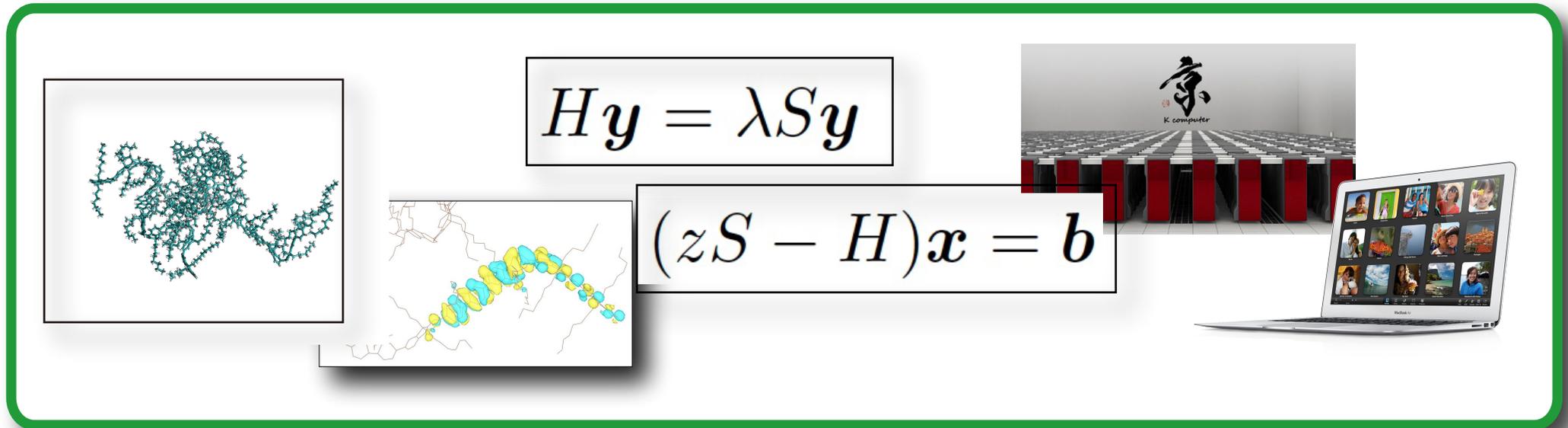


京での超大規模量子物質シミュレーションとクリロフ部分空間

鳥取大学, JST-CREST(PostPeta) 星健夫 (主な所属学会: 物理学会, 応用数学会)



主な共同研究者

数理系: 曾我部知広(愛知県立大), 宮田考史・李東珍・張紹良(名古屋大)・井町宏人(東大)

物理系: 山元進(東京工科大), 西野信也(東大)・藤原毅夫(東大)・

川居 佳史・秋山洋平・山崎溪太・横山誠也(鳥取大)

予算補助

JST-CREST(PostPeta), JST-ASTEP, 科研費新領域(コンピューティクス), 構造材料元素戦略拠点, 他

京での超大規模量子物質シミュレーションとクリロフ部分空間

鳥取大学, JST-CREST(PostPeta) 星健夫 (主な所属学会: 物理学会, 応用数学会)

- 第1部 京での超大規模量子物質シミュレーションとクリロフ部分空間
- 第2部 応用から見た行列ソルバーのチュートリアル分類
- 第3部 「物理と数理の接点」としてのトピック
- 第4部 現状と展望

主な共同研究者

数理系: 曾我部知広(愛知県立大), 宮田考史・李東珍・張紹良(名古屋大)・井町宏人(東大)
物理系: 山元進(東京工科大), 西野信也(東大)・藤原毅夫(東大)・
川居 佳史・秋山洋平・山崎溪太・横山誠也(鳥取大)

予算補助

JST-CREST(PostPeta), JST-ASTEP, 科研費新領域(コンピューティクス), 構造材料元素戦略拠点, 他

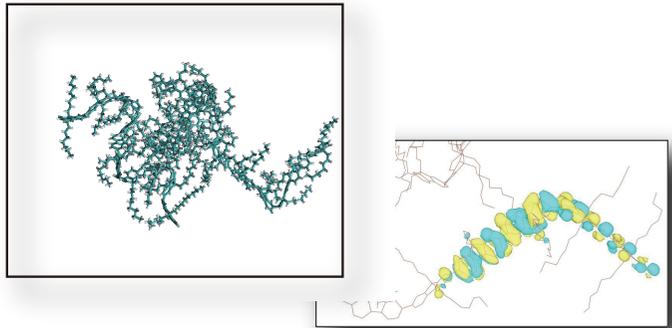
京での超大規模量子物質シミュレーションとクリロフ部分空間

1. Overview : Application-Algorithm-Architecture co-design
2. シミュレーションコードELSESESによる、
「京」全ノードを利用した超大規模(1億原子, 100ナノスケール)計算
3. 数理的基盤: シフト型線形方程式とクリロフ部分空間解法
4. 'Open Data' (行列データベース)
5. 数理以外の技術
(a) 並列ファイルIO, (b) 可視化
6. 応用: ナノ物質研究
7. まとめ

Application-Algorithm-Architecture co-design

→ 応用(物理)分野・数理分野・高速計算技術(HPC)分野の連携研究

Application : quantum material simulationn



..

Algorithm : numerical linear algebra

$$Hy = \lambda Sy$$

$$(zS - H)x = b$$

Architecture : from supercomputers to personal computers



Application-Algorithm-Architecture co-design

→ 応用(物理)分野・数理分野・高速計算技術(HPC)分野の連携研究

Tutorial : What is electronic state calculation ?

- (a) quantum-mechanical 'wave' theory for electrons in materials (*)
- (b) basics of quantum material simulations
- effective Schrödinger equation
- generalized Hermitian eigen-value problem (as a typical numerical problem)

$$H\mathbf{y} = \lambda S\mathbf{y} \quad (S \approx I)$$

λ : energy for each electron ('eigen energy')
 \mathbf{y} : shape of electronic 'wave' ('wavefunction')(**)

(*) Walter Kohn (1923~)
Nobel Prize at 1998



Application-Algorithm-Architecture co-design

→ 応用(物理)分野・数理分野・高速計算技術(HPC)分野の連携研究

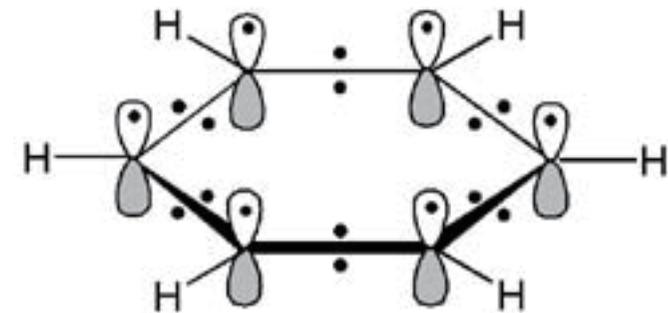
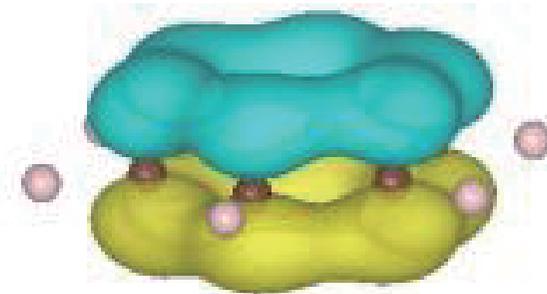
Tutorial : What is electronic state calculation ?

- (a) quantum-mechanical 'wave' theory for electrons in materials (*)
- (b) basics of quantum material simulations
- effective Schrödinger equation
- generalized Hermitian eigen-value problem (as a typical numerical problem)

$$Hy = \lambda Sy \quad (S \approx I)$$

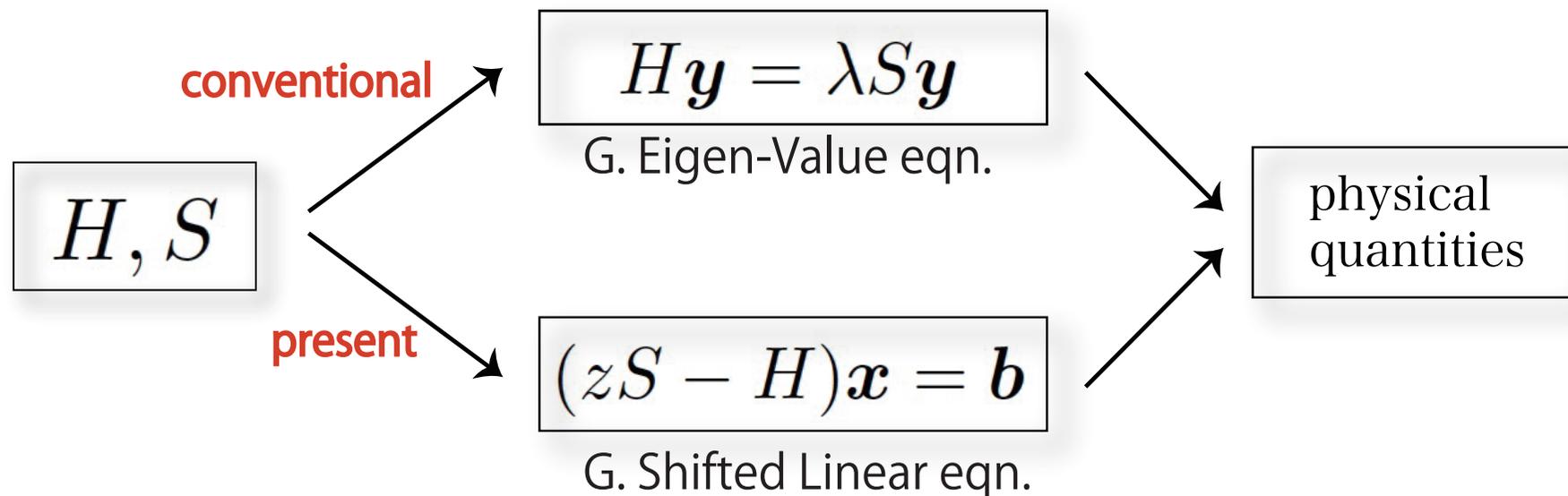
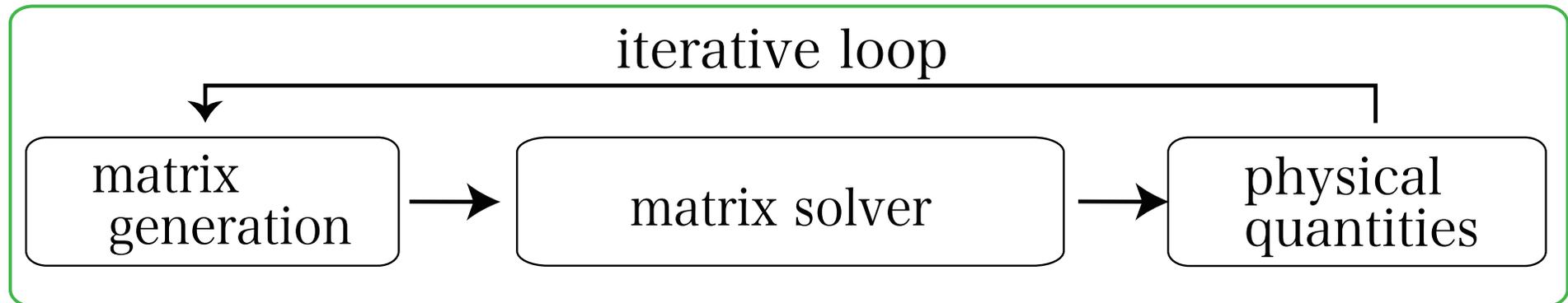
λ : energy for each electron ('eigen energy')
 y : shape of electronic 'wave' ('wavefunction')(**)

(*) An electronic 'wave'
(wave function)
of Benzene (C₆H₆)



