

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

世話人: 山本有作(電通大), 星健夫(鳥取大), 松尾宇泰(東大)

講演者各位へ

- (1) 各講演は5分(50分講演は10分)の討論時間を含みます。
討論開始時刻の5分前に予鈴がなります。
 - (2) 差し支えない範囲で、スライド(PDFなど)を提出してくださると幸いです。
ウェブページにアップロードされます。
- 注: USBメモリをもったスタッフが、講演後に伺います。
後日提出でも構いません(星までメールで送付してください)。

主催: 数学協働プログラム(<http://coop-math.ism.ac.jp/>)

共催: 科研費「電子状態計算への応用を指向した行列計算ライブラリの機能拡張とメニーコア向け最適化」

「超大規模超並列電子状態理論による100ナノスケール系デバイス研究」

「数理構造の抽出と保存を中心とした次世代エレクトロニクス材料設計基盤の創出」

協賛: ポスト「京」重点課題7(次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成)

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

世話人: 山本有作(電通大), 星健夫(鳥取大), 松尾宇泰(東大)

目標: 物質科学研究者と数理・情報系研究者の融合

→ (1) (数理的)問題の共有、(2) コードの共有

講演者

A. 物質科学系(6講演) B. 数理・情報科学系(7講演)

- | | |
|-------------|--------------|
| ・ 山地洋平(東大) | ・ 曾我部知広(名大) |
| ・ 野口良史(東大) | ・ 深谷猛(北大) |
| ・ 島村孝平(神戸大) | ・ 宮武勇登(名大) |
| ・ 篠原康(東大) | ・ 横川三津夫(神戸大) |
| ・ 福島孝治(東大) | ・ 片桐孝洋(名大) |
| ・ 星健夫(鳥取大) | ・ 山本有作(電通大) |
| | ・ 松尾宇泰(東大) |

主催: 数学協働プログラム(<http://coop-math.ism.ac.jp/>)

共催: 科研費「電子状態計算への応用を指向した行列計算ライブラリの機能拡張とメニーコア向け最適化」

「超大規模超並列電子状態理論による100ナノスケール系デバイス研究」

「数理構造の抽出と保存を中心とした次世代エレクトロニクス材料設計基盤の創出」

協賛: ポスト「京」重点課題7(次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成)

2016年11月28-29日, 電通大

研究会「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」

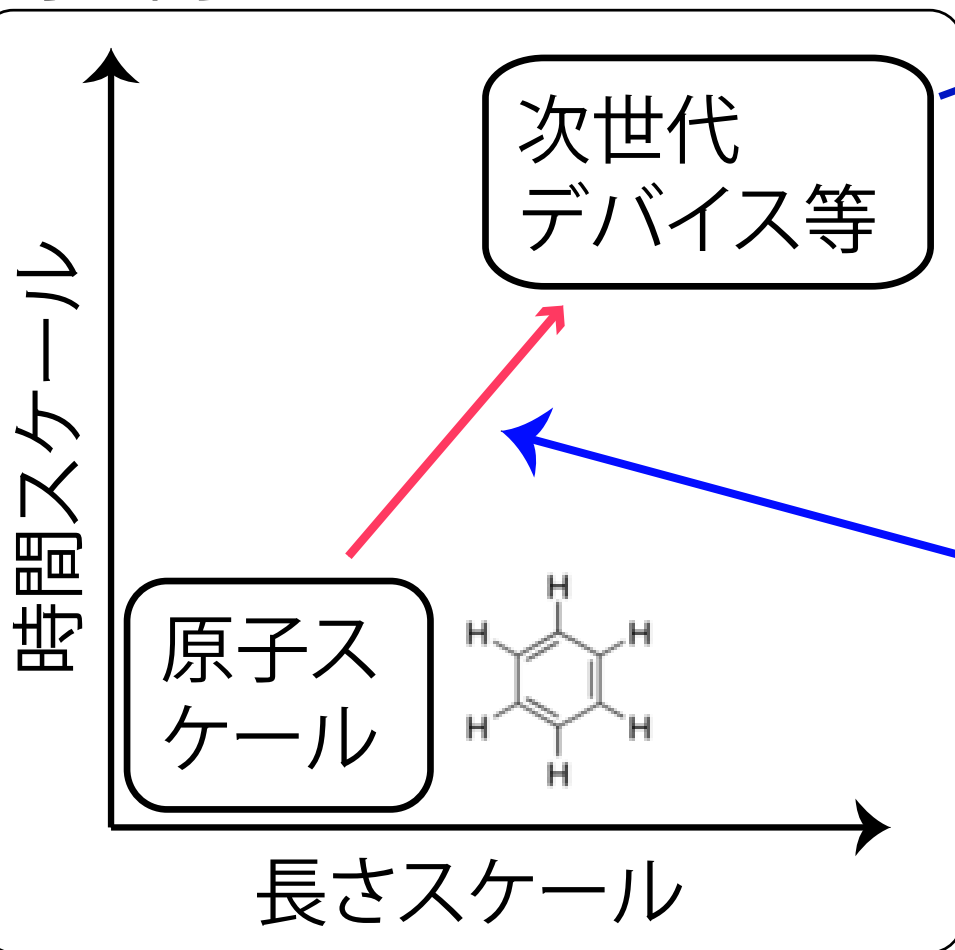
はじめに

星健夫(鳥取大)

