

神戸大学大学院システム情報学研究科「大規模シミュレーション総論II」

## 分野 2 <新物質・エネルギー創成>

---

藤堂眞治 <wistaria@issp.u-tokyo.ac.jp>

東京大学物性研究所

計算物質科学研究センター(CCMS) 神戸分室



講義資料: <http://todo.issp.u-tokyo.ac.jp/ja/lectures>

# CMSI神戸拠点 & CCMS神戸分室



AICS R501

常駐スタッフ：藤堂、北浦、坂下、Avramov  
山下、松下



理研計算科学研究機構 (AICS)



# CMSI神戸拠点 & CCMS神戸分室

---

- 配信講義

- CMSI計算科学技術特論、人材育成シンポジウム、他

- アプリケーション講習会

- 分野共通アプリケーション(FMO、xTAPP、ALPS他)、ツール(git)など

- アプリ高度化コンサルティング

