

ALPS チュートリアル – ALPS の概要

CMSI 神戸ハンズオン

ALPS Collaboration
<http://alps.comp-phys.org/>

ALPS

- 1 量子格子模型とは?
- 2 ALPS プロジェクト
- 3 ALPS によるシミュレーション
- 4 ALPS の開発

量子格子模型: Quantum Lattice Models

■ 量子スピン模型 (XXZ 模型)

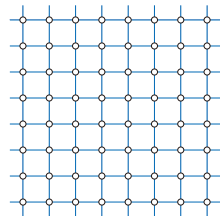
$$\mathcal{H} = \frac{J^{xy}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + J^z \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z$$

■ Hubbard 模型

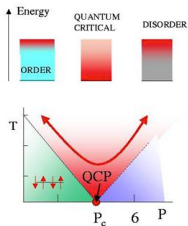
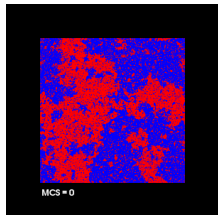
$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

■ t-J 模型

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}) + J \sum_{i,j} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - n_i n_j / 4)$$



なぜ QLM を考えるのか?



- 量子多体系における強相関効果
 - さまざまな秩序状態
 - 量子的に強くゆらいだ相: 量子液体, スピンギャップ相
 - 量子相転移, 量子臨界現象
- 量子統計物理におけるユニバーサリティー
 - 量子臨界現象は系の次元, 秩序変数の対称性などにしか依存しない
 - 量子臨界現象特有のユニバーサリティークラスの探索
- 新しい計算物理学的手法の発展
 - 量子モンテカルロ法, DMRG, DMFT, テンソルネットワーク, など

ALPS プロジェクトの目標

■ 量子統計物理分野の現状

- 研究グループ毎に異なるコードを開発
- シミュレーションを行う模型毎に異なる実装
- アルゴリズムはますます複雑なりソフトウェア開発が長期化
- 可搬性・互換性のない入出力形式

■ ALPS プロジェクトの目標

- 最新のアルゴリズムを用いた “community code” の開発
- 大規模並列計算などのための C++ ライブラリ・フレームワーク開発
- 統一入出力形式の提案とそれにもとづくデータ解析ツールの作成
- 計算物理の専門家だけでなく、理論家・実験家にも使えるシミュレーションソフトウェア

ALPS とは?

ALPS = Algorithms and Libraries for Physics Simulations

- 量子スピン系, 電子系など強相関量子格子模型のシミュレーションのためのオープンソースソフトウェアの開発を目指す国際共同プロジェクト
- ALPS ライブラリ = C++ による格子模型のための汎用ライブラリ群
- ALPS アプリケーション = 最新のアルゴリズムに基づくアプリケーション群: QMC, DMRG, ED, DMFT 等
- ALPS フレームワーク = 汎用入出力形式, 解析ツール, スケジューラなど, 大規模並列シミュレーションのための環境

ターゲット・オーディエンス

■ 実験家

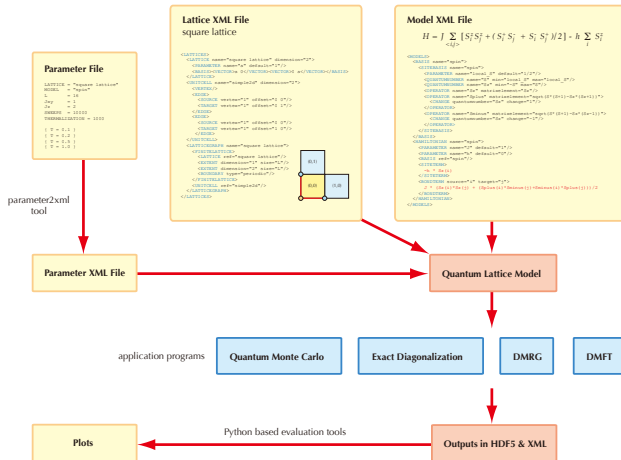
- 物質のモデリングにソフトウェアパッケージを利用
- 実験結果とシミュレーション結果のフィッティングにより、相互作用定数などを決定

■ 理論家

- 理論的なアイデアのチェックに使いやすい整備されたコードを利用
- 自前のコードのデバッグに
- 新しいコード開発の基盤としての利用

■ 計算機科学者, 学生, ...