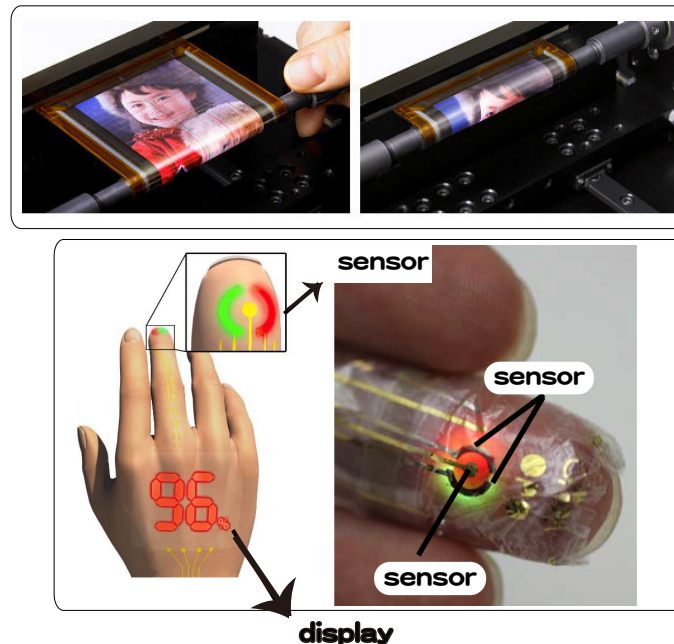
1. 概要: 量子物質科学における時空間アップスケーリング
2. 背景: 並列計算へのパラダイムチェンジ
3. トピック: 量子物質科学の「極小(原子)スケール」とは?
4. トピック: 大規模量子物質計算と大行列問題
5. 展望: シミュレーションと機械学習のコード融合

概要：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

計算物質科学における 時空間アップスケーリング



例



数理・情報科学

(超並列アルゴリズム、
理構造保存型数理手法、
次世代スパコン、
データ駆動科学、など)

2016年11月28-29日, 電通大

研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数値手法」

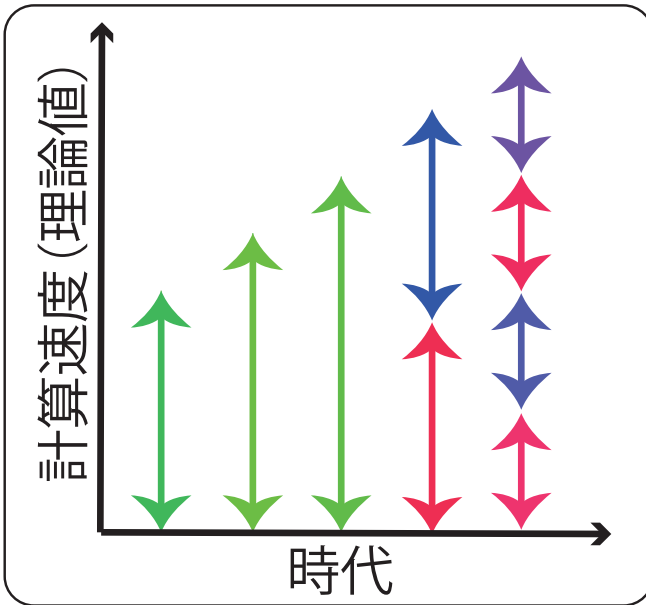
はじめに

星健夫(鳥取大)

1. 概要: 量子物質科学における時空間アップスケーリング
2. 背景: 並列計算へのパラダイムチェンジ
3. トピック: 量子物質科学の「極小(原子)スケール」とは?
4. トピック: 大規模量子物質計算と大行列問題
5. 展望: シミュレーションと機械学習のコード融合

背景：並列計算へのパラダイムチェンジ(2000年代後半～)

並列計算機の登場



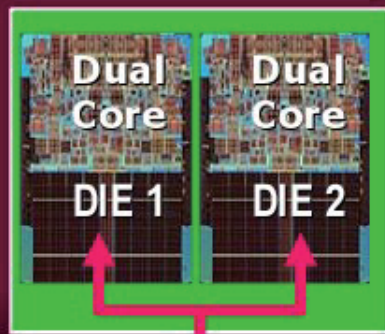
→「手分け」して計算する設計
→計算手法にパラダイムチェンジを迫ることに

Herb Sutter

"The Free Lunch Is Over",
Dr. Dobbs's Journal, 30(3), March (2005)

