진보된 혼돈 대각화 방법을 이용한 상호작용하는 페르미온 계의 기저상태 계산

Ground State Computation of Interacting Fermion Systems by using Advanced Stochastic Diagonalization

안설아, 조명원*
한국과학기술정보연구원, 서울대학교*

Sul-Ah Ahn, Myoung Won Cho*
Korea Institute of Science and Technology Information, Seoul National University*

요약

2차원 상호작용하는 페르미온 계에 대한 혼돈 대각화 계산의 컴퓨터 계산 시간이, 대칭성 연산과 같은 여러 가지 방법을 이용함으로써 감소되었다. 첫째로, 각각의 격자를 업스핀(↑) 격자와 다운스핀(↓) 격자로 나누어서 2부분 격자가 가능케 했다. 이에 따라, 유효한 바탕 상태는 업스핀 배열에 다운스핀 배열을 겹침으로써 얻어진다. 결과적으로, 시험 바탕 상태를 저장하는데 사용되는 메모리 공간이 현저하게 감소되었다. 두 번째로, 바탕 상태 집합을 구성할 때, 해밀토니안 행렬의 원소들을 순람표에 기록하였다. 그럼으로써, 혼돈 대각화 과정에서 해밀토니안 행렬의 원소들을 반복적으로 계산하는 것을 피했다. 세 번째로, 바탕 상태 집합에 대칭성 연산을 적용함으로써 원 바탕 상태 집합이 대칭성 연산의 고유벡터들로 구성된 새로운 바탕 상태 집합으로 변환되었다. 기저 상태 파동함수는 대칭적인 바탕상태 (결합상태) 집합으로부터 구성되었다. 결과로서, 대칭성 연산을 이용함으로써, 혼돈 대각화 계산에 쓰이는 바탕상태의 총 개수가 50%까지 감소되었다.

Abstract

The computational time of Stocahstic Diagonalization (SD) calculation for 2-dimensional interacting fermion systems is reduced by using several methods including symmetry operations. First, each lattice is subdivided into spin-up and spin-down lattices separately, thus allowing a bi-partite lattice. A valid basis state is then obtained from stacking up an up-spin configuration on top of a down-spin configuration. As a consequence, the memory space to be used in saving the trial basis state reduces significantly. Secondly, the matrix elements of a Hamiltonianin are reconrded in a look-up table when making basis state set. Thus the repeated calculation of the matrix elements of the Hamiltonian are avoided during SD process. Thirdly, by applying symmetry operations to the basis state set the original basis state is transformed to a new basis state whose elements are the eigenvectors of the symmetry operations. The ground state wavefunction is constructed from the elements of symmetric - bonding state - basis state set. As a result, the total number of basis states involved in SD calculation is reduced upto 50 percentage by using symmetry operations.

I. 서 론

혼돈 대각화 방법 (Stochastic Diagonalization: SD) [1], 또는 양자 몬테 카를로 대각화 방법 (Quantum Monte Carlo diagonalization: QMCD) [2] 은 허버드 모델이나 t-J 모델 같은 상호작용하는 페르미온 계에서의 해를 근사법을 적용하지 않고 정확히 구하기 위한 계산 방법으로 제시되어 왔다.

혼돈 대각화 방법 (SD) 또는 양자 몬테 카를로 대각화 방법 (QMCD)은 변분적인 기법에 기초한 방법으로서, 해가 허버드 해밀토니안이나 t-J 해밀토니안에서 생성되는 거대 행렬의 최적화된 고유값 (eigenvalue) 이나 고유상태 (eigenstate) 에 접근하게 만드는 방법이다. 그러나, SD 방법은 양자 상태의 개수가 빠르게 증가하는데 따르는 어려움 때문에 작은 계들에만 적용되어 왔다.

II. 본 론

우리는 SD 방법의 계산 능력을 극대화시키는 새로운 계산 방법인 진보된 혼돈 대각화 방법(Advanced Stochastic Diagonalization: ASD)을 개발하였다[3,4]. 불린 연산자 (Boolean Operator)를 사용하여 코드를 최적화시켰으며, 대

칭성에 기반하여 상태 공간을 축소시켰고, 시험 상태를 효과적으로 변분화하는 등, 코드를 최적화하기 위한 여러 가지 기법을 개발하여 추가시켰다.

이렇게 개선된 새로운 SD 방법인 ASD 방법을 2차원 허버드 모델 해밀토니안에 적용하였다. 허버드 모델 해밀토니안은 강상관계의 필수적인 특징을 표현하기에 적합하여, 고온초전도체와 관계되어 널리 사용되고 있다. 허버드 모델은 다음과 같은 해밀토니안에 의해 정의된다.

$$H = t \sum_{\langle i,j \rangle ,\sigma} (c^{\dagger}_{i,\sigma} c_{j,\sigma} + c^{\dagger}_{j,\sigma} c_{i,\sigma}) + U \sum_i n_{i\downarrow} n_{i\uparrow}. \quad (1)$$

위 식에서 $c^{\dagger}_{i,\sigma}$ $(c_{i,\sigma})$ 는 스핀 σ = ↑, ↓인 페르미온을 i번째 위치에 생성시키거나 제거시키는 연산자이며, U는 동일 싸이트에서의 쿨롱 상호작용의 세기를 나타낸다. $\langle i,j \rangle$ 는 i위치와 j위치를 거치는 합이 가장 가까운 이웃에만 제한됨을 뜻한다.

