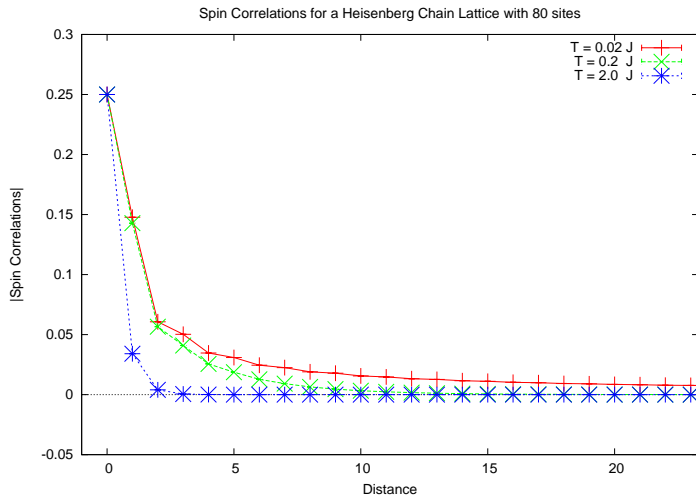
► Kein Phasenübergang erkennbar

Spinkorrelationen im Heisenbergmodell 1D



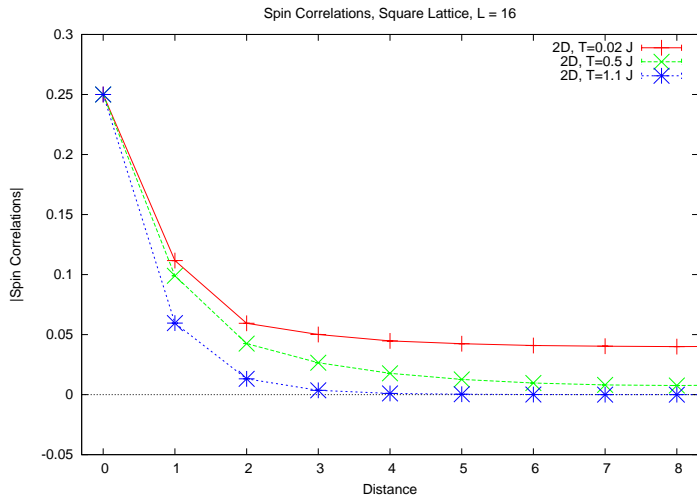
Sweeps = 1000000

Spinkorrelationen im Heisenbergmodell 1D II



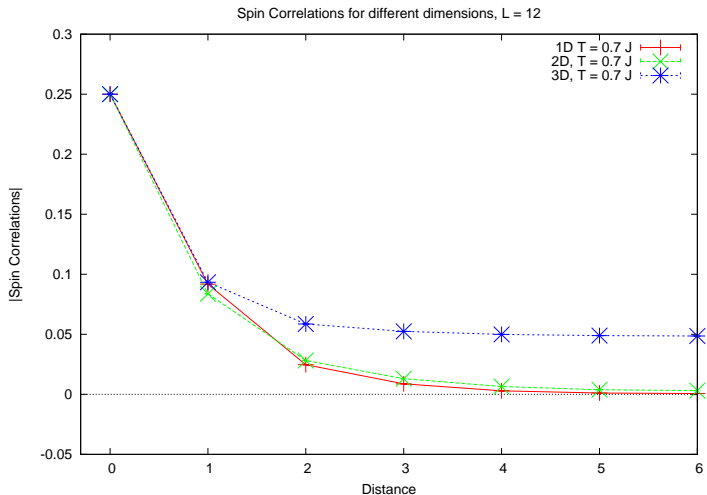
Sweeps = 1000000

Spinkorrelationen im Heisenbergmodell 2D



Sweeps = 300000

Spinkorrelationen im Heisenbergmodell, verschiedene Dimensionen








Sweeps = 50000

Fazit

- ▶ Tutorials ermöglichen schnelles und einfaches Durchführen von eigenen Simulationen
- ▶ XML-System
- ▶ Ordentliche Ergebnisse selbst mit gewöhnlichen PCs
- ▶ Installation kompliziert (Abhängigkeiten mit anderen Bibliotheken)
- ▶ Vorkenntnisse im Umgang mit der Unix-Shell erforderlich
- ▶ Dokumentation unvollständig

Literatur I

-  A.F. ALBUQUERQUE, F. ALET ET AL.: *The ALPS project release 1.3: Open-source software for strongly correlated systems.*
J.Magn.Magn.Mat., 310:1187–1193, 2007.
-  ALET, F. und P. DAYAL ET AL.: *The ALPS project: open source software for strongly correlated systems.*
J.PHYS.SOC.JPN., 74:30, 2005.
-  BLÜMER, N.: *Moderne numerische Methoden der Festkörperphysik, Vorlesung an der Uni Mainz, SoSe 2007.*
-  EVERTZ, H. G.: *The Loop Algorithm.*
Advances in Physics, 52:1, 2003.
-  F. F. ASSAAD, H. G. EVERTZ: *World-line and Determinantal Quantum Monte Carlo Methods for Spins, Phonons and Electrons.*



SANDVIK, ANDERS W.: *Critical Temperature and the Transition from Quantum to Classical Order Parameter Fluctuations in the Three-Dimensional Heisenberg Antiferromagnet.*

Phys. Rev. Lett., 80(23):5196–5199, Jun 1998.