→物質科学と数理・情報科学の共同研究

1st quad-core processor

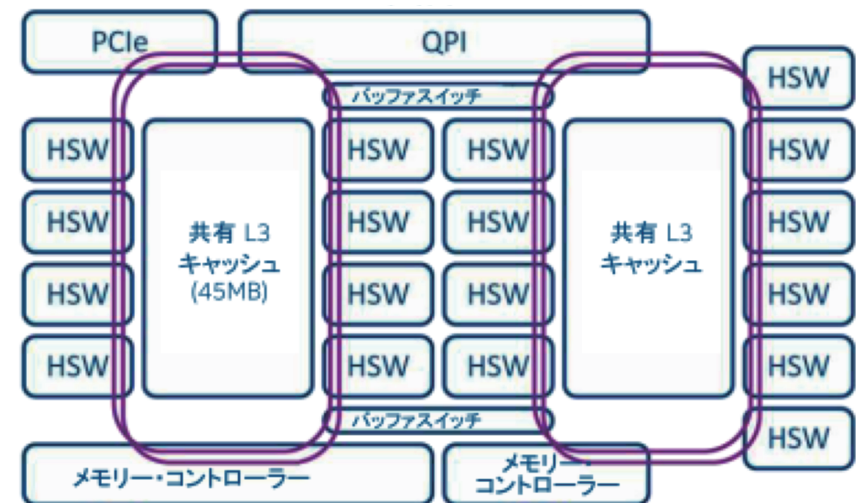


Single Socket

インテル社のCPU

←Core 2 Quad(2006)

18-core Xeon (*)
(E5-2600-v3) (2014)→



(*) http://pc.watch.impress.co.jp/docs/column/kaigai/20140909_665735.html

背景：並列計算へのパラダイムチェンジ(2000年代後半～)

海外の例：物質科学と数理・情報科学の共同研究

- ・ 超並列固有値問題ソルバールーチン：ELPA (<http://elpa.rzg.mpg.de/>)

[1] T. Auckenthaler et al., Parallel Comput. 37, 783 (2011)

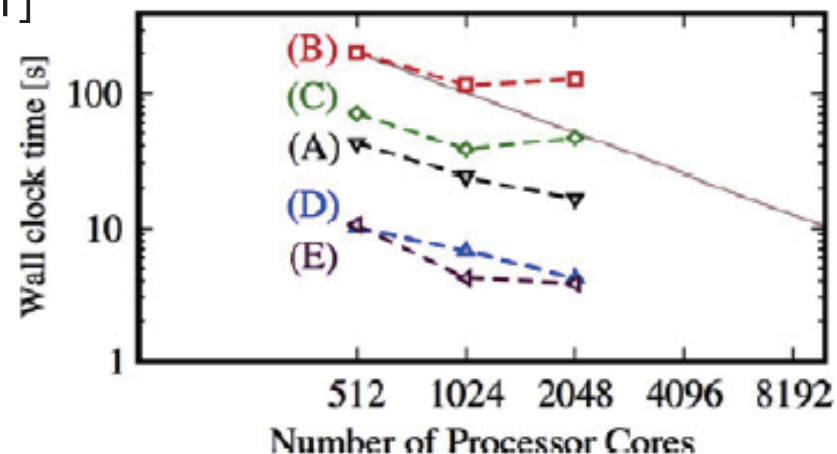
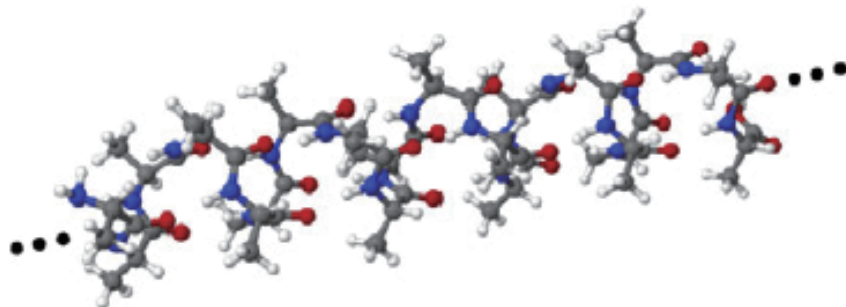
[2] A. Marek et al., J. Phys.: Condens. Matter 26, 213201(2014).

- ・ Zhaojun Bai(UC Davis)らによる非エルミート行列問題
(←電子励起問題(TDDFT)に由来)

[3] D. Rocca, Z. Bai, R.-C. Li, and G. Galli,

‘A block variational procedure for the iterative diagonalization of non-Hermitian random-phase approximation matrices’, J. Chem. Phys. 136, 034111 (2012).