Application-Algorithm-Architecture co-design

- 物理分野・数理分野・高速計算技術(HPC)分野の連携研究
- 目的物理量ごとに、最適な計算手順(workflow)を構築



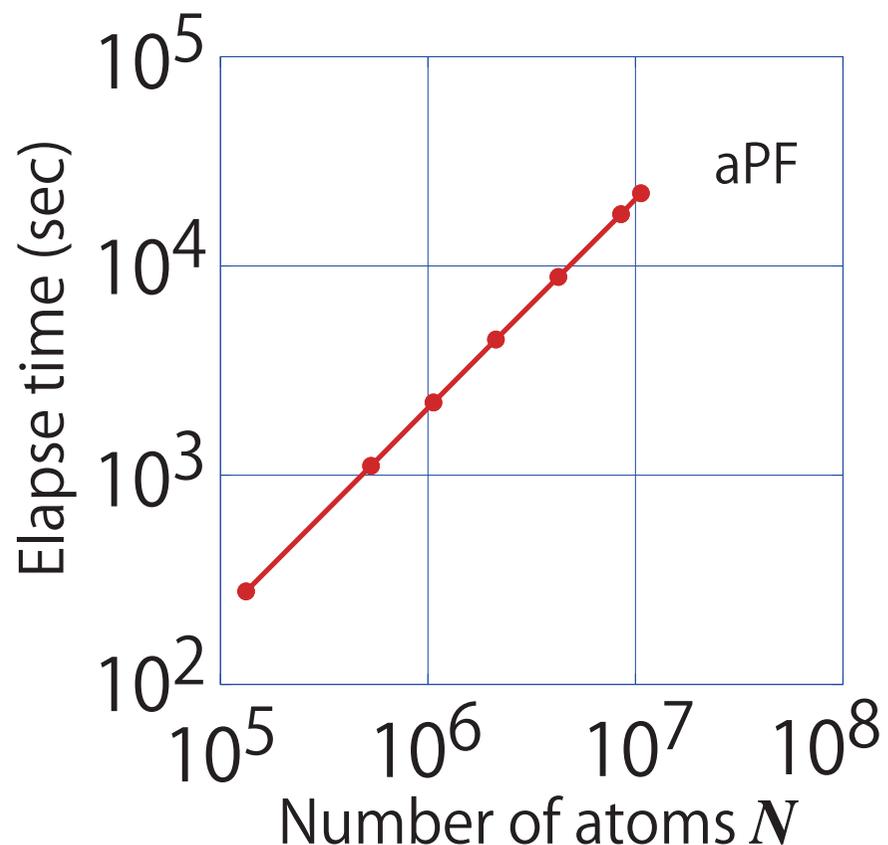
ELSES, our electronic-structure calculation code

Hoshi et al., JPSJ 82, 023710 (2013); Hoshi et al., Preprint (<http://arxiv.org/abs/1307.3218>)

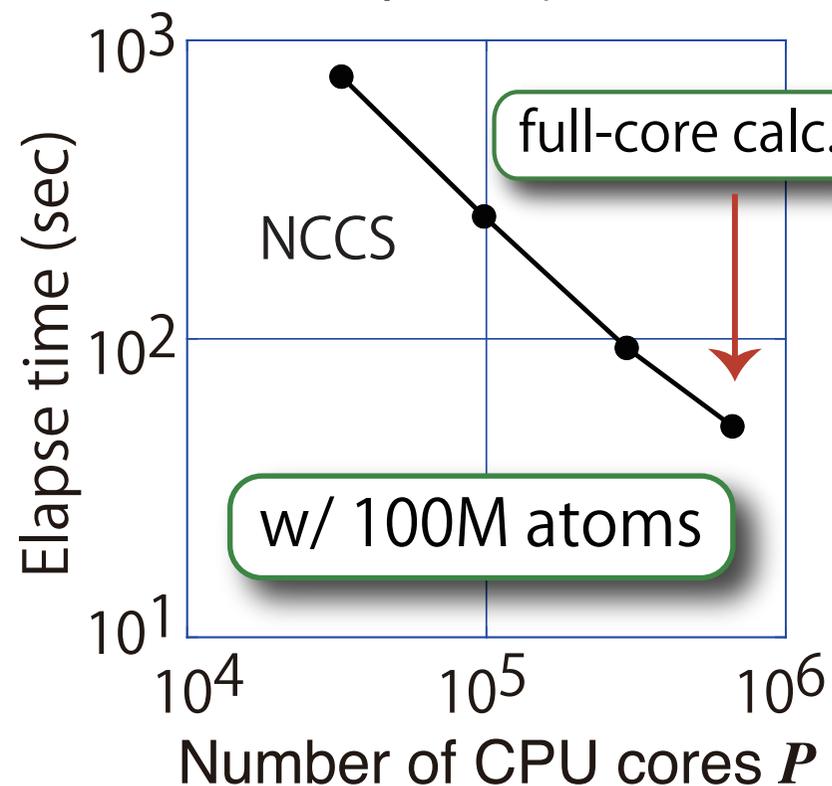
Benchmark with upto 100M atoms (\Leftrightarrow Si : $(126\text{nm})^3$ region)

aPF : amorphous-like conjugated polymer, poly-(9,9 dioctyl-fluorene),
NCCS: sp²-sp³ nano composite carbon solid

(a) Order- N scaling



(b) Parallel efficiency (strong scaling) on the K computer (\sim all nodes)



ELSES, our electronic-structure calculation code

Hoshi et al., JPSJ 82, 023710 (2013); Preprint (<http://arxiv.org/abs/1307.3218>)

Benchmark with upto 100M atoms (\rightleftharpoons Si : $(126\text{nm})^3$ region)

aPF : amorphous-like conjugated polymer, poly-(9,9 dioctyl-fluorene),

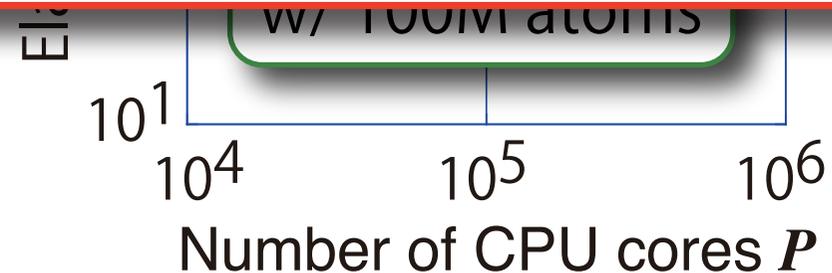
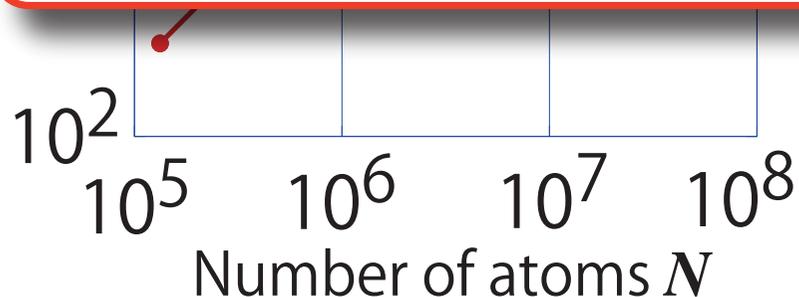
Methodology

- Original linear-algebraic order- N algorithms with generalized shifted linear equations

$$(zS - H)x = b$$

- Applicable both to metals and insulators
- Modelled (TB-type) systems, based on *ab initio* calc.,
- A DFT-derived charge-self-consistent formulation (optional)

Elapse time (sec)



Basic equations

Generalized eigen-value (GEV) equation

$$H \mathbf{y}_k = \varepsilon_k S \mathbf{y}_k$$

H, S : Hermitian, S : positive definite ($S \doteq I$)

wavefunction
formulation

$$G = \sum_k \frac{\mathbf{y}_k \mathbf{y}_k^T}{z - \varepsilon_k}$$

Generalized shifted linear (GSL) equations

$$(zS - H) \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (z : \text{complex energy})$$

non-Hermitian

$$\rightarrow \mathbf{x} = G \mathbf{b}$$

with $G \equiv (zS - H)^{-1}$: the Green's function

the propagation
(Green's) function
formulation

Mathematical structure of quantum physical quantities

Generalized eigen-value problem

$$H\mathbf{y}_k = \lambda_k S\mathbf{y}_k \quad (1)$$

Physical quantity with a given matrix X

(Ex. the case of $X = H$
--> Electronic structure energy)

$$\langle X \rangle \equiv \sum_k f(\lambda_k) \mathbf{y}_k^\dagger X \mathbf{y}_k \quad (2)$$

with a given weight function

('Fermi distribution function')

$$f(\lambda) \equiv \frac{1}{\exp(\beta(\lambda - \mu)) + 1} \quad (3)$$

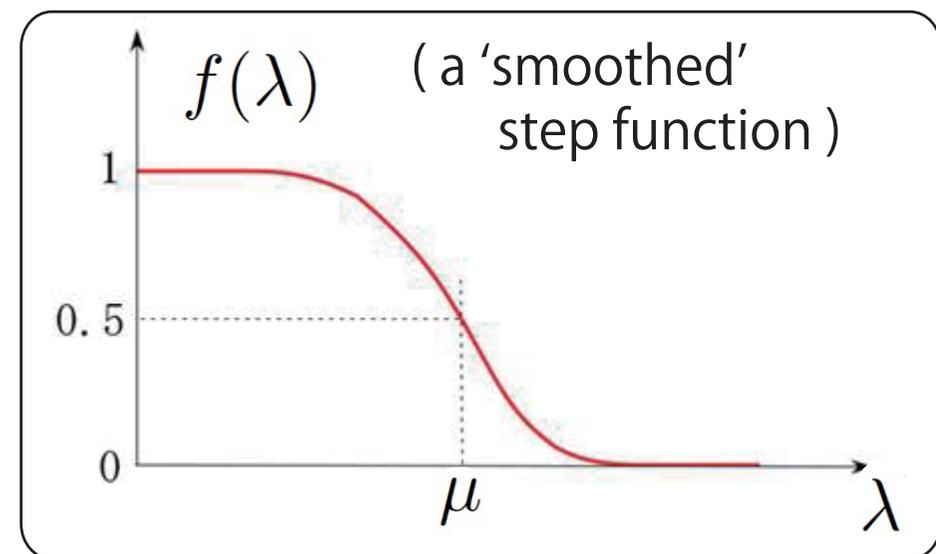
(β, μ : given parameters)

Physical quantity in trace form

$$\langle X \rangle = \text{Tr}[X\rho] \quad (4)$$

with the density matrix

$$\rho \equiv \sum_k f(\lambda_k) \mathbf{y}_k \mathbf{y}_k^\dagger \quad (5)$$



Quantum physical quantities in trace form

Sparse property of physical quantity

When we calculate a physical quantity

$$\text{Tr}[X\rho] = \sum_{i,j} X_{ij} \rho_{ji}$$

(X : a sparse matrix)

We need the selected elements of $\{\rho_{ji}\}$ only among the (i, j) pairs with $X_{ij} \neq 0$, even if ρ is a dense matrix.

→ “Quantum locality”

or “Nearsightedness principle”

W. Kohn, Phys. Rev. Lett, 76, 3168 (1996)

Simplest example

$$X = \begin{pmatrix} 0 & X_{12} & 0 \\ X_{21} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$



$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} \end{pmatrix}$$

We need only these elements !!