허버드 모델 해밀토니안의 기저상태를 SD 방법을 이용하여 계산할 때 적용한 최적화 방법은 다음과 같다. 첫째로, 각각의 격자를 업스핀(↑) 격자와 다운스핀(↓) 격자로 나누어서 2부분 격자가 가능케 했다. 이에 따라, 유효한 바탕 상태는 업스핀 배열에 다운스핀 배열을 겹침으로써 얻어진다. 결과적으로, 시험 기저 상태를 저장하는데 사용되는 메모리 공간이 현저하게 감소되었다. 두 번째로, 기저 상태 집합을 구성할 때, 해밀토니안 행렬의 원소들을 순람표에 기록하였다. 그럼으로써, 혼돈대각화 (SD) 과정에서 해밀토니안 행렬의 원소들을 반복적으로 계산하는 것을 피했다. 세 번째로, 바탕 상태 집합에 대칭성 연산을 적용함으로써 원래의 바탕 상태 집합이 대칭성 연산의 고유벡터들로 구성된 새로운 바탕 상태 집합으로 변환되었다. 기저 상태 파동함수는 대칭적인 바탕상태 (결합상태) 집합으로부터 구성되었다.

III. 결 론

2차원 허버드 모델 해밀토니안에 개선된 SD 방법을 이용하여 기저에너지를 계산한 결과를 표 1, 2 에서 확인할 수 있다. 기존에 널리 쓰여왔던 란쪼스 대각화 방법 (Lanczos diagonalization : LD) 방법을 사용한 계산 결과를 함께 비교하였다.

[표 1] LD 방법과 SD 방법을 사용한 기저상태에너지 값 비교

(L_x,L_y)	U/t	$(n_\downarrow,n_\uparrow)$	기저상태에너지			
			LD		SD	ASD
			RL	Ours		
3 × 3	4	(3,4)	-7.915	-9.7399	-7.915	-9.7380
3 × 3	20	(3,4)	-6.122	-6.7762	-6.120	-6.7762
3 × 3	4	(4,5)	-6.210	-6.3202	-6.203	-7.8241
3 × 3	8	(4,5)	-3.545	-3.7644	-3.545	-4.1442

RL은 Raedt 와 Linden의 LD계산 결과이며[2], Ours는 우리의 LD 계산 결과이다. SD는 Raedt 와 Linden의 SD 계산 결과이며[2], ASD는 우리의 ASD 계산결과이다.

[표 2] SD 방법과 ASD 방법을 사용한 기저상태에너지 계산시간 비교.

(L_x,L_y)	U/t	$(n_\downarrow,n_\uparrow)$	CPU 시간 (초)	
			SD	ASD
3 × 3	4	(3,4)	150 (IBM)	2.18 (S)
3 × 3	20	(3,4)	400 (IBM)	2.91 (S)
3 × 3	4	(4,5)	220 (IBM)	0.31 (S)
3 × 3	8	(4,5)	2625 (IBM)	0.45 (S)

SD는 Raedt 와 Linden의 계산결과이며[2], ASD는 우리의 계산 결과이다. 계산에 사용된 컴퓨터 기종 (괄호 안) 중 IBM은 IBM 3090/VF 이며, S는 Compaq SC45 클러스터 컴퓨터 시스템이다.

대칭성을 이용하면 바탕상태의 수가 최대 50%까지 감소된다. 그 예를 표 3에서 보였다.

[표 3] 총 바탕상태 수(NH)와 대칭성에 의해 감소된 바탕생태 수(NS)의 비교

$(n_\downarrow,n_\uparrow)$	총 바탕상태 수 (N_H)	대칭성에 의해 감소된 바탕상태 수 (N_S)	N_S/N_H
(1,1)	256	136	53 %
(2,2)	14 400	7 260	50 %
(3,3)	313 600	157 080	50 %
(4,4)	3 312 400	1 657 110	50 %
(5,5)	19 079 424	9 541 896	50 %
(6,6)	64 128 064	32 068 036	50 %
(7,7)	130 873 600	65 442 520	50 %
(8,8)	165 636 900	82 824 885	50 %

(2차원 허버드 모델 해밀토니안의 4×4 격자 대상)

우리가 새로 개발한 진보된 혼돈대각화 방법 (Advanced Stochastic Diagonalization: SD) 은 시험 상태를 저장하는데 쓰이는 메모리의 크기에 의해서만 제한받는다. 바탕상태의 개수가 약 10^9 범위인 2차원 상호작용하는 페르미온 계의 해를 계의 대칭성을 사용하여 정확하고 빠르게 계산할 수 있는 새로운 방법이다.

▌참 고 문 헌▐

[1] H. De Raedt and M. Frick, "Stochastic diagonalization", Phys. Rep. Vol. 231, No. 3, pp. 107-149, 1993.

[2] H. De Raedt and W. von der Linden, "Monte Carlo diagonalization of many-body problems: Application to fermion systems", Phys. Rev. B, Vol. 45, No. 15, pp. 8787-8790, 1992; H. De Raedt and W. von der Linden, "Monte Carlo diagonalization of very large matrices: Application to fermion systems", Int. J. Mod. Phys. C, Vol. 3, No. 1, pp. 97-104, 1992.

[3] Sung-Sik Lee, Sul-Ah Ahn, and Sung-Ho Suck Salk, "Phase separation in the two-dimensional systems of strongly correlated electrons: the role of spin singlet pairs on hole pairing contribution to hole-rich phase", Key Engineering Materials, Vols. 277-279, pp. 1011-1016, 2005.
[4] Sul-Ah Ahn and Myoung Won Cho, "Exact and Fast Calculation for Two-Dimensional Correlated Electron Systems: Application to the Hubbard Model", Computer Physics Communications, Vol. 177, No. 1-2, pp. 40, 2007.