例： α -helical polyaniline molecule計算 [1]



2016年11月28-29日, 電通大

研究会「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」

はじめに

星健夫(鳥取大)

1. 概要: 量子物質科学における時空間アップスケーリング
2. 背景: 並列計算へのパラダイムチェンジ
3. トピック: 量子物質科学の「極小(原子)スケール」とは?
4. トピック: 大規模量子物質計算と大行列問題
5. 展望: シミュレーションと機械学習のコード融合

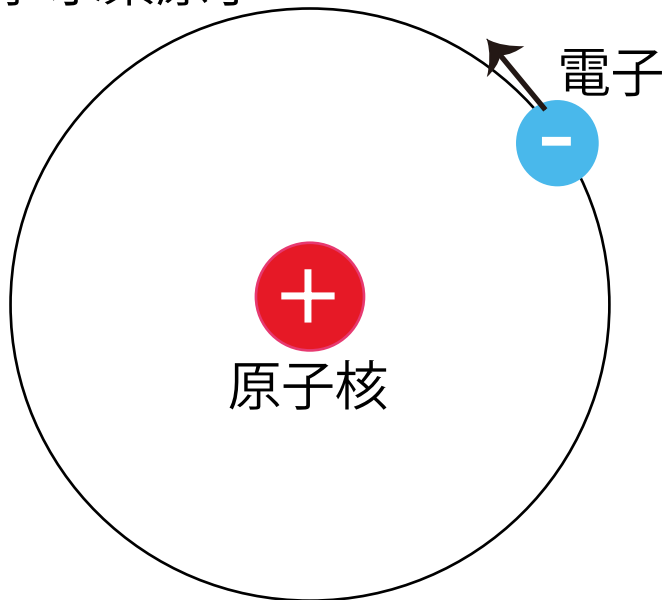
量子物質科学の「極小(原子)スケール」とは？ (0)

量子力学(20世紀~, シュレーディンガー方程式)

- ・「波としての電子」をシミュレーションでとらえる
- ・小規模系ならノートPCでも計算可
(例: 大学2年生むけ講義内で実習)

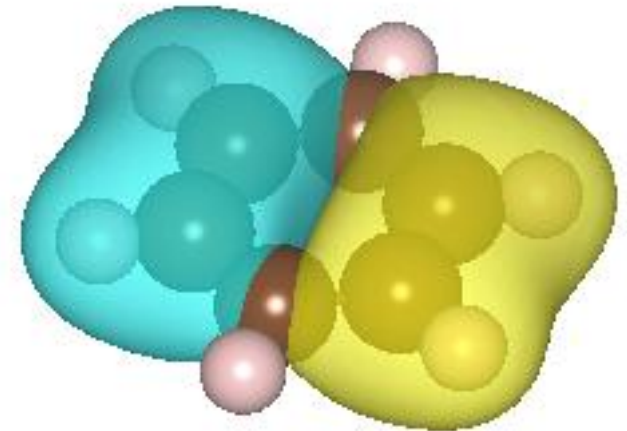
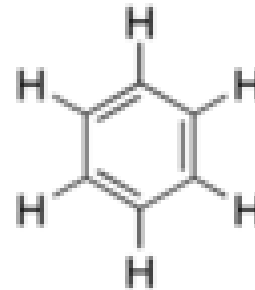
19世紀まで
→電子は「球」

例: 水素原子



20世紀から
→電子は「波」(量子力学)

小型分子の例: ベンゼン



量子物質科学の「極小(原子)スケール」とは？ (1)

原子単位(atomic unit)

→電子質量 m_e , 電子電荷量 e ,
プランク定数(量子力学の物理定数) $\hbar$,
真空誘電率 ϵ_0 を用いて、規格化;

$$m_e = 1, \quad \hbar = 1, \quad \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1 \quad (1)$$

長さ・エネルギー・時間の原子単位は、それぞれ、

$$L_{\text{au}} = \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^{-1} \approx 0.52918 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (2)$$

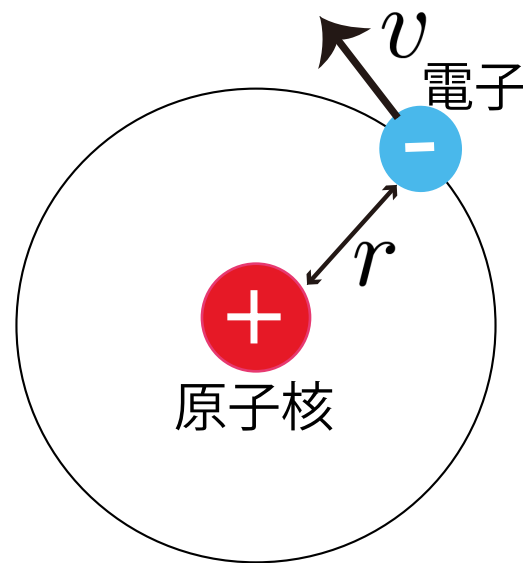
$$E_{\text{au}} = \frac{m}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \approx 4.3598 \times 10^{-18} \text{ J} \quad (3)$$

$$T_{\text{au}} = \frac{\hbar^3}{m} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^{-2} \approx 2.4189 \times 10^{-17} \text{ s} \quad (4)$$

