

# 数理情報科学と物質科学の連携

星健夫(鳥取大学)

- (1) 数理的視点により問題共通化
- (2) 大規模シミュレーションと大規模データ解析
- (3) 連携中核としてのコード共有

# 「数理情報科学と物質科学の連携」(星)

## (1) 数理的視点による問題共有(下記は例)

### (1-a) 非エルミート行列の大規模計算

例: D. Rocca, Z. Bai, R.-C. Li and G. Galli,  
J. Chem. Phys, 136, 034111 (2012)  
(TDDFT・BSE由来)

### (1-b) 時間方向の加速

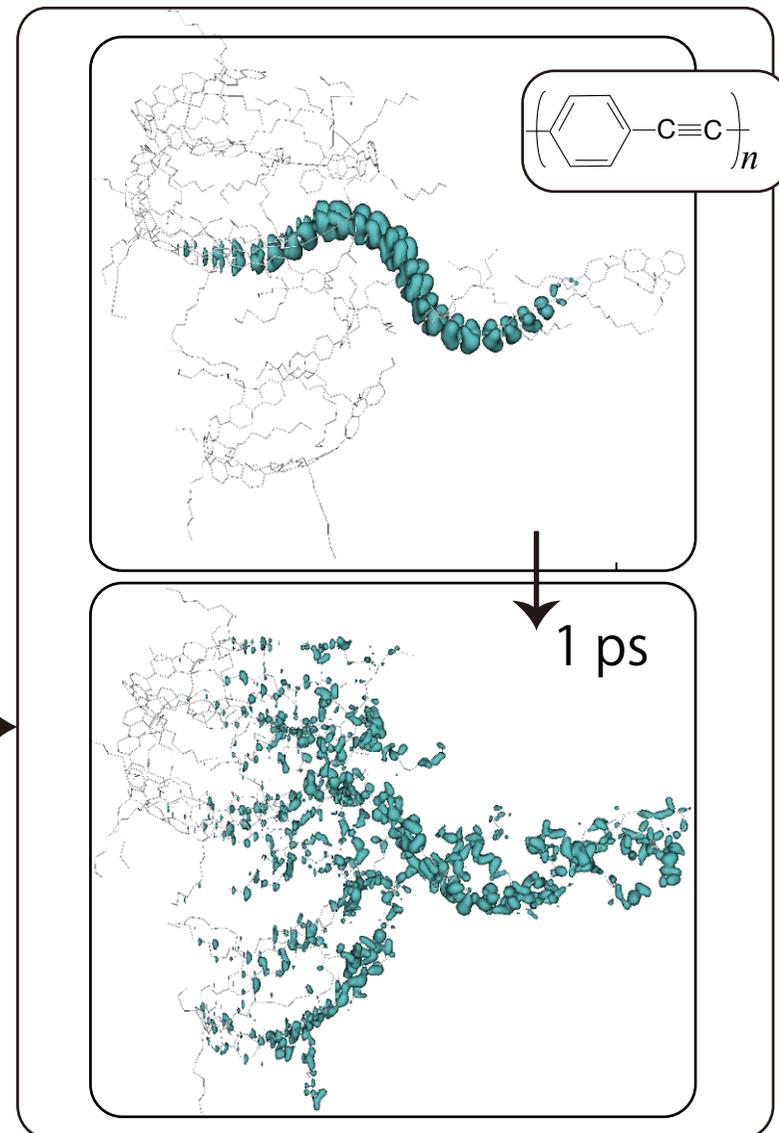
例: J. C. Butcher, Y. Miyatake(宮武, 名大),  
<http://arxiv.org/abs/1505.02537>  
井町, 宮武, 星, 応用数学会, 2016年3月  
(数理構造保存型での並列化ODEソルバー)

動機: 有機高分子集合体での波束ダイナミクス  
→ シュレーディンガー型方程式

$$\partial_t \Psi = -iH\Psi$$

注: 関連研究会: 2015年11月電通大  
→ 他の話題: 津波、MD、超伝導、ピアノ、など  
(予算: 「数学連携プロジェクト」)

