

統計数理研究所 数学協働プログラム

計算物質科学における 時空間アップスケーリングと数理手法

2016年11月28日・29日
電気通信大学

世話人：星健夫(鳥取大学)，山本有作(電気通信大学)，松尾宇泰(東京大学)

計算物質科学からのニーズ(1)

- 全電子第一原理 GW+Bethe-Salpeter プログラム(野口)
 - 様々なサイズの固有値問題
 - 数百万元・数万固有対
 - 数万元・全固有対
- 高並列量子多体問題ソルバー(山地)
 - 量子多体問題のための数値的対角化
 - 超大規模固有値問題
 - スペクトロスコピーのシミュレーション(線形応答)
 - シフト線型方程式
- 分割統治法に基づくオーダーN第一原理計算手法(島村)
 - 偏微分方程式における領域分割法との類似性
 - 領域分割法向けに開発された各種の収束加速法を適用可能?

計算物質科学からのニーズ(2)

- 100nmスケール有機デバイス材料の量子ダイナミクス(星)
 - シュレーディンガー型方程式の時間発展
 - シフト線形方程式
 - 構造保存型数値解法
- 非線形光学応答の量子シミュレーション
 - Maxwell-TDDFT
 - 指数関数の4次のテイラー展開を使って時間発展
 - より高精度／高安定な積分法を使えば, 時間ステップを大きく取れる？
 - 時間依存 Hartree-Fock 計算
 - 畳み込み積分を FFT で実行. 1ステップで134M回の FFT
 - HPC の観点からの最適化が必要

数理からのシーズ(1)

- モデル縮減法(松尾)
 - POD(Proper Orthogonal Decomposition)
 - SMR(Symplectic model reduction, 構造保存型)
 - 3次NLS(非線形シュレーディンガー)方程式では非常にうまく行く
- 構造保存型数値解法(宮武)
 - シンプレクティック数値解法
 - Butcher-Miyatake法(並列性を持つエネルギー保存解法)
 - 離散変分法(保存性/散逸性を持つ偏微分方程式用解法)

数理からのシーズ(2)

- 固有値計算法(曾我部, 深谷, 山本)
 - 櫻井・杉浦法(疎／密行列・大規模問題・部分固有対)
 - 部分空間の抽出にも適用可能(固有値フィルタリング)
 - 5重対角化法(密行列・大規模問題・全／部分固有対)
 - ブロックヤコビ法(密行列・中規模問題・全固有対)
- 連立1次方程式の解法(曾我部, 横川)
 - 一般化シフト線型方程式 $(A + sB)x = b$ の解法
 - 1D-Dissection法に基づく帯行列の並列直接解法
- QR分解法・ベクトルの直交化法(深谷)
 - TSQR法(通信回避型・無条件安定)
 - Cholesky QR2法(通信回避型・条件数が 10^8 以下のとき適用可能)

数理からのシーズ(3)

- 低ランク近似による計算量・メモリ量削減(片桐)
 - H 行列: 密行列の低ランク近似
 - テンソルの低ランク近似
- 行列関数の効率的計算法
 - $f(A)b$ の計算
 - $\text{Tr}[f(A)]$ の計算
- データ科学の技法
 - スパースモデリング
 - PCA(主成分分析)
 - オンラインPCA

ハードウェアからのシーズ

- **ポストムーア時代のスパコン(片桐)**
 - メモリバンド幅増加 → $\text{Byte/Flop} \geq 4$ ならブロック化不要？
 - ただし, 通信のためのブロック化は引き続き必要
 - 通信回避アルゴリズムは相変わらず重要
- **FPGA化(片桐)**
 - IF 文のために先進 CPU / GPU で実効効率の悪い部分を FPGA 化

計算科学と数理の協働の可能性

今後の可能性

動力学問題
+
モデル縮減法

シミュレーション
+
機械学習
(コード融合)

進行中

2次元NLS方程式
+
Butcher-Miyatake法
+
スパースソルバ

π 共役ポリマーの
電子状態計算
+
1D-Dissection法

大規模量子
分子動力学計算
+
ブロックヤコビ法

成功例

グリーン関数に
基づく物理量計算
+
シフト方程式の解法

コードの共有に向けて

- HΦ

- 高並列汎用量子多体問題ソルバー
- Matrix Market形式で疎行列を生成できる
 - 行列計算ソルバの研究にも利用可能
- 将来的に Reverse Communication Interface も用意

- [nls-solver/nls-2d-bm4](#)

- 2次元NLS方程式を Butcher-Miyatake 法で解くサンプルプログラム
- 最適化されていないコード(密行列版)を github で提供中
 - <https://github.com/nls-solver/nls-2d-bm4>
- 疎行列化し、スパースソルバを使って最適化したコードを開発中
 - 密行列版に比べ、最大65倍高速(並列化未)
 - 640 × 640 格子のとき、1ステップ10秒で計算(物性研 Altix, 1ノード)

数値解析分野の動向：汎用解法から専用解法へ

- 構造保存解法
 - シンプレクティック解法
 - エネルギー保存解法
- 特別な性質を持つ行列向けの高効率解法
 - (一般化)シフト線型方程式
 - 強スケーリング条件下での固有値問題
 - 時間依存固有値問題
 - 成分が少しずつ変化する行列の固有値・固有ベクトルを求める
 - 条件数が 10^8 以下の行列のQR分解

問題の数理的性質を利用することで、より効率的・高精度な計算が可能

数理分野の研究者がすべきこと

- コードの公開

- 応用分野の研究者が、論文を読んで自分でプログラムを作るのは大変
- MATLAB レベルでいいから、サンプルコードを公開できるとよい

- 応用分野により立ち入った議論

- 応用分野と数値解析のインターフェースが行列データだけだと、対象の本質的な数理構造を捉えるには限界がある
- 数理の研究者も、より問題の本質に立ち入って議論できるようにすることが重要
 - 例: 量子多体問題におけるテンソル積構造