注:速度の原子単位は、

$$V_{\text{au}} \equiv \frac{L_{\text{au}}}{T_{\text{au}}} \approx \frac{(\text{光速})}{137.036} \quad (5)$$

例:水素原子の半古典モデル(Bohrモデル)



(軌道半径) = L_{au}

(電子速度) = V_{au}

(時間周期) = $2\pi T_{\text{au}}$

(電子の離脱エネルギー)
= (イオン化エネルギー)
= $(1/2) E_{\text{au}}$

注: (水素原子の大きさ): $2 L_{\text{au}} \doteq 0.1 \text{ nm}$
($1 \text{ nm (nano meter)} = 10^{-9} \text{ m}$)

注: (電子運動の時間スケール):

$T_{\text{au}} \doteq 24 \text{ as} \doteq (1/40) \text{ fs}$

($1 \text{ as (atto second)} = 10^{-18} \text{ s}$)

($1 \text{ fs (femto second)} = 10^{-15} \text{ s}$)

・電子(波)ダイナミクス計算: (時間刻み) $\delta t \leq 0.1 \text{ fs}$

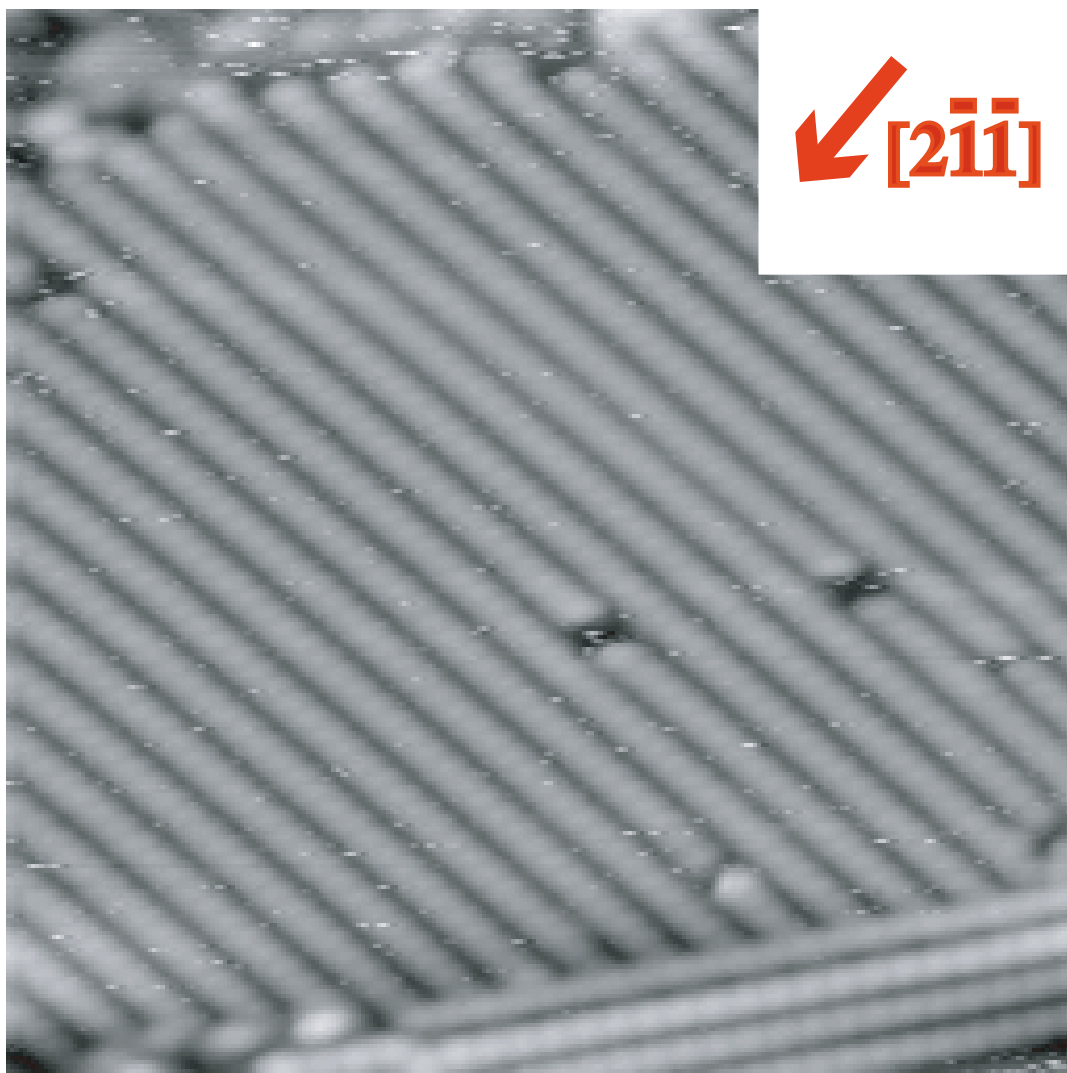
・原子運動(分子動力学)計算: (時間刻み) $\delta t \doteq 1 \text{ fs}$