<https://sites.google.com/site/yusakuyamamotolab/home/yan-jiu-hui>

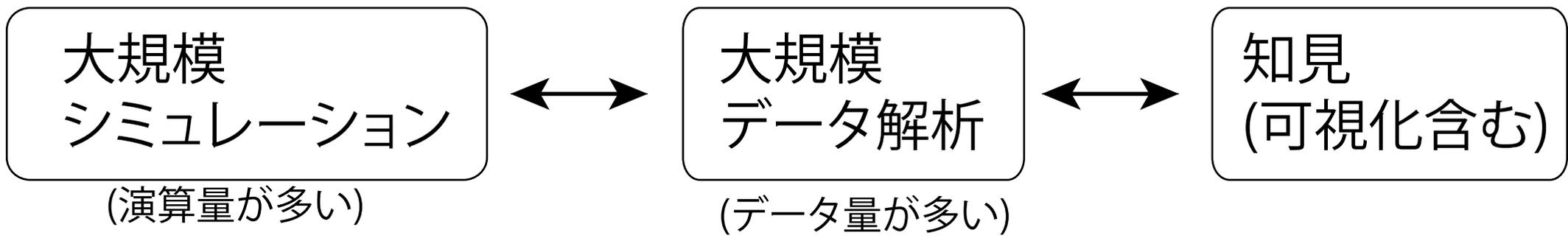


<http://arxiv.org/abs/1603.09616>

共同研究: 多田(東工大)、石田(住友化学)

# 「数理情報科学と物質科学の連携」

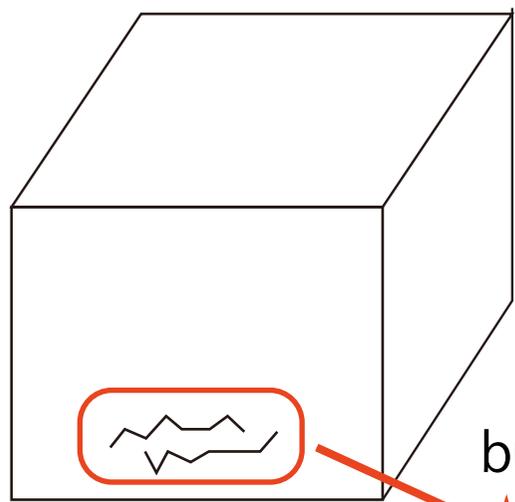
## (2) 大規模シミュレーションと大規模データ解析 (を、スパコン上でシームレスに)



例: 我々の大規模電子状態計算およびデータ解析(「京」上。解析は主に並列化Pythonコード) Hoshi et al., in prep.

1億原子系の有機高分子集合体計算

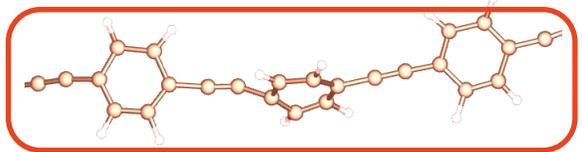
- (1) シミュレーション
- (2) グリーン関数にもとづく局所結合解析(ICOHP)
- (3) 粗視化系(Hamiltonian)の構成・固有値解析
- (4) bundle-like clusterの抽出



bundle-like cluster 抽出



close-up



2 nm

70 nm

# 「数理情報科学と物質科学の連携」(星)

## (3) 連携中核としてのコード共有

ISSPソフトウェア開発・高度化プロジェクト(H28年度)

「シフト型クリロフ理論を中核とした物性計算むけ大行列数理ソルバー」

提案者: 星、山地(東大)、他

汎用数理ソルバー  
(モジュール)



実アプリ

第一対象:  $H\Phi$  (最大行列次元: 約700億)  
高並列汎用量子格子模型ソルバー(\*) (山地ら)  
従来例:  $Na_2IrO_3$  (スピン液体候補物質) の比熱

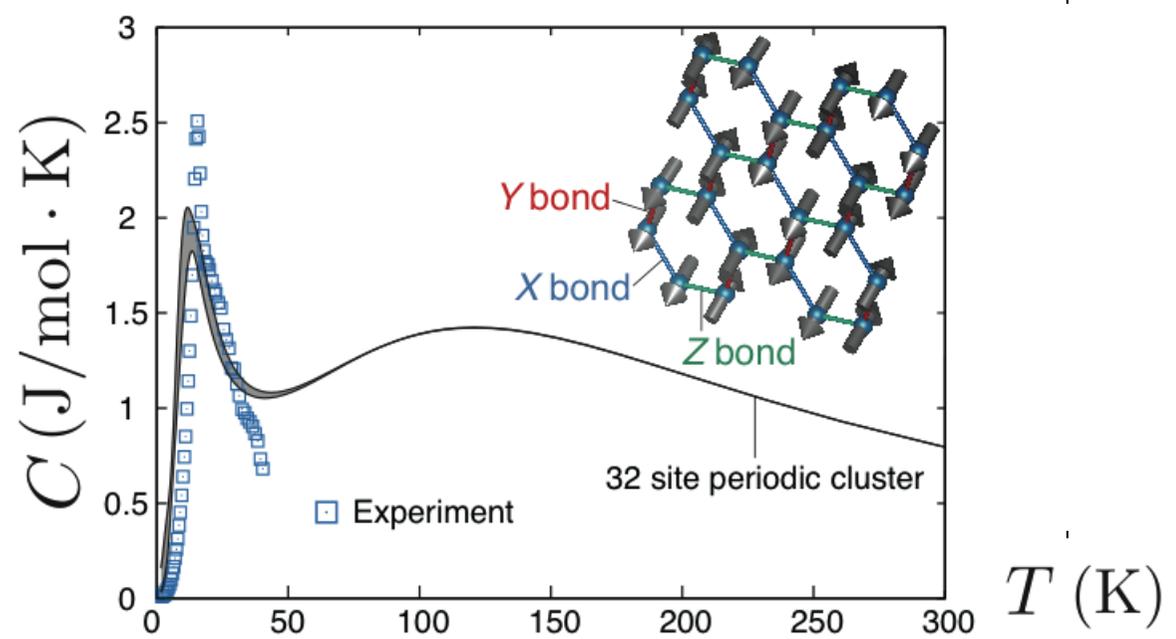
スペクトル型計算  
(数理: シフト型クリロフ理論,  
星, 曾我部(名大)ら)