ALPS によるシミュレーション — ワークフロー



ALPS の階層構造

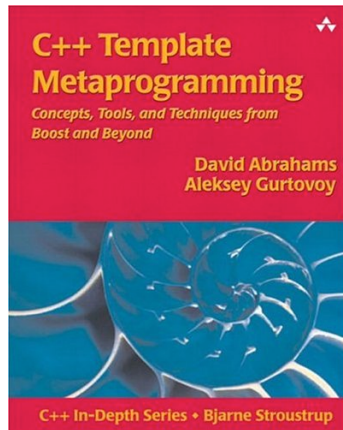
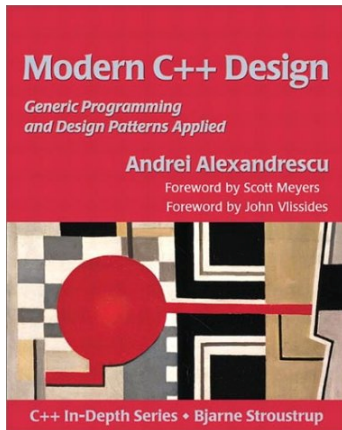
tools	XML manipulation Python binding GUI	
applications	MC QMC ED DMRG DMFT	
domain-specific libraries	lattice model observables scheduler	
numerics	random ublas Boost library	iterative eigenvalue solver
generic C++	graph	serialization XML/XSLT
C / Fortran	BLAS LAPACK MPI HDF5	

基盤となる技術

- C++によるジェネリック・プログラミング
 - C++標準テンプレートライブラリ
 - Boost C++ ライブラリ <http://www.boost.org/>
 - ALPS 独自のクラス, ジェネリック・アルゴリズムを実装
 - 柔軟性, 再利用性, 高信頼性, 高性能を同時に達成
- XML, HDF5 による入出力
 - 可搬性, 自己記述性, 変換が容易
- 量子格子模型に対する最新のシミュレーション手法

なぜ C++ を使うのか?

T



ALPS

ALPS の歴史

- 1990 年代中頃 ALPS の前身となる PALM C++, DMRG, loopер などが開発される
- 2002 年 ALPS プロジェクト始動
- 2004 年 バージョン 1.0, 第 1 回 Users Workshop
- 2010 年 バージョン 2.0
- 2011 年 7 月現在
 - ソースコード: C++ 310,000 行, Python 19,000 行, Fortran 10,000 行
 - 開発者: 約 30 名 (7 ヶ国)

ALPS の開発者 (2011.5 現在)

■ Austria

- H. G. Evertz

■ France

- O. Parcollet

■ Germany

- S. Fuchs
- G. Guertler
- D. Koop
- U. Shollwöck
- S. Trebst
- S. Wessel

■ Poland

- G. Pawlowski

■ Switerland

- B. Bauer
- L. Gamper
- J. Gukelberger
- A. Hehn
- S. V. Isakov
- P. N. Ma
- P. Mates
- J. D. Picon
- L. Pollet
- B. Surer
- M. Troyer
- P. Werner

■ Japan

- 五十嵐 亮
- 松尾春彦
- 藤堂眞治

■ USA

- L. D. Carr
- A. Feiguin
- J. Freire
- E. Gull
- E. Santos
- V. W. Scarlola
- C. Silva
- M. L. Wall

ALPS

開発のためのインフラストラクチャ

- ソースコードの規模, 開発体制が大きくなると今までの方法では破綻する
- 開発・サポートのためのツールを一から作り上げるのは非現実的
- フリーソフトウェアの利用
 - ビルドシステム: CMake
 - ソースコードの管理: Subversion
 - プロジェクト管理・バグ追跡: Trac
 - ドキュメント作成: MediaWiki
 - メーリングリスト: Mailman
- Linux ワークステーションが 1 台あれば, これらの環境を整えるのは現在では比較的容易

ビルドシステム: CMake

- Makefile を生成するためのユーティリティー (configure スクリプトに対応)
 - Windows の Visual C++ 用ソリューションファイル, Mac OS X の Xcode 用プロジェクトファイルの生成も可能
- 設定は CMakeLists.txt に記述する
- テスト (CTest) やバイナリ配布 (CPack) の機能もある
- ファイルの依存関係の自動検出