量子物質科学の「極小(原子)スケール」とは？ (2)

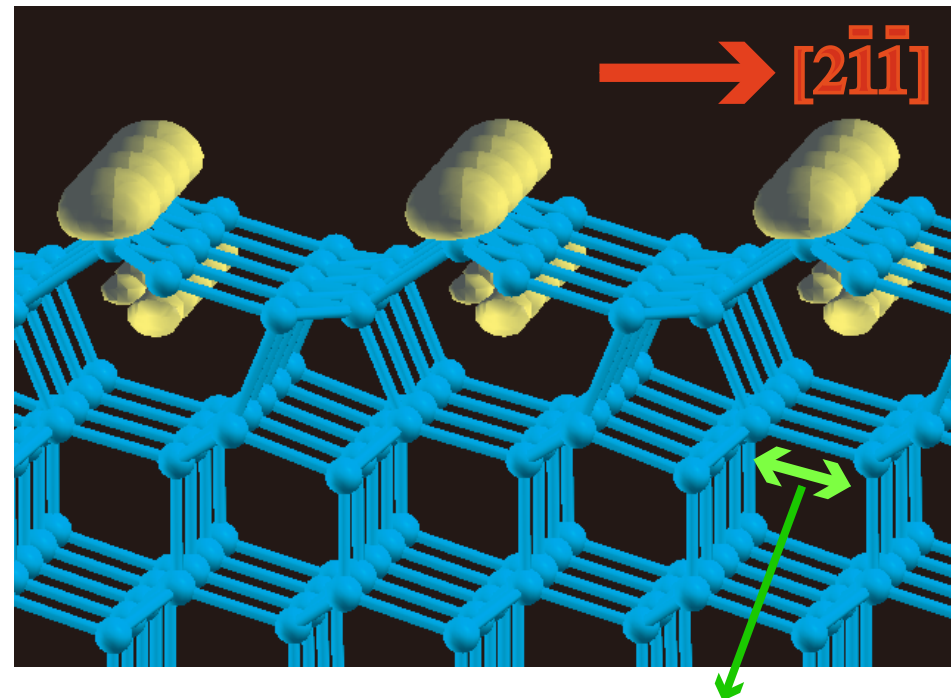
原子スケールの実験例：

シリコン表面の透過型電子線顕微鏡(STM)像

← 15 nm →



対応する電子状態計算



注：シリコン結晶での
(原子間距離, 結合距離) = 0.24 nm

←Mera et al.,
Ultramicroscopy 42-44, 915 (1992)
注：(111)-(2x1)型表面

2016年11月28-29日, 電通大

研究会「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」

はじめに

星健夫(鳥取大)

1. 概要: 量子物質科学における時空間アップスケーリング
2. 背景: 並列計算へのパラダイムチェンジ
3. トピック: 量子物質科学の「極小(原子)スケール」とは?
4. トピック: 大規模量子物質計算と大行列問題
5. 展望: シミュレーションと機械学習のコード融合

大規模量子物質計算と大行列問題(1)

一電子型理論

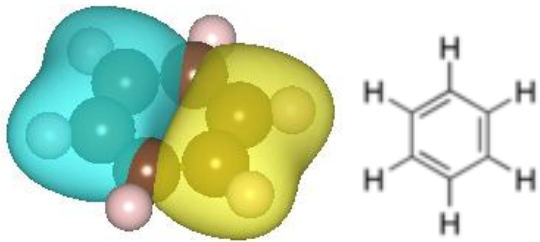
$\phi(\mathbf{r})$ 電子波 (スカラー関数)

計算(離散)系

$$\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_M)^T$$

ベクトルサイズ: M

ベンゼン分子における例



局在(原子中心)基底関数(given)展開

$$\phi(\mathbf{r}) := \sum_j^m u_j f_j(\mathbf{r})$$

他、平面波、実空間グリッド、など

以下、この場合の話

一電子型理論では、典型的には

ベクトルサイズ: $M = \boxed{m} \propto \boxed{n}$

↑ ↑
基底数 原子数

大規模量子物質計算と大行列問題(2)

N 電子問題を直接解くことの困難

N 体の直積空間で波動関数を定義: $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N)$

' Many electrons - encountering an exponential wall '

Ref.: Walter Kohn, Nobel Lecture, Rev. Mod. Phys. 71, 1253 (1999).