接続

ミニアプリ

- 解法の評価
- 発展的な数理研究



(\*) <http://ma.cms-initiative.jp/ja/index/ja/listapps/hphi>

# 「数理情報科学と物質科学の連携」(星)

## (3) 連携中核としてのコード共有

ISSPソフトウェア開発・高度化プロジェクト(H28年度)

「シフト型カリキュラム理論を中心とした物性計算および大行列数値ソルバー」

提案

### コードの「カルチャーギャップ」

汎用数値  
(モデ)

物質科学研究者のコード  
例: fortran+MPI+OpenMP

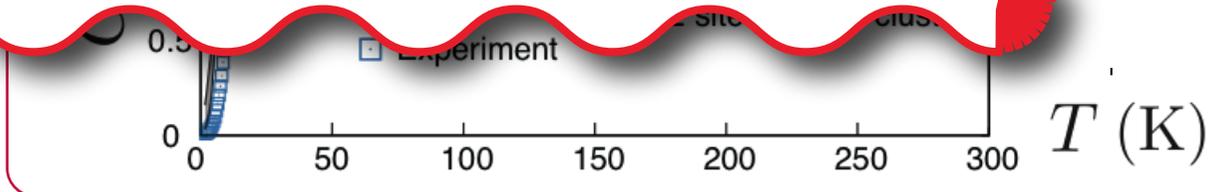
スペクトル  
(数理:シ  
星,島)

⇕  
数理科学研究者のコード  
例: MATLAB

接続  
ミニア

(意)  
ら)  
比熱

- 解法の
- 発展的な数理研究 ← 需要



(\*) <http://ma.cms-initiative.jp/ja/index/ja/listapps/hphi>

# 「数理情報科学と物質科学の連携」(星)

## まとめ

(1) 数理的視点により問題共通化

例:非エルミート大行列

例:時間方向の加速

(2) 大規模シミュレーションと大規模データ解析

→スパコン上でシームレスに

例:有機高分子集合体(1億原子)系の、粗視化解析

(3) 連携中核としてのコード共有

例:ISSPプログラム開発プロジェクト(H28)

数理:シフト型クリロフ、

物理:HΦ(多体問題コード)

→ミニアプリによる発展的数理研究へ

注:コードの「カルチャーギャップ」

数理は汎用であり、様々な分野で応用される

## シフト型クリロフ部分空間理論の物理への応用例

[1] **A. Frommer, Computing 70, 87 (2003)**

→ 基盤的数学定理「共線残差定理」 → **QCD**

[2] R. Takayama, T. Hoshi, T. Sogabe, S.-L. Zhang, and T. Fujiwara,  
PRB 73, 165108 (2006). → **大規模電子状態計算**(一体問題)

[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).  
→ **多体問題** [full-CI型計算, 多軌道拡張ハバードモデル,  $\text{La}_{3/2}\text{Sr}_{1/2}\text{NiO}_4$ ]  
→ Lanczos (基底状態) + シフト型クリロフ (excitation spectrum)

[4] S. Iwase, T. Hoshi, T. Ono, PRE 91, 063305 (2015)

→ **実空間グリッド型第一原理量子電気伝導計算(RSPACE)**

[5] F. Giustino, M. L. Cohen, S. G. Louie, PRB. 81, 115105 (2010)

→ **第一原理電子励起(GW)計算**

[6] T. Mizusaki, K Kaneko, M. Honma, T. Sakurai, PRC 82, 024310 (2010)

→ **Shell model 計算**

[7] Y. Futamura, H. Tadano and T. Sakurai, JSIAM Letters 2, 127 (2010).

→ **実空間グリッド型第一原理計算(RSDFT)**

数理的解説:  
曾我部, 張、  
応用数理19,  
163 (2009)