電子状態計算に派生する大行列数理問題の例

- (特殊な) 一般化固有値問題: $H\mathbf{y} = \varepsilon S\mathbf{y}$

H, S : real symmetric ($\in \mathbb{R}^{N \times N}$), S : positive definite,

→ (a) $S = I$ or $S \doteq I$, (b) 疎行列解法 or 密行列解法

- 一般化シフト型線形問題: $(H - zS)\mathbf{x}(z) = \mathbf{b}$ (z : complex)

Remark:

「数学から見れば特殊だが、ある応用分野から見れば一般的」
な問題設定

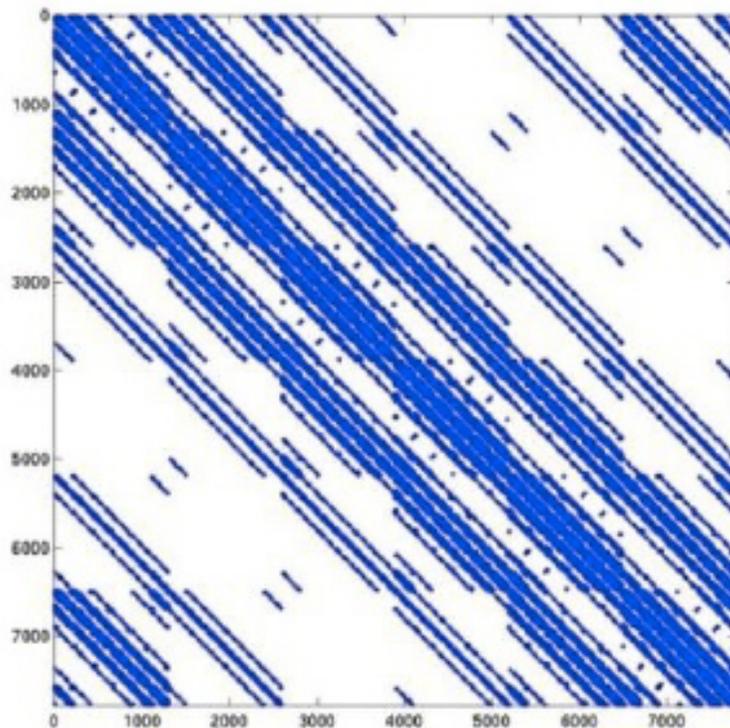
→ 数学と他分野との接点

'Open data' (行列データベース)

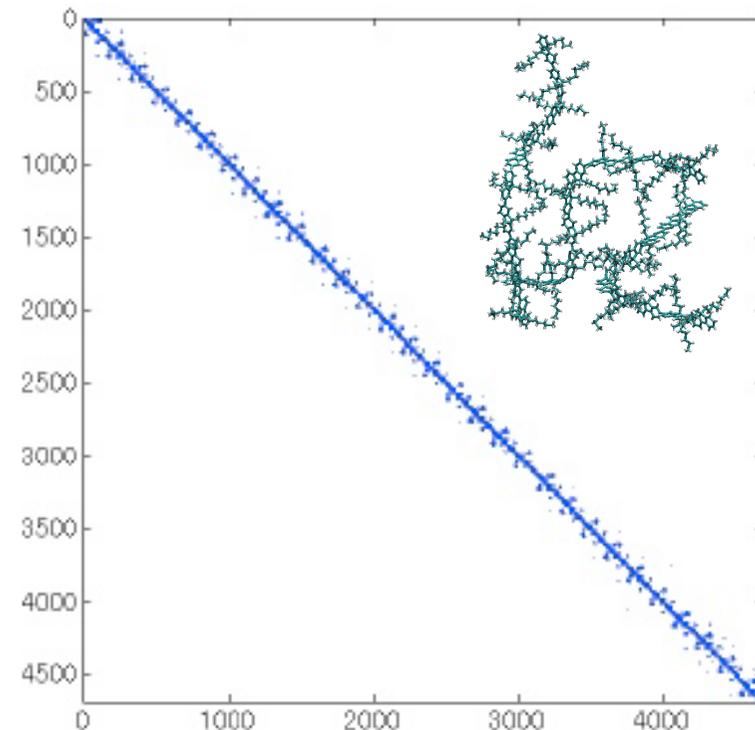
- 数理系研究者からの要望で、アルゴリズム研究用に行列データを提供。
- 「物質⇔行列性質(疎密性・固有値分布)⇔計算アルゴリズム」の連携研究
(Application-Algorithm-Architecture co-design)

ELSES matrix library (行列次元: $M = 10^2 \sim 10^6$)

(a) Solid gold



(b) 有機EL型アモルファス状
共役高分子(ポリフルオレン)



'Open data' (行列データベース)

- 数理系研究者からの要望で、アルゴリズム研究用に行列データを提供。
- 「物質⇔行列性質(疎密性・固有値分布)⇔計算アルゴリズム」の連携研究 (Application-Algorithm-Architecture co-design)

参考:疎行列データを研究用に提供している既存サイト

Matrix Market

<http://math.nist.gov/MatrixMarket/>



A visual repository of test data for use in comparative studies of algorithms for numerical linear algebra, featuring nearly 500 sparse matrices from a variety of applications, as well as matrix generation tools and services.

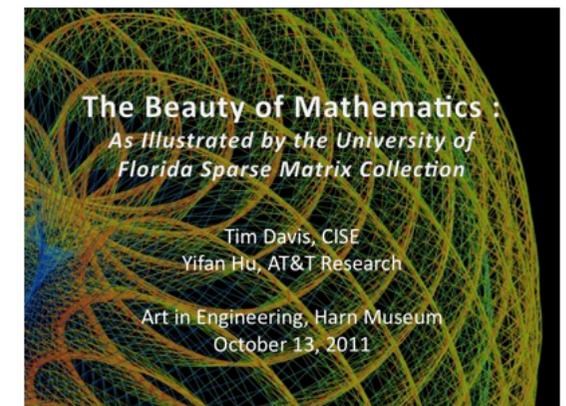
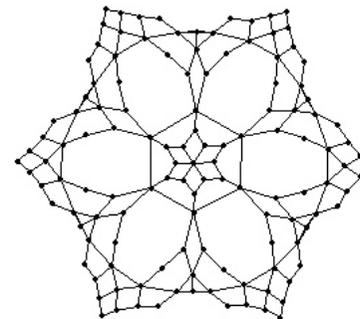
University of Florida Sparse Matrix Collection

<http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/>

The University of Florida Sparse Matrix Collection

For a general-audience description of the matrices and images posted here, see our short [Sparse Matrices](#).

[Click here for a presentation at the Harn Museum, University of Florida](#)



(click reload to see a replay of the animation).

数理以外の技術 (a) 並列ファイルIO

(1) 「京」・FX10による、並列ファイルIO機構(「ランクディレクトリ」)

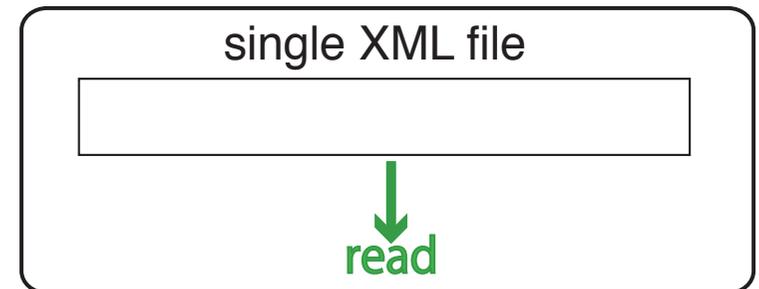
(2) 入出力ファイル→XML形式の分割ファイル

(例:1000万原子系のデータファイル → ファイル容量約1GB)

ex. Acceralation in the initial procedure with 10M atoms

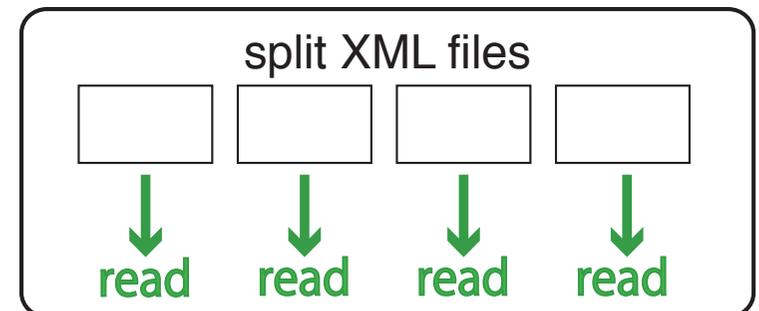
(a) with non-parallel file reading

→ $T = 1426.6$ sec



(b) with parallel file reading

→ $T = 69.6$ sec



数理以外の技術 (b) 可視化

分散された大容量データ

→ 数値解析と可視化の一体処理

→ Python-based original visualization tool 'VisBAR'

ELSES



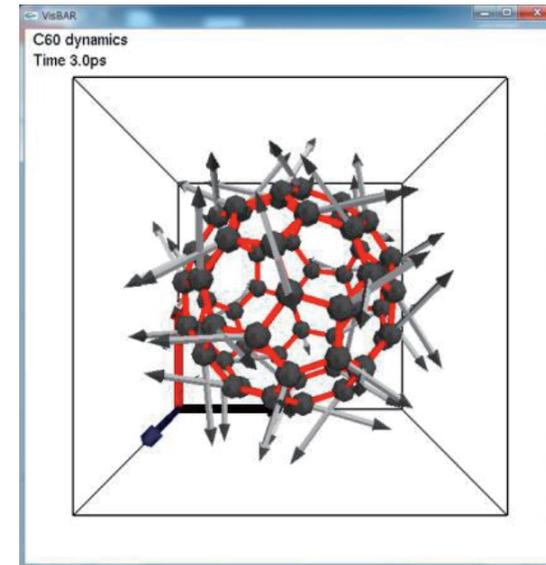
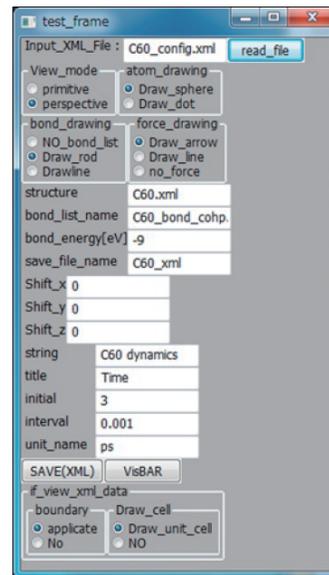
Gaussian



VASP



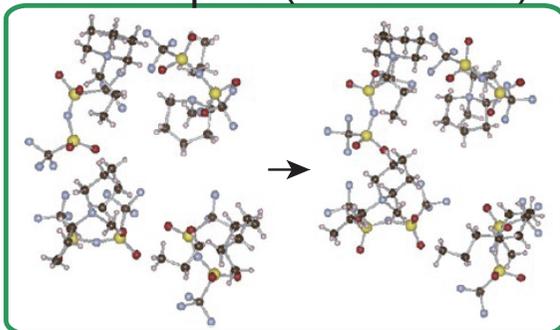
VisBAR



ELSES:物質研究の例(「京」利用の前)

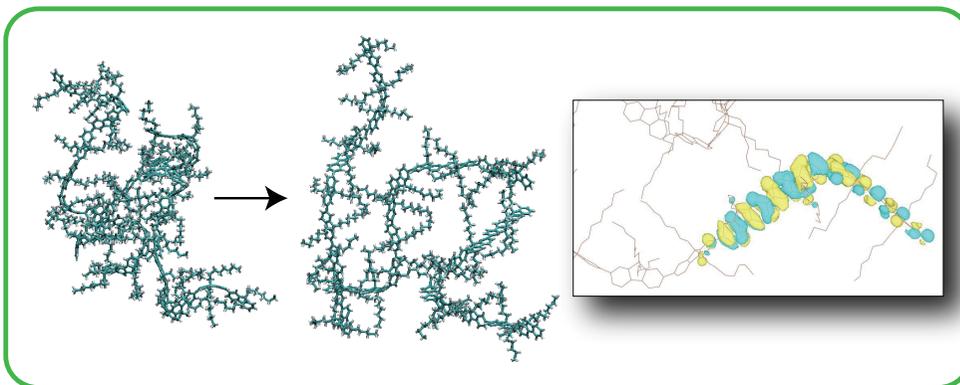
- 方針 (i) 産業利用
- (ii) 新物質(日本発)
- (iii) 基準物質

Ionic liquid (PP13-TFSI)

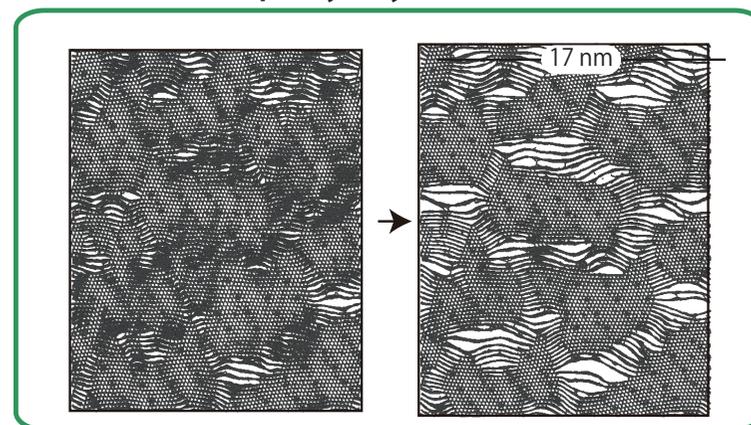


Li⁺ diffusion in solids (Nishino et al.)