ベクトルサイズ: $M = c^N$ (c : 定数)

例: $c=2, N=36$ の場合、 $M=2^{36} = 68,719,476,736$ (約700億)

倍精度複素数なら、(必要メモリ) = $16 \text{ B} \times M \doteq 1 \text{ TB}$

→ 計算法いろいろ

(a) 一体型の有効理論, 大半の電子状態計算

基底関数の個数 m に対して、ベクトルサイズ: $M = m$

(b) 二体型の有効理論, 例: 励起子(exiton)=(正電荷粒子と負電荷粒子の複合粒子)

基底関数の個数 m に対して、ベクトルサイズ: $M = m^2$

(c) N 体問題

大規模量子物質計算と大行列問題(3)

数理的な分類

(a-1) 定常状態

典型例:(非線形)固有値方程式

$$H\mathbf{y} = \lambda\mathbf{y}$$

(a-2) 非定常状態

典型例:(非線形)時間発展方程式

$$\dot{\mathbf{u}} = -iH\mathbf{u}$$

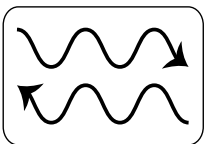
(b-1) エルミート行列

→ 閉鎖系、
保存量あり(粒子数、エネルギー)

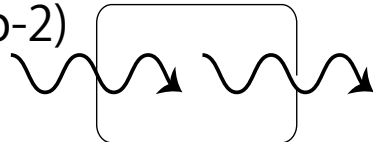
(b-2) 非エルミート行列

→ 非閉鎖系(デバイス等)
散逸あり(粒子数、エネルギー)

(b-1)



(b-2)



(c-1) 密行列ソルバー

→(大雑把には)最大行列サイズ
M=100万次元くらいまで

(c-2) 疎行列ソルバー

大規模量子物質計算と大行列問題(4)

数理からの視点:「汎用型解法」研究から、「ニーズ指向型解法」研究へ。
(汎用性と個別最適性は、相反する場合が多い)

山本有作氏(電通大)作成スライド

アプリケーション

流体計算

構造計算

電子状態計算

格子QCD

高性能実装法 ②

自動チューニング技術

メーコア 超並列向け最適化技術

行列計算
アルゴリズム

連立1次
方程式
・最小2乗法

超大規模
固有値問題

非線形
固有値問題

固有値計算

時間依存
固有値問題

固有値
ヒストグラム

中規模・
強スケーリング

行列関数

行列計算部品 ③

直交変換による帯行列化

複素領域内の固有値数計算

ベクトル逐次添加型直交化

基盤技術

①

同期・通信削減型アルゴリズム構成技術
階層メモリ向け最適化技術

収束性解析技術
誤差解析技術

汎用型
従来機能

ニーズ指向 (電子状態計算向け)
新機能

2016年11月28-29日, 電通大

研究会「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」

はじめに

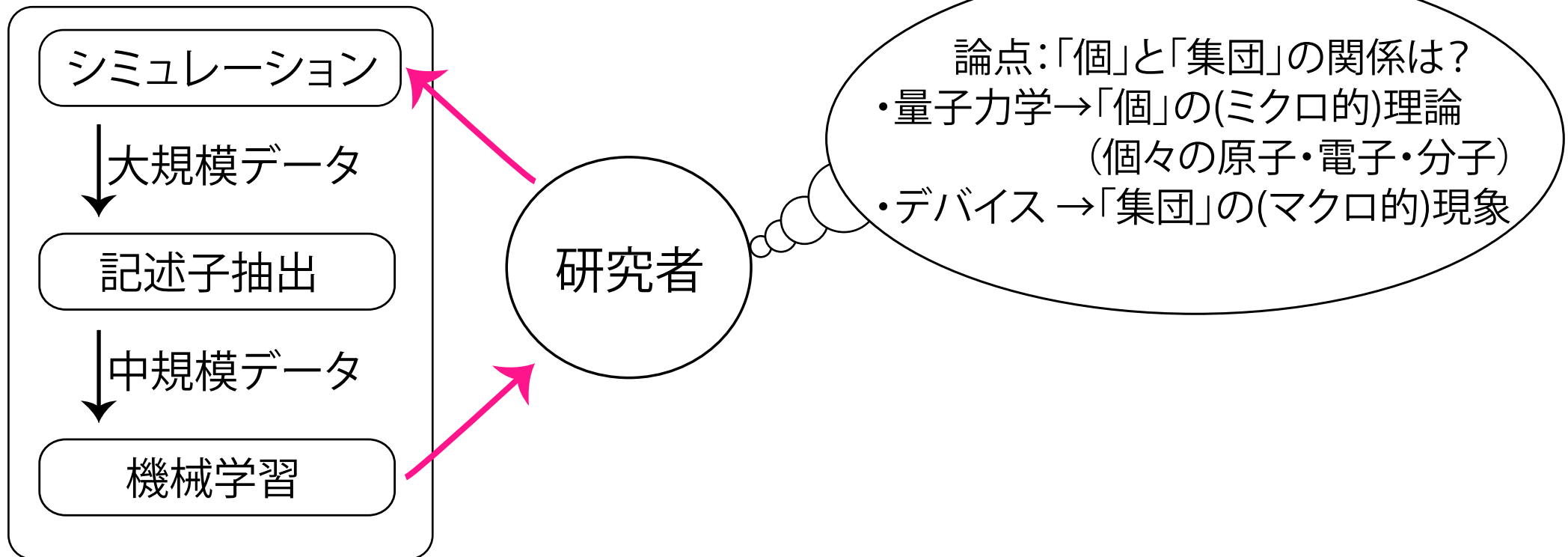
星健夫(鳥取大)