VCS (Version Control System) によるソース管理: Subversion

- 開発者が複数になると、ディレクトリ名やログファイルによるバージョン管理はすぐに破綻する
- ソースコードをサーバー上で一括管理
 - ネットワーク経由でソースを check out/check in
- 更新毎に一意的なバージョン番号を付与
- 全ての修正履歴を保存
- 複数人が同時に更新した場合に衝突を回避するしくみ
- ブランチ・マージ・タグ付けなどが可能
- 開発者が一人、公開の予定がない場合でも積極的に使うべき

BTS (Bug Tracking System) の利用: Trac

- プロジェクト管理とバグ追跡のためのツール
- Web ブラウザからアクセス・操作
 - 開発者の情報共有のための wiki
 - Subversion との連携 (ソース, 修正履歴の web 上での閲覧)
 - プロジェクト管理 (ロードマップ, マイルストーンの管理)
 - チケットシステム: バグやタスクの登録, 担当者の決定, 修正状況の追跡

Wiki によるマニュアル作成: MediaWiki

- もともとはウィキペディアのために開発された
- Wiki とは?
 - Web ブラウザを利用して Web 文書を書き換えるシステム
 - ネットワーク上のどこからでも書き換えができる
 - 共同作業が容易
 - Web ブラウザがあれば編集作業が行える
 - HTML よりも簡潔な書式
 - 文書間のリンクの作成が容易
- ALPS Wiki のコンテンツ
 - ニュース, インストール方法, ALPS に関連する論文, 発表資料, ライブラリリファレンスマニュアル, チュートリアル

メーリングリストの活用: Mailman

■ 開発者メーリングリスト

- 開発方針に関する意見交換, リリーススケジュール調整, 担当者調整等
- Trac チケットの変更ログも自動的にここに流れる

■ ユーザーメーリングリスト

- Web からの自動登録
- 開発者 + ユーザコミュニティによるサポートの場
- FAQ ⇒ Wiki ドキュメントへ反映
- バグレポート, 要望など ⇒ Trac チケットへ

ワークショップ

- ALPS developers workshop
 - 今後の開発方針についてブレインストーミング・ディスカッション
 - 年 1~2 回
- ALPS users workshop / tutorial
 - アルゴリズムについてのレビュートーク
 - Wiki のチュートリアルを用いて ALPS の実習
 - CMSI 神戸ハンズオン: 3 ヶ月毎に ALPS チュートリアルを開催予定

ALPS の展開

- 上方展開 (大規模化・高性能化・並列化)
 - 量子モンテカルロ法 (ALPS/looper) の超並列化
 - 高並列スケジューラ (ALPS/parapack) のハイブリッド多重並列化
 - Fortran, C プログラムのための API 作成
- 下方展開 (裾野を広げる)
 - 実験家・理論家による幅広い利用の促進
 - Windows/Macintosh 用バイナリインストーラの開発
 - ワークフロー・履歴管理システムとの統合
 - GUI (グラフィカルユーザインターフェース) の開発

ALPS “cite-me” ライセンス

- GNU General Public License (GPL) を基本としたライセンス
- Non-commercial academic use の場合自由に利用可能
- 自由に再配布可
- ユーザが変更を施したコードも同じライセンスの下で再配布可
- ALPS を用いた研究成果を公表する場合には acknowledgement と論文の引用が義務 (ALPS をユーザーコードのテストのみに使った場合を含む)

1. In any scientific publication based wholly or in part on the Library, the use of the Library must be acknowledged and the publications listed in the accompanying CITATIONS.txt document must be cited.

参考文献 - 1

■ ALPS papers

- F. Alet et al. *The ALPS Project: Open Source Software for Strongly Correlated Systems*, J. Phys. Soc. Jpn. Suppl. 74, 30 (2005).
- A. F. Albuquerque et al. *The ALPS project release 1.3: open source software for strongly correlated systems*, J. Mag. Mag. Mat. 310, 1187 (2007).
- B. Bauer et al. *The ALPS project release 2.0: Open source software for strongly correlated systems*, J. Stat. Mech., P05001 (2011).

参考文献 - 2

- ALPS wiki: <http://alps.comp-phys.org/>
 - ALPS オフィシャルページ
- ALPS developer wiki: <http://alps.comp-phys.org/trac/>
 - 開発者向け情報
- CMSI AppliCafé (準備中): <http://www.cms-initiative.jp/>
 - 計算物質科学アプリケーションポータル
- Re: command not found: <http://todo.ap.t.u-tokyo.ac.jp/Members/wistaria/log>
 - Linux, Mac OS X などに関するソフトウェアのインストール記録