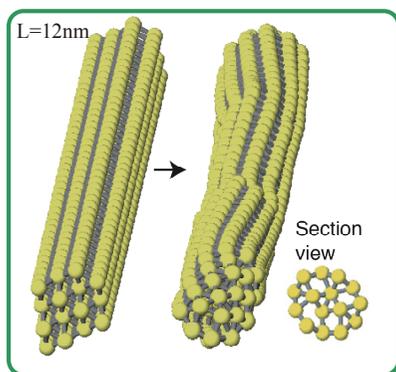
Amourphous-like conjugated polymer (poly-(9,9 dioctyl fluorene) [有機EL]



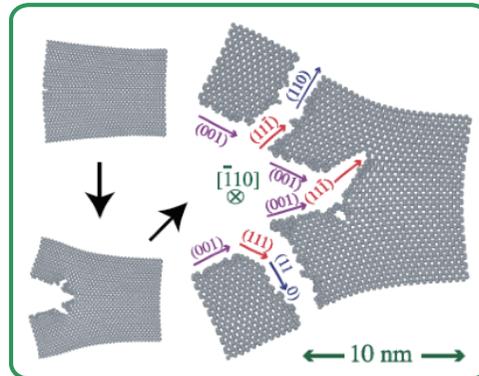
sp²-sp³ nano-composite carbon solid (for nano-polycrystalline diamond)



helical gold nanowire



silicon brittle fracture



謝辞(共同研究・データ提供) 西野信也・藤原毅夫(東大), 山元進(東京工科大), 山崎久嗣(トヨタ自動車), 善甫康成(法政大), 石田雅也(住友化学)

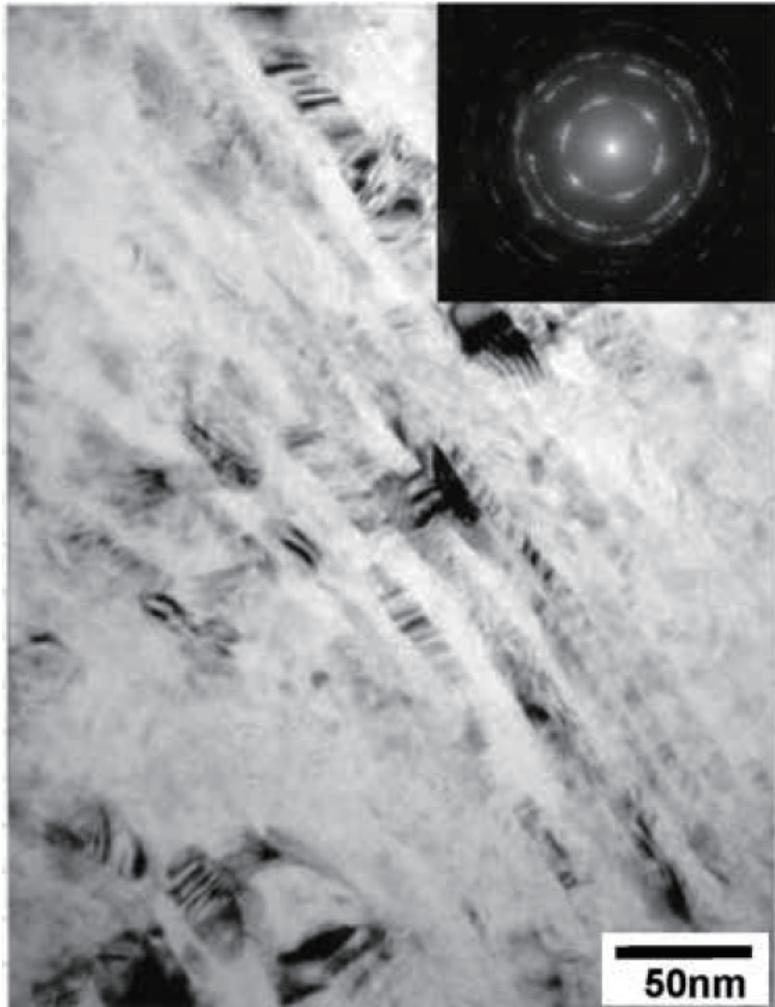
Nano-polycrystalline diamond (NPD)

→ novel ultra-hard material

T. Irifune, et al. , Nature 421, 599 (2003) (@ Ehime Univ.)

→ harder than conventional diamond crystals

100-nm-scale structure



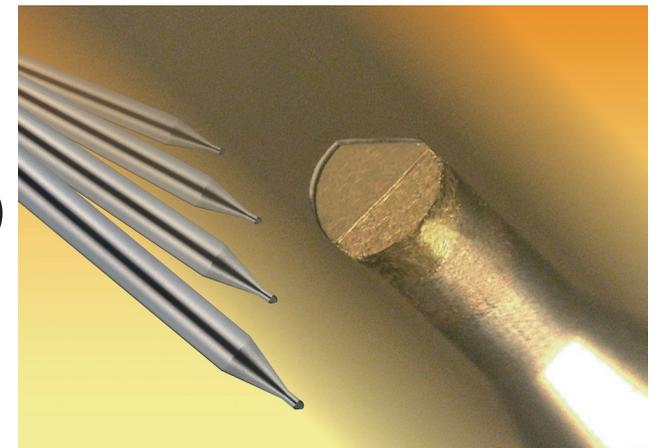
macroscale
sample



1 mm



industrial product (2012)
(Sumitomo Electric
Industries)



Visualization analysis on sp^2 / sp^3 nano composite carbon solid

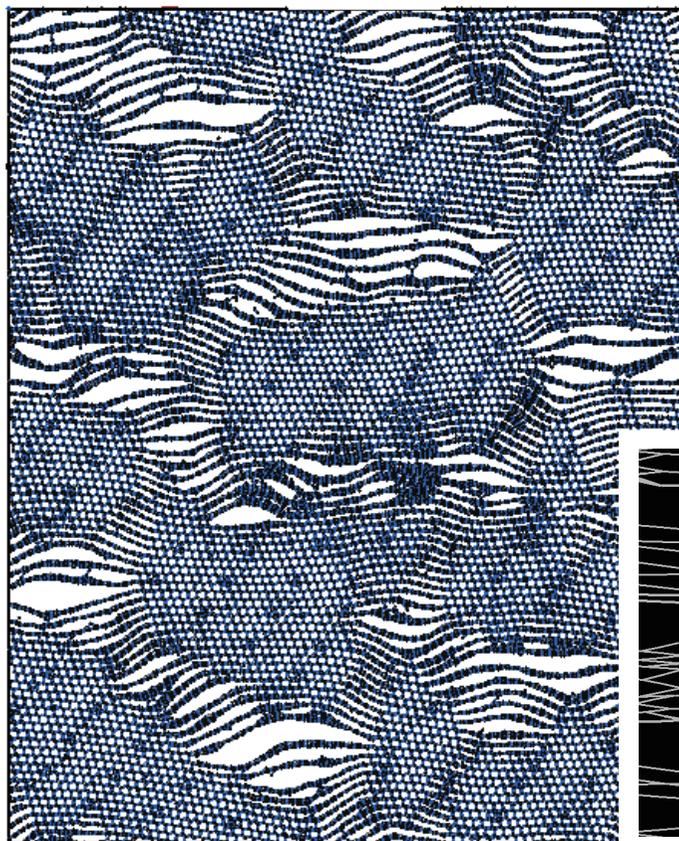
- Preliminary research for nano-polycrystalline diamond
 - (1) Massively parallel quantum molecular dynamics
 - (2) Massively parallel Green's function analysis (π -COHP*)

→ the distinction between sp^2 and sp^3 -domains

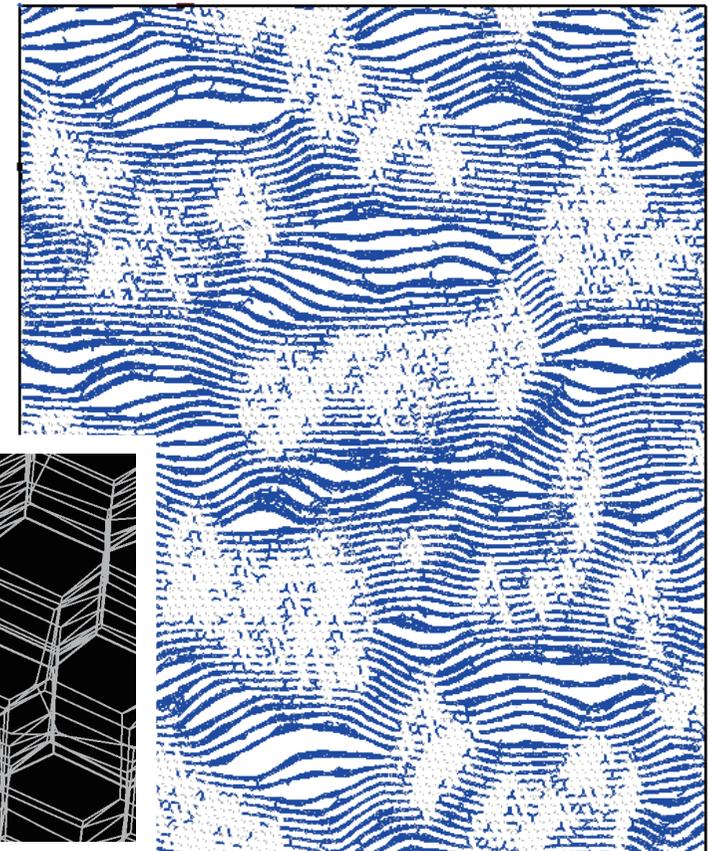
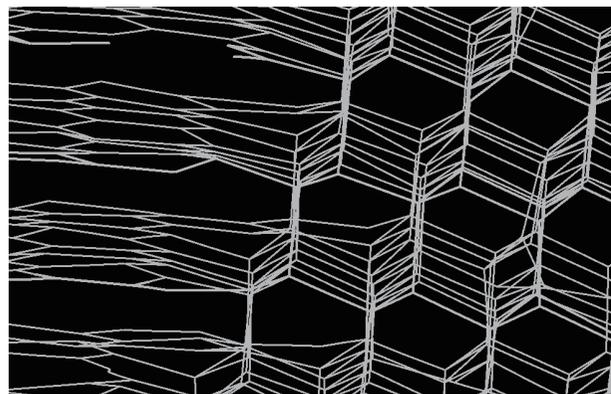
(A) Visualize sp^2 and sp^3 domains

(B) Visualize only sp^2 domains

← 17 nm →



sp^2 - sp^3
domain
boundary



京での超大規模量子物質シミュレーションとクリロフ部分空間

まとめ

1. Overview : Application-Algorithm-Architecture co-design
→物理・数理・HPC分野の連携研究
2. シミュレーションコードELSESESによる、
「京」全ノードを利用した超大規模(1億原子, 100ナノスケール)計算
3. 数理的基盤: シフト型線形方程式とクリロフ部分空間解法
→後で、もう少し詳しく
4. 'Open Data' (行列データベース)
5. 数理以外の技術
 - (a) 並列ファイルIO (→「京」のランクディレクトリ機能)
 - (b) 可視化 (と数値解析の一体処理)
6. 応用: ナノ物質研究
→3つの方針(産業利用・新物質・基準物質)
→例: ナノ多結晶ダイヤモンド

応用から見た行列ソルバーのチュートリアル的分類

1. 解法の基本的戦略:「射影型」「変換型」
2. 行列の性質による解法のカテゴリ
3. 行列サイズのカテゴリ:大規模・中規模・小規模
4. ワークフロー(実装)の重要性
5. まとめ

1. 解法の基本的戦略: 「射影型」・「変換型」

Krylov (iterative) solvers

- for sparse matrices
- basics of $O(N)$ calc.
- ‘projection’ strategy

ex. Conjugate Gradient
(CG) algorithm

Direct solvers

- for dense matrices,
- $O(N^3)$ calc
- ‘transformation’ strategy

‘projection’ on the Krylov subspace of

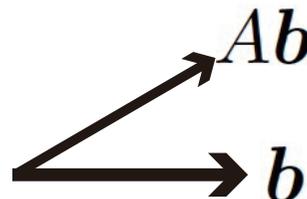
$$K_n(A; \mathbf{b}) \equiv \text{span} \{ \mathbf{b}, A\mathbf{b}, A^2\mathbf{b}, \dots, A^{n-1}\mathbf{b} \}$$

n : subspace dimension (iteration number)

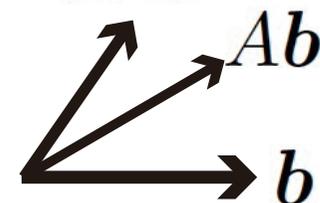
$n=1$



$n=2$



$n=3$ $A^2\mathbf{b}$



1. 解法の基本的戦略: 「射影型」・「変換型」

Krylov (iterative) solvers

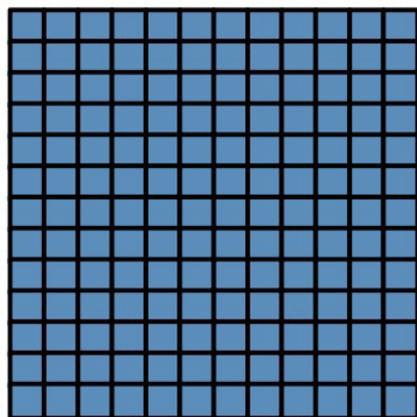
- for sparse matrices
- basics of $O(N)$ calc.
- 'projection' strategy

Direct solvers

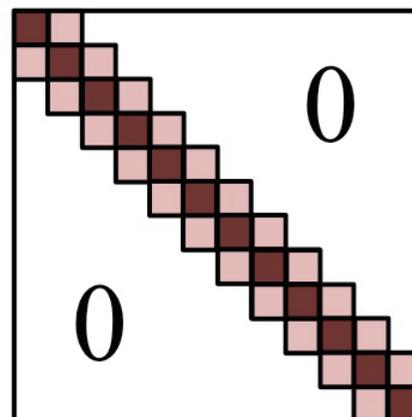
- for dense matrices,
- $O(N^3)$ calc
- 'transformation' strategy

'transformation' of the whole space

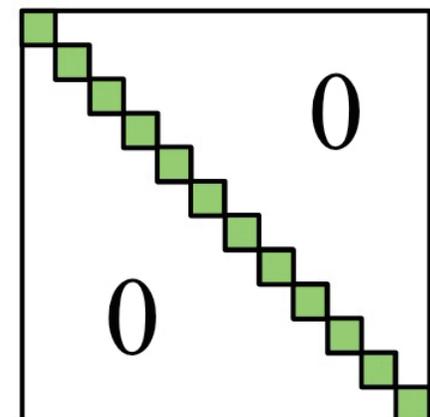
Example



dense

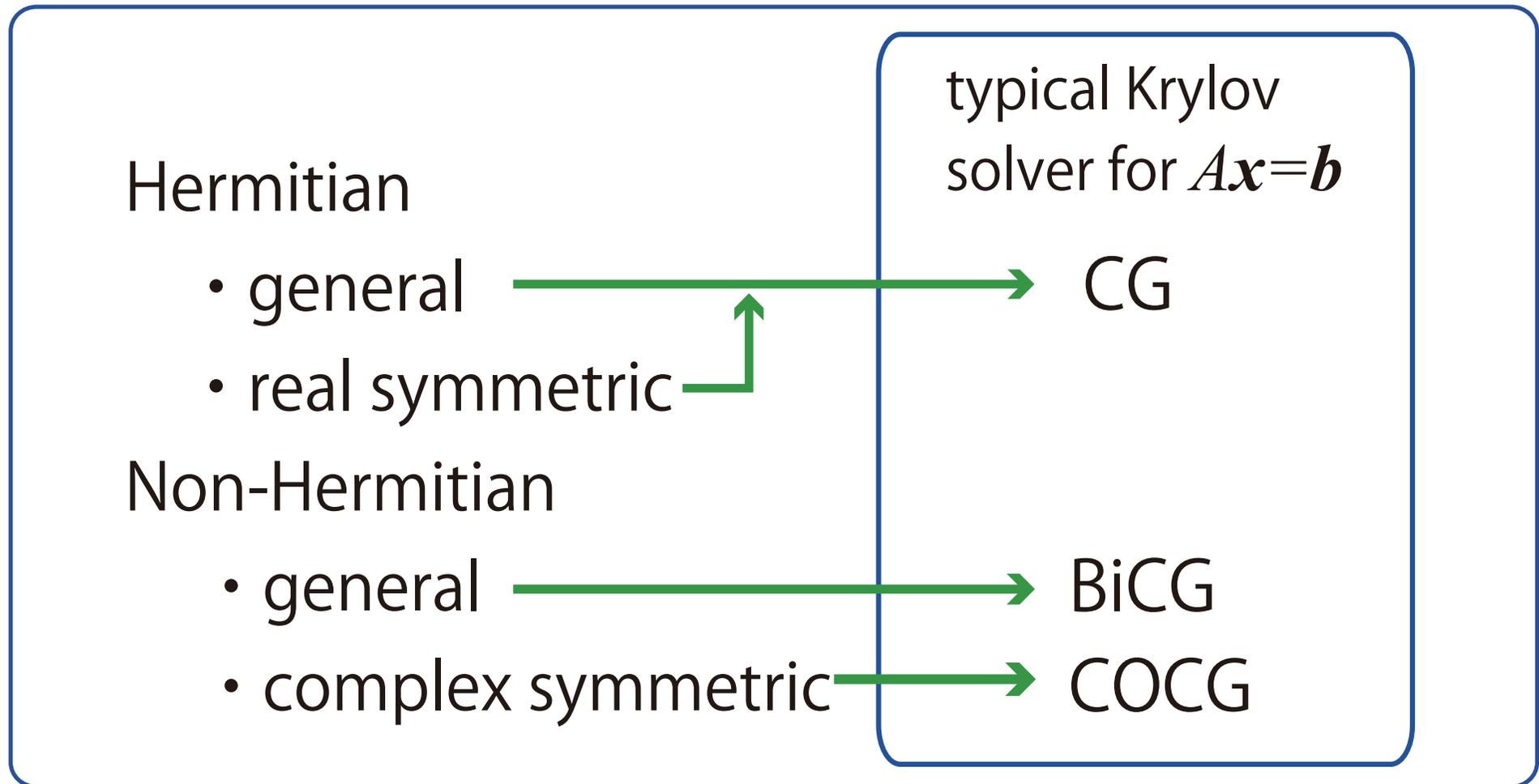


tri-diagonal



diagonal

2. 行列の性質による解法の分類



cf. 有名な固有値問題解法の教科書 (通称「Template」, Webでも公開)

Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems (2000)

Edited by Z. Bai, J. Demmel, J. Dongarra, A. Ruhe, and H. van der Vorst

<http://web.eecs.utk.edu/~dongarra/etemplates/>

2. 行列の性質による解法の分類

Herm

「物理との接点」としての問題設定

→「数学的には特殊だが、物理的には汎用」な問題

例：電子状態計算に現れる一般化固有値問題

$$H\mathbf{y}_k = \varepsilon_k S\mathbf{y}_k \quad (S \approx I)$$

Non-

他にも、帯行列・ブロックn重対角行列、など。

• general

BICG

• complex symmetric

COCG

cf. 有名な固有値問題解法の教科書 (通称「Template」, Webでも公開)

Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems (2000)

Edited by Z. Bai, J. Demmel, J. Dongarra, A. Ruhe, and H. van der Vorst

<http://web.eecs.utk.edu/~dongarra/etemplates/>

3. 行列サイズの種類: 大規模・中規模・小規模

→ 中小規模問題では、
並列化による加速が困難

サイズMでの分類 (密行列ソルバー)

(a) 大規模: $M=10^5$ or larger

(b) 中規模: $M=10^4$

(c) 小規模: $M=10^3$ or smaller

実行列のデータ容量

(a) $M=10$ 万だと

$8B \times 100K \times 100K = 80GB$

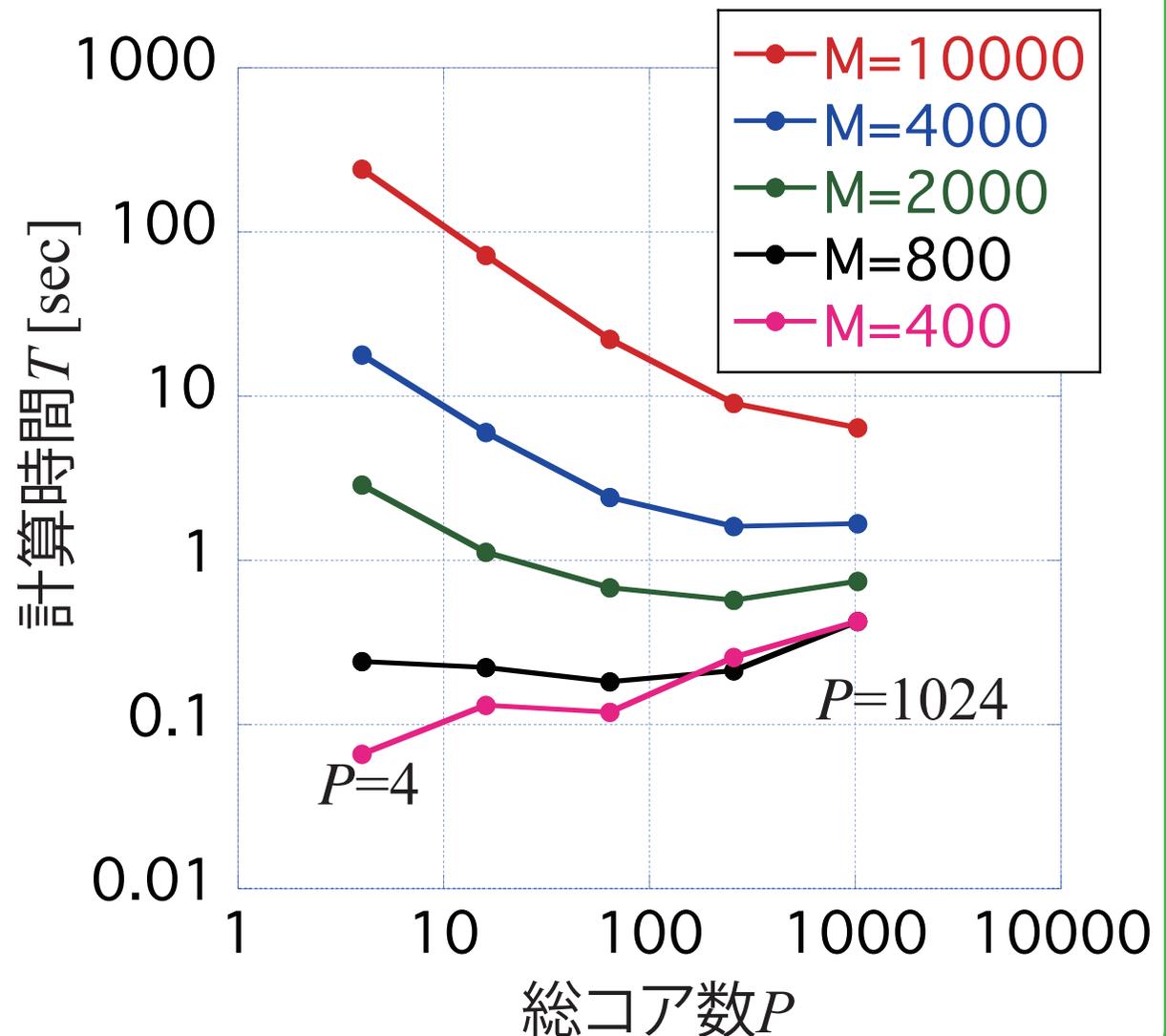
(b) $M=1$ 万だと

$8B \times 10K \times 10K = 0.8GB$ (約1GB)

(c) $M=1000$ だと

$8B \times 1K \times 1K = 8 MB$

例: 中小規模行列の全固有対計算(*)



(*) Intel Xeon (SGI Altix @ISSP), 実対称, ScaLAPACK

4. ワークフロー(実装)の重要性

実際の大規模計算では、ボトルネックの要因は多様。

- (a) 演算コスト, (b) 通信コスト, (c) メモリコスト, (d) ファイルI/Oコスト
- (e) 人的コスト(手間)

→ Application-Algorithm-Architecture co-design

→ 最適性の確保のためには、複数のワークフローを用意する必要がある(面倒!!)

→ 展望: ミドルウェアとしての「計算エンジン」の共有(?)

注: アーキテクチャのトレンド

→ 演算性能を重視する(メモリ性能が相対的に軽視される)

→ 実アプリでは、省メモリ型ワークフロー、が重要に(?)

応用から見た行列ソルバーのチュートリアル的分類

まとめ

1. 解法の基本的戦略

- Krylov部分空間への「射影」
- 全線形空間の「変換」

2. 行列の性質による解法のカテゴリ

3. 行列サイズのカテゴリ: 大規模・中規模・小規模

→ 中規模 ~ 1万次元

→ 中小規模では並列化が困難

4. ワークフロー(実装)の重要性

→ 展望: ミドルウェア的汎用「計算エンジン」開発(?)