1. 概要: 量子物質科学における時空間アップスケーリング
2. 背景: 並列計算へのパラダイムチェンジ
3. トピック: 量子物質科学の「極小(原子)スケール」とは?
4. トピック: 大規模量子物質計算と大行列問題
5. 展望: シミュレーションと機械学習のコード融合

展望：シミュレーションと機械学習のコード融合

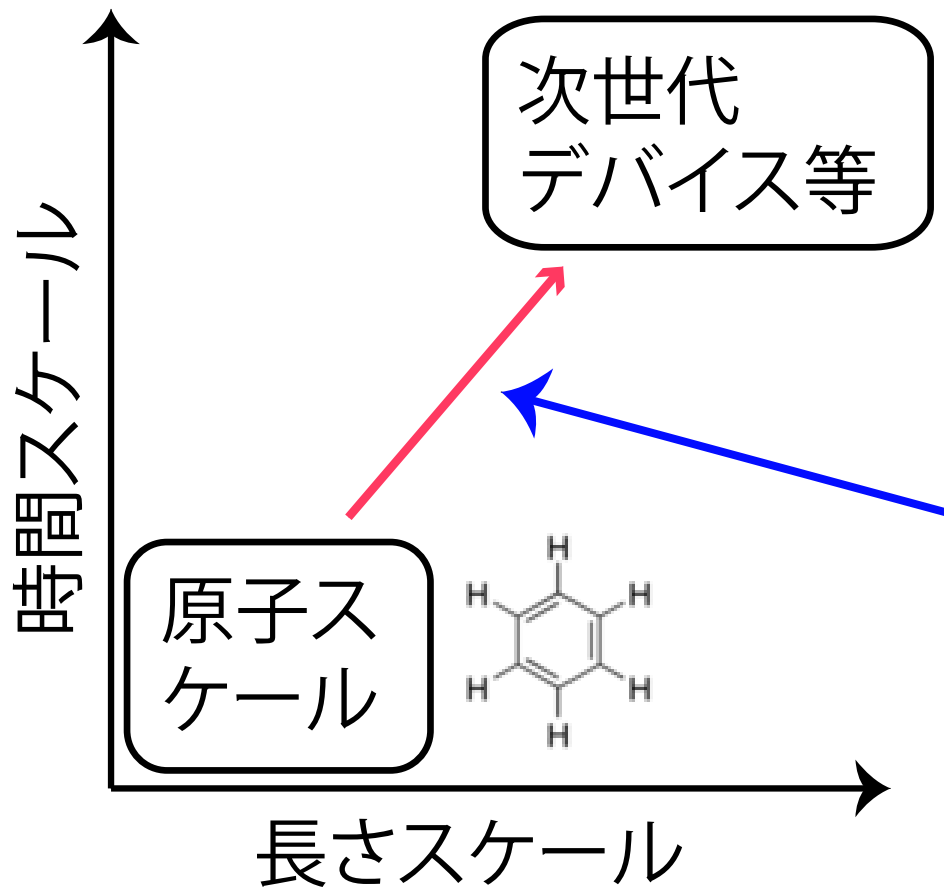
- ・大規模シミュレーション
→ (人間が直接知覚できないほどの) 大規模データの生成機
- ・展望：すべてをスパコンで
→ スパコン上で「シミュレーション＋記述子抽出＋機械学習」のコード融合
(例：大規模主成分解析→大行列の特異値分解)

スーパーコンピュータ



まとめ

計算物質科学における 時空間アップスケーリング



並列計算へのパラダイムチェンジ

量子物質科学の「極小(原子)スケール」とは？

大規模量子物質計算と大行列問題

展望：シミュレーションと機械学習のコード融合

数理・情報科学

(超並列アルゴリズム、
理構造保存型数値手法、
次世代スパコン、
データ駆動科学、など)