「物理と数理の接点」としてのトピック

1. 新しい数学定理が、様々な物理学分野に現れる
→共線残差定理(2003)
2. 物理の目で、アルゴリズムを比較する
→残差の単調減少性
3. 物理の目で、数理アルゴリズムを作る
→物理的保存則を満たすクリロフ空間理論

「物理と数理の接点」としてのトピック

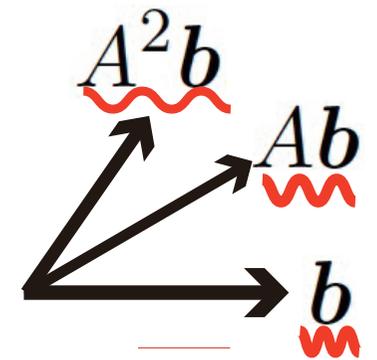
- ① 新しい数学定理が、様々な物理学分野に現れる
→ 共線残差定理(2003)
2. 物理の目で、アルゴリズムを比較する
→ 残差の単調減少性
3. 物理の目で、数理アルゴリズムを作る
→ 物理的保存則を満たすクリロフ空間理論

Shift invariance of Krylov subspace

$$K_n(A + \sigma I; \mathbf{b}) = K_n(A; \mathbf{b}) \equiv \text{span} \{ \mathbf{b}, A\mathbf{b}, A^2\mathbf{b}, \dots, A^{n-1}\mathbf{b} \}$$

ex. $n = 3$

$$\begin{aligned} (A + \sigma I)^0 \mathbf{b} &= \mathbf{b} \\ (A + \sigma I)^1 \mathbf{b} &= \sigma \mathbf{b} + A\mathbf{b} \\ (A + \sigma I)^2 \mathbf{b} &= \sigma^2 \mathbf{b} + 2\sigma A\mathbf{b} + A^2\mathbf{b} \end{aligned}$$



Novel linear algebraic algorithms

- [1] Teng et al., PRB 83, 165103 (2011); [2] Hoshi et al, JPCM 24, 165502 (2012).
 [3] Sogabe JCP 231, 5669 (2012); [4] Yamashita et al., Trans. JSIAM 21, 241 (2011).

→ Iterative (Krylov subspace) solvers for generalized shifted linear equation

$$\underbrace{(H - zS)}_{\text{non-hermitian}} x = b$$

Mathematical principles	$S \neq I$	$S = I^*$
Gerlerkin Principle	gLanczos, gArnoldi, mArnodi, Arnoldi (M;W;G)	subs. diag.
Collinear Residual	gsCOCG, gsQMR	sCOCG, sQMR

*Takayama *et al.*, JPSJ73, 126 (2002); Sogabe *et al.* PRB 73, 165108(2006); Sogabe *et al.* ETNA31, 126 (2012)

共線残差定理

数学と物理学の接点～シフト型クリロフ空間理論において～

1, 新しいアルゴリズムが、様々な物理学分野に現れる

共線残差定理

A. Frommer, Computing 70, 87 (2003)

→シフト型線形方程式に対して、以下の性質をもつ、クリロフ空間アルゴリズムが構成できる

$\mathbf{x}_n^{(\sigma)}$: n 番目の反復における解ベクトル

Original ($\sigma=0$) 方程式の残差ベクトル

$$\mathbf{r}_n^{(0)} \equiv A\mathbf{x}_n^{(0)} - \mathbf{b} \quad (1)$$

Shift ($\sigma \neq 0$) 方程式の残差ベクトル

$$\mathbf{r}_n^{(\sigma)} \equiv (A + \sigma I)\mathbf{x}_n^{(\sigma)} - \mathbf{b} \quad (2)$$

レビュー(応用まで含めた):

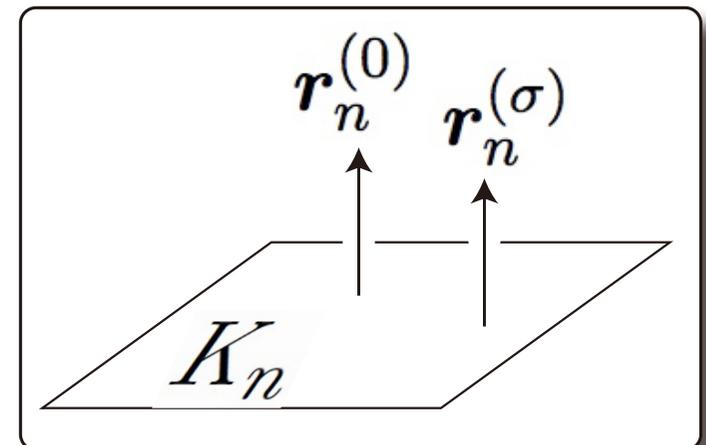
曾我部, 張, 応用数理 19,
163 (2009).

共線残差性

(Original方程式とShift方程式の間に)

$$\mathbf{r}_n^{(\sigma)} = \frac{1}{\pi_n^{(\sigma)}} \mathbf{r}_n^{(0)} \quad (3)$$

$\pi_n^{(\sigma)}$: スカラー



数学と物理学の接点～シフト型クリロフ空間理論において～

1, 新しいアルゴリズムが、様々な物理学分野に現れる

共線残差定理

A. Frommer, Computing 70, 87 (2003)

→シフト型線形方程式に対して、以下の性質をもつ、クリロフ空間アルゴリズムが構成できる

$\mathbf{x}_n^{(\sigma)}$: n 番目の反復における解ベクトル

Original ($\sigma=0$) 方程式の残差ベクトル

$$\mathbf{r}_n^{(0)} \equiv A\mathbf{x}_n^{(0)} - \mathbf{b} \quad (1)$$

Shift ($\sigma \neq 0$) 方程式の残差ベクトル

$$\mathbf{r}_n^{(\sigma)} \equiv (A + \sigma I)\mathbf{x}_n^{(\sigma)} - \mathbf{b} \quad (2)$$

共線残差性

(Original方程式とShift方程式の間に)

$$\mathbf{r}_n^{(\sigma)} = \frac{1}{\pi_n^{(\sigma)}} \mathbf{r}_n^{(0)} \quad (3)$$

$\pi_n^{(\sigma)}$: スカラー

$\mathbf{r}_n^{(0)}$ $\mathbf{r}_n^{(\sigma)}$

レビュー(応用まで含めた):
曾我部, 張, 応用数理 19,
163 (2009).

式(2)のかわりに、式(3)を使う。

→Shift方程式においては、行列-ベクトル積が、
スカラーベクトル積になる。

→計算量の劇的減少。

Shifted linear equations in physics with Krylov subspace solvers and the collinear residual theorem

- (1) (a) **A. Frommer, Computing 70, 87 (2003)** [Original paper of the collinear residual theorem]
(b) J. C.R. Bloch, T. Breu, A. Frommer, S. Heybrock, K. Schafer, T. Wettig, Comp. Phys. Comm. 181, 1378 (2010)
→ **QCD**
- (2) R. Takayama, T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara, PRB 73, 165108 (2006), and others
→ **large-scale electronic structure calculation** [present work]
- (3) S. Yamamoto, T. Fujiwara, and Y. Hatsugai, PRB 76, 165114 (2007);
S. Yamamoto, T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang and T. Fujiwara, JPSJ 77,114713 (2008).
→ **many-body electron theory** [full-CI type calculation, multi-orbital extended Hubbard model, LaSrNiO]
- (4) T. Mizusaki, K Kaneko, M. Honma, T. Sakurai, PRC 82, 024310 (2010)
→ **Shell-model calculation**
- (5) F. Giustino, M. L. Cohen, and S. G. Louie, PRB 81, 115105 (2010)
→ **GW method with the self-consistent Sternheimer equation**
- (6) 篠原康、二村保徳、矢花一浩、櫻井鉄也、日本物理学会, 2012年3月.
→ **TDDFT(linear response)**

「物理と数理の接点」としてのトピック

1. 新しい数学定理が、様々な物理学分野に現れる
→ 共線残差定理(2003)
2. 物理の目で、アルゴリズムを比較する
→ 残差の単調減少性
3. 物理の目で、数理アルゴリズムを作る
→ 物理的保存則を満たすクリロフ空間理論

Novel linear algebraic algorithms

- [1] Teng et al., PRB 83, 165103 (2011); [2] Hoshi et al, JPCM 24, 165502 (2012).
 [3] Sogabe JCP 231, 5669 (2012); [4] Yamashita et al., Trans. JSIAM 21, 241 (2011).

→ Iterative (Krylov subspace) solvers for generalized shifted linear equation

$$\underbrace{(H - zS)}_{\text{non-hermitian}} x = b$$

Mathematical principles	$S \neq I$	$S = I^*$
Gerlerkin Principle	gLanczos, gArnoldi, mArnodi, Arnoldi (M;W;G)	subs. diag.
Collinear Residual	gsCOCG, gsQMR	sCOCG, sQMR

*Takayama *et al.*, JPSJ73, 1519 (2004); Takayan (2006); Sogabe et al. ETNA31, 126 (2008)

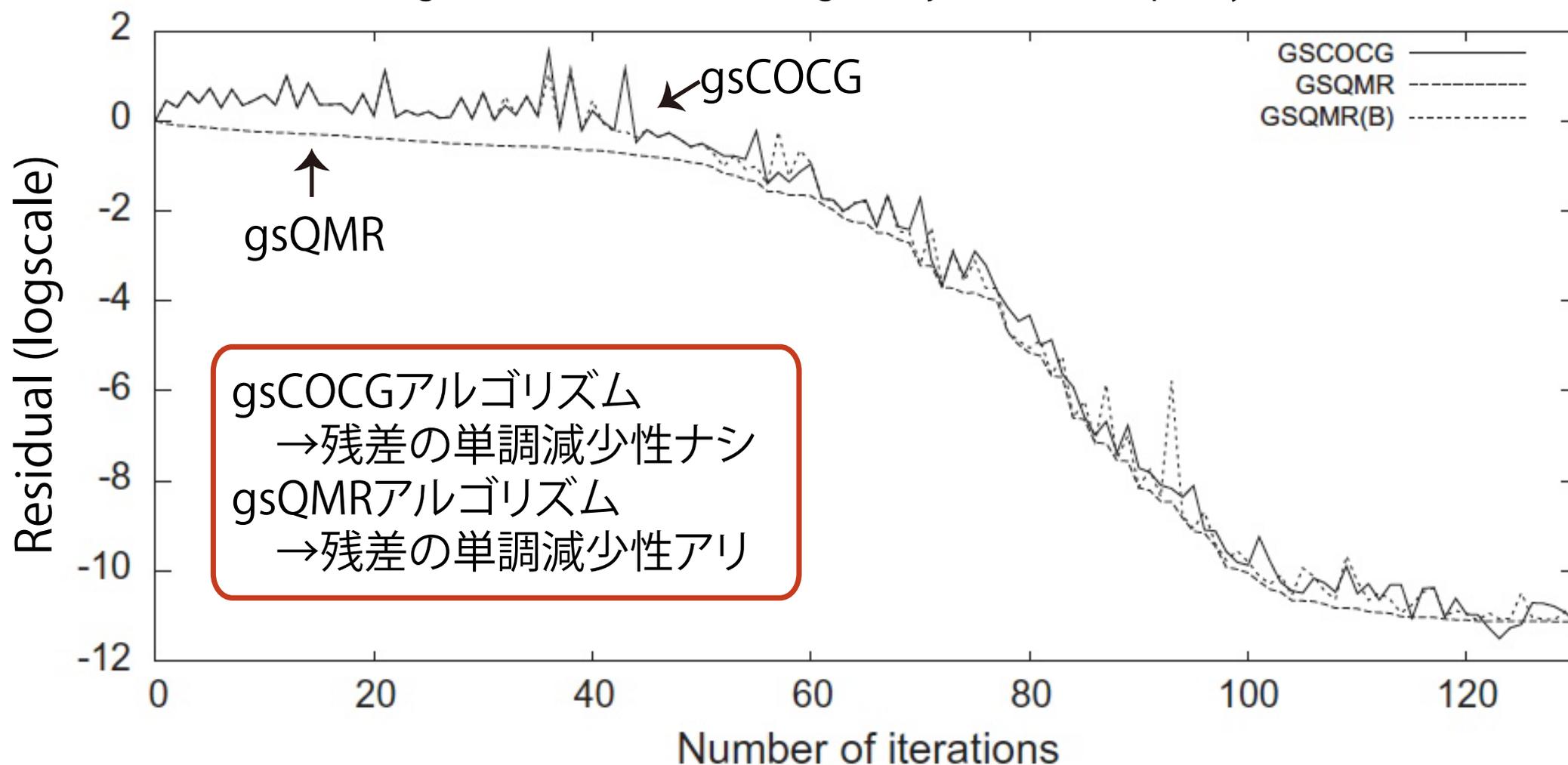
物理の目で、比較する

数学と物理学の接点～シフト型クリロフ空間理論において～

3, 物理の目で、アルゴリズムを比較する

反復計算における方程式残差に、単調減少性があるか？

T. Sogabe, T. Hoshi, S.-L. Zhang, T. Fujiwara, J. Comp. Phys. 231, 5669 (2012)



「物理と数理の接点」としてのトピック

1. 新しい数学定理が、様々な物理学分野に現れる
→共線残差定理(2003)
2. 物理の目で、アルゴリズムを比較する
→残差の単調減少性
3. 物理の目で、数理アルゴリズムを作る
→物理的保存則を満たすクリロフ空間理論

Novel linear algebraic algorithms

- [1] Teng et al., PRB 83, 165103 (2011); [2] Hoshi et al, JPCM 24, 165502 (2012).
 [3] Sogabe JCP 231, 5669 (2012); [4] Yamashita et al., Trans. JSIAM 21, 241 (2011).

→ Iterative (Krylov subspace) solvers for generalized shifted linear equation

$$\underbrace{(H - zS)}_{\text{non-hermitian}} x = b$$

Mathematical principles	$S \neq I$	$S = I^*$
Galerkin Principle	gLanczos, gArnoldi, <u>mArnodi</u> , Arnoldi (M;W;G)	subs. diag.
Collinear Residual	gsCOCG, gsQMR	sCOCG, sQMR

*Takayama *et al.*, JPSJ73, 1519 (2004); Takayama et al. PRB 73, 165108(2006);
 Sogabe et al. ETNA31, 126 (2008)

Overview of multiple Arnoldi method (1/2)

Original problem : $H\mathbf{y} = \lambda S\mathbf{y}$ (generalized eigen-value equation) (1)

H, S : real-symmetric, S : positive definite

Def.: multiple Krylov subspace

$$\mathcal{L} \equiv K_p(H; \mathbf{b}) \oplus K_q(H; S^{-1}\mathbf{b}) \quad (2)$$

$$= \text{span}\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_\nu\} \quad (\mathbf{u}_i^T S \mathbf{u}_j = \delta_{i,j}) \quad (\nu \equiv p + q)$$

Def.: subspace eigen pair : $(\varepsilon_\alpha, \mathbf{v}_\alpha)$ (3)

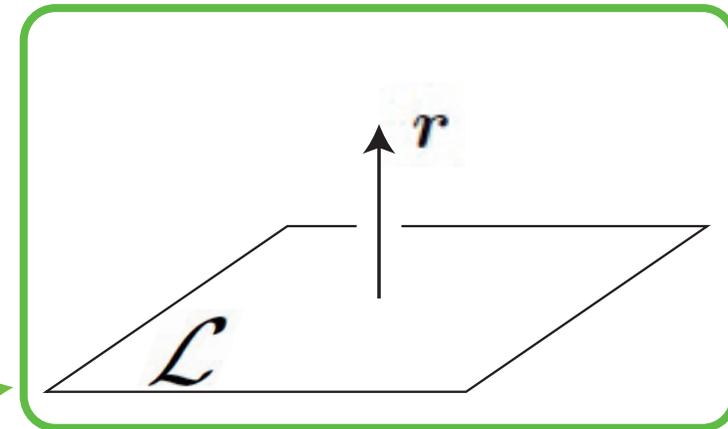
$$(\mathbf{v}_\alpha \in \mathcal{L}, \alpha := 1, 2, \dots, p + q)$$

Def.: residual vector: $\mathbf{r}_\alpha \equiv (H - \varepsilon_\alpha S)\mathbf{v}_\alpha$ (4)

Galerkin principle : $\mathbf{r} \perp \mathcal{L}$ (5)

so as to determine the subspace eigen pair of $(\varepsilon_\alpha, \mathbf{v}_\alpha)$

→ standard eigen-value equation within the subspace



Overview of multiple Arnoldi method (1/2)

Original problem: $H\mathbf{y} = \lambda S\mathbf{y}$ (generalized eigen-value equation) (1)

H, S : real-symmetric, S : positive definite

Def.: multiple Krylov subspace

$$\mathcal{L} \equiv K_p(H; \mathbf{b}) \oplus K_q(H; S^{-1}\mathbf{b}) \quad (2)$$

$$= \text{span}\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots\}$$

Def.: subspace eigen pair: $(\varepsilon_\alpha,$

$$(\mathbf{v}_\alpha \in \mathcal{L}, \alpha$$

‘Dual’ vectors of \mathbf{b} and $\tilde{\mathbf{b}} \equiv S^{-1}\mathbf{b}$

→ never ‘S’-orthogonal

$$\mathbf{b}^T S \tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{b}^T S S^{-1} \mathbf{b} = \mathbf{b}^T \mathbf{b} \neq 0$$

Def.: residual vector: $\mathbf{r}_\alpha \equiv (H - \varepsilon_\alpha S)\mathbf{v}_\alpha$ (4)

Galerkin principle: $\mathbf{r} \perp \mathcal{L}$ (5)

so as to determine the subspace eigen pair of $(\varepsilon_\alpha, \mathbf{v}_\alpha)$

→ standard eigen-value equation within the subspace



\mathcal{L}

Overview of multiple Arnoldi method (2/2)

Why multiple subspace? $\mathcal{L} \equiv K_p(H; \mathbf{b}) \oplus K_q(H; S^{-1}\mathbf{b}) \quad (\nu \equiv p + q)$
 $= \text{span}\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_\nu\} \quad (\mathbf{u}_i^T S \mathbf{u}_j = \delta_{i,j})$

→ Exact reproduction of physical conservation laws within the subspace

Def.: fully-filled limit density matrix (FFL-DM)

$$\Omega \equiv \sum_{\alpha}^{\nu} \mathbf{u}_{\alpha} \mathbf{u}_{\alpha}^T \quad (6)$$

Def.: Projected physical quantity in the FFL: $\mathbf{b}^T \Omega X \mathbf{b} \quad (7)$

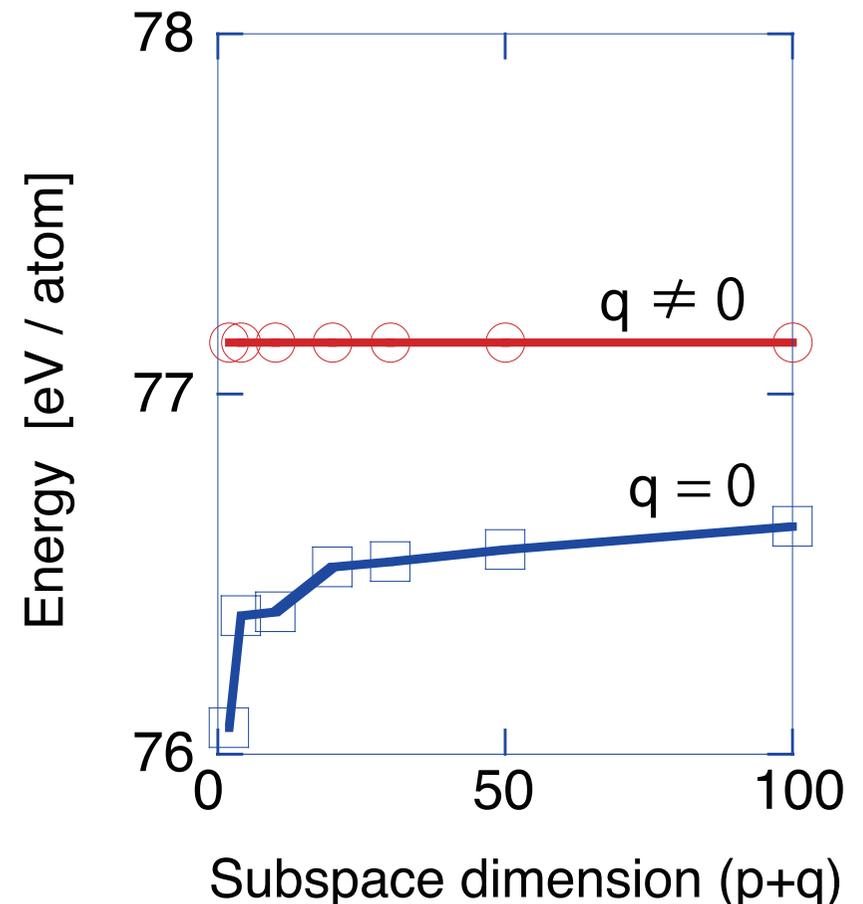
X : arbitrary real-symmetric matrix
(ex. $X = H$: the case of energy)

Theorem:

If $q \neq 0$, then $\mathbf{b}^T \Omega X \mathbf{b} = (\text{exact}) \quad (8)$

Note: $\Omega \neq (\text{exact}) \quad (9)$

Ex. $\mathbf{b}^T \Omega X \mathbf{b}$ with $X = H$



Overview of multiple Arnoldi method (extra explanation)

Def.: subspace

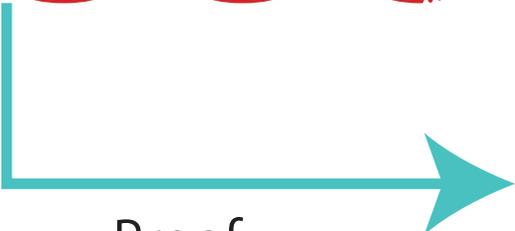
$$\begin{aligned}\mathcal{L} &\equiv K_p(H; \mathbf{b}) \oplus K_q(H; S^{-1}\mathbf{b}) \\ &= \text{span}\{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_\nu\} \\ &\quad (\mathbf{u}_i^T S \mathbf{u}_j = \delta_{i,j})\end{aligned}$$

Def.: Density matrix in the FFL

$$\Omega \equiv \sum_{\alpha}^{\nu} \mathbf{u}_{\alpha} \mathbf{u}_{\alpha}^T$$

Theorem for physical quantity:

If $q \neq 0$, the $\mathbf{b}^T \Omega X \mathbf{b} = (\text{exact})$

Proof 

A 'projection' theorem:

$$\Omega S \gamma = \gamma \quad (10)$$

for any vector in the subspace

$$(\gamma \in \mathcal{L})$$

Note: $\Omega = S^{-1}$ (11)

in the exact solution.

If $q \neq 0$, then $S^{-1}\mathbf{b} \in \mathcal{L}$

and the 'projection' theorem of (10) gives

$$\Omega S(S^{-1}\mathbf{b}) = (S^{-1}\mathbf{b}) \quad (12)$$

$$\text{or} \quad \Omega \mathbf{b} = S^{-1}\mathbf{b} \quad (13)$$

Therefore

$$\mathbf{b}^T \Omega X \mathbf{b} = \mathbf{b}^T S^{-1} X \mathbf{b} \quad (\text{exact}) \quad (14)$$

「物理と数理の接点」としてのトピック

まとめ

1. 新しい数学定理が、様々な物理学分野に現れる
→ 共線残差定理(2003)
2. 物理の目で、アルゴリズムを比較する
→ 残差の単調減少性
3. 物理の目で、数理アルゴリズムを作る
→ 物理的保存則を満たすクリロフ空間理論

現状と展望

1. 物理(として)
2. 物理と数理・HPCの接点(として)

現状と展望

物理

- ・「京」での100ナノスケール(1億原子)電子状態計算
- 展望 応用(当座):有機ELなどのアモルファス状高分子デバイス
(基礎的物質:PPV, Poly-fluorene)
- 理論:電子物性への理論拡張

物理と数理・HPCの接点

- (i) 数理的問題
- (ii) コード共有
 - ミドルウェア的汎用「計算エンジン」・擬似(ミニ)アプリの開発
 - ひな形:http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/eigen_test/
- (iii) 問題(データ)共有
 - 疎行列データベース(<http://www.elses.jp/matrix/>)
- (iv) コミュニティ形成
 - 国際会議EPASA2014 (ペタスケールの固有値問題, 筑波, 2014年3月7-9日)
 - <http://h4es.cs.tsukuba.ac.jp/epasa2014/> (海外招待講演者:16名)

現状と展望

物理

- ・「京」での100ナノスケール(1億原子)電子状態計算
- 展望 応用(当座):有機ELなどのアモルファス状高分子デバイス
(基礎的物質:PPV, Poly-fluorene)
- 理論:電子物性への理論拡張

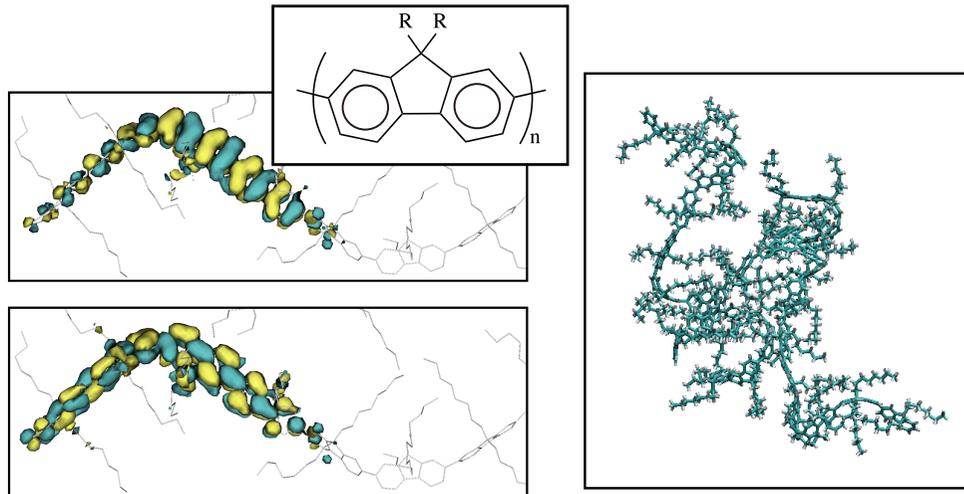


物理と数理・HPCの接点

- (i) 数理的問題
- (ii) コード共有
→ミドルウェア的汎用
→ひな形:<http://www>
- (iii) 問題(データ)共有
→疎行列データベース
- (iv) コミュニティ形成
→国際会議EPASA20

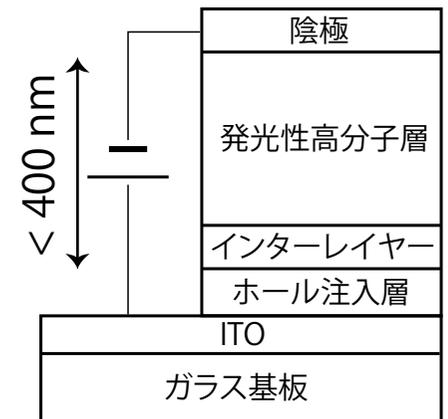
<http://h4es.cs.tsukuba.ac.jp/epasa2014/>

アモルファス状共役高分子
(超巨大 π 電子ネットワーク)
→予備的結果(*)



(*)T. Hoshi, K. Yamazaki, Y. Akiyama, in press
<http://arxiv.org/abs/1307.3218>

デバイス構造例



現状と展望

物理

- ・「京」での100ナノスケール
- 展望 応用(当座):
()
- 理論:電子物

1. 内部固有対問題

→フェルミレベル付近の詳細な電子状態

→最近の提案:「level-given型」問題への複合数理原理ソルバー
(シルベスタ慣性定理 + Arnoldi(M, W, G)法)

Lee, Miyata, Sogabe, Hoshi, S.-L. Ziang, JJIAM 30, 625 (2013);
EASIAM, Indonesia, June. 2013.

2. 非線形シフト型方程式: $(zS - H - \Sigma(z))x = b$

→量子電気伝導(非平衡グリーン関数)

→予備的研究:

Shinaoka, Hoshi, Fujiwara, J. Phys. Soc. Jpn. 77,114712 (2008)

3. 中小規模問題の高速計算アルゴリズム

→例:山本有作(電通大)らによるブロックヤコビ法

Takahashi, Hirota, Yamamoto, ALGORITHMY 2012, 151(2012).

工藤, 高橋, 深谷, 山本, 日本応用数理学会, 2013年9月

(i) 数理的問題

(ii) コード共有

→ミドルウェア的汎用

→ひな形:<http://v>

(iii) 問題(データ)共有

→疎行列データベース

(iv) コミュニティ形成

→国際会議EPASA2014 (ペタスケールの固有値問題, 筑波, 2014年3月7-9日)

<http://h4es.cs.tsukuba.ac.jp/epasa2014/> (海外招待講演者:16名)

内部固有対問題の分類(実固有値問題)

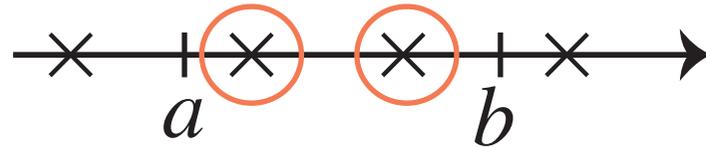
(1) Point-given型(P型)

→与えられた点 a に対して、
近傍の固有値($\lambda \doteq a$)



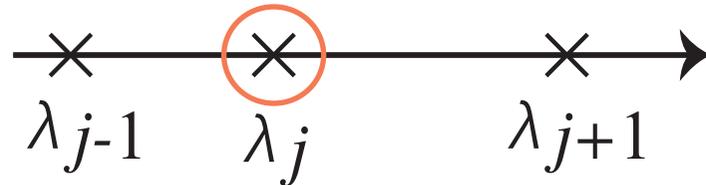
(2) Range-given型(R型)

→与えられた区間 $[a, b]$ に対して、
区間内の固有値($a < \lambda < b$)



(3) Level-given型(L型)(*)

→与えられた準位 j ($1 < j < M$)
に対して、 j 番目の固有値 λ_j



(*)「level-given型」問題への複合数理原理ソルバー (シルベスタ慣性定理+Arnoldi(M, W, G)法)
Lee, Miyata, Sogabe, Hoshi, S.-L. Ziang, JIAM 30, 625 (2013); EASIAM, Indonesia, June. 2013.

現状と展望

物理

- ・「京」での100ナノスケール
- 展望 応用(当座):
()
- 理論:電子物

1. 内部固有対問題

→フェルミレベル付近の詳細な電子状態

→最近の提案:「level-given型」問題への複合数理原理ソルバー
(シルベスタ慣性定理 + Arnoldi(M, W, G)法)

Lee, Miyata, Sogabe, Hoshi, S.-L. Ziang, JJIAM 30, 625 (2013);
EASIAM, Indonesia, June. 2013.

2. 非線形シフト型方程式: $(zS - H - \Sigma(z))x = b$

→量子電気伝導(非平衡グリーン関数)

→予備的研究:

Shinaoka, Hoshi, Fujiwara, J. Phys. Soc. Jpn. 77,114712 (2008)

3. 中小規模問題の高速計算アルゴリズム

→例:山本有作(電通大)らによるブロックヤコビ法

Takahashi, Hirota, Yamamoto, ALGORITHMY 2012, 151(2012).

工藤, 高橋, 深谷, 山本, 日本応用数理学会, 2013年9月

(i) 数理的問題

(ii) コード共有

→ミドルウェア的汎用

→ひな形:<http://v>

(iii) 問題(データ)共有

→疎行列データベース

(iv) コミュニティ形成

→国際会議EPASA2014 (ペタスケールの固有値問題, 筑波, 2014年3月7-9日)

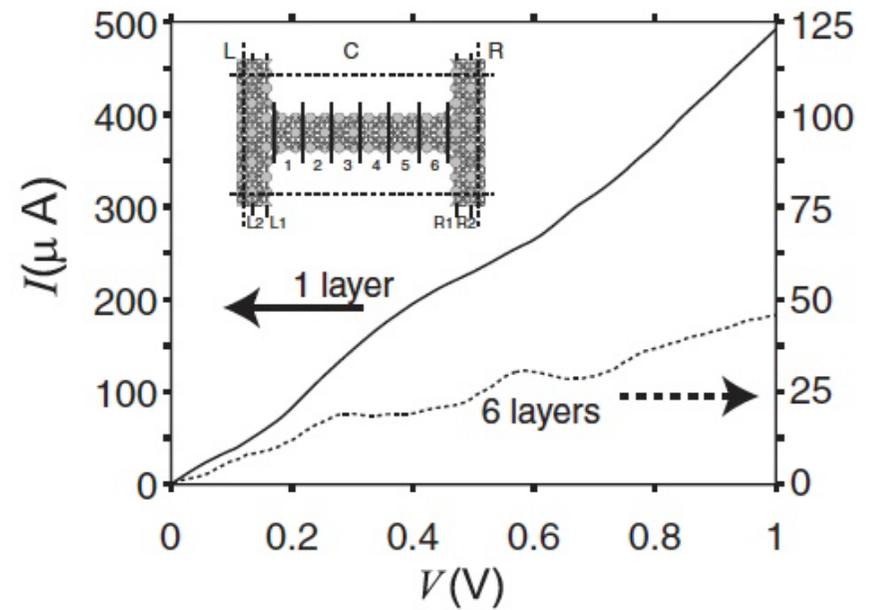
<http://h4es.cs.tsukuba.ac.jp/epasa2014/> (海外招待講演者:16名)

現状と展望

物理

•「京」での100ナノスケール
→展望 応用(当座):
理論:電子物

1. 内部固有対問題
→フェルミレベル付近の
→最近の提案:「level-g
(シルベスタ慣性定理
Lee, Miyata, Sogabe
EASIAM, Indonesia, J



物理と数理・HPCの接点

(i) 数理的問題 →

(ii) コード共有

→ミドルウェア的派

→ひな形:<http://v>

(iii) 問題(データ)共有

→疎行列データベ

(iv) コミュニティ形成

→国際会議EPASA2014 (ペタスケールの固有値問題, 筑波, 2014年3月7-9日)

<http://h4es.cs.tsukuba.ac.jp/epasa2014/>

(海外招待講演者:16名)

2. 非線形シフト型方程式: $(zS - H - \Sigma(z))x = b$

→量子電気伝導(非平衡グリーン関数)

→予備的研究:

Shinaoka, Hoshi, Fujiwara, J. Phys. Soc. Jpn. 77,114712 (2008)

3. 中小規模問題の高速計算アルゴリズム

→例:山本有作(電通大)らによるブロックヤコビ法

Takahashi, Hirota, Yamamoto, ALGORITHMY 2012, 151(2012).

工藤, 高橋, 深谷, 山本, 日本応用数理学会, 2013年9月

現状と展望

物理

- ・「京」での100ナノスケール(1億原子)電子状態計算
- 展望 応用(当座):有機ELなどのアモルファス状高分子デバイス
(基礎的物質:PPV, Poly-fluorene)
- 理論:電子物性への理論拡張

物理と数理・HPCの接点

- (i) 数理的問題
- (ii) コード共有
 - ミドルウェア的汎用「計算エンジン」・擬似(ミニ)アプリの開発
 - ひな形:http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/eigen_test/
- (iii) 問題(データ)共有
 - 疎行列データベース(<http://www.elses.jp/matrix/>)
- (iv) コミュニティ形成
 - 国際会議EPASA2014 (ペタスケールの固有値問題, 筑波, 2014年3月7-9日)
 - <http://h4es.cs.tsukuba.ac.jp/epasa2014/> (海外招待講演者:16名)

Density matrix from the Green's function

The Green's function

$$G(z) \equiv \sum_{\alpha}^{\nu} \frac{\mathbf{v}_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}^{\text{T}}}{z - \varepsilon_{\alpha}}$$

Imaginary part of the Greens' function

$$\begin{aligned} Q(\varepsilon) &\equiv \frac{-1}{\pi} \text{Im} G(\varepsilon + i0) \\ &= \sum_{\alpha}^{\nu} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\alpha}) \mathbf{v}_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}^{\text{T}} \end{aligned}$$

One-body density matrix

$$\begin{aligned} \rho &= \int_{-\infty}^{\infty} f(\varepsilon) Q(\varepsilon) d\varepsilon \\ &= \sum_{\alpha}^{\nu} f(\varepsilon_{\alpha}) \mathbf{v}_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha}^{\text{T}} \end{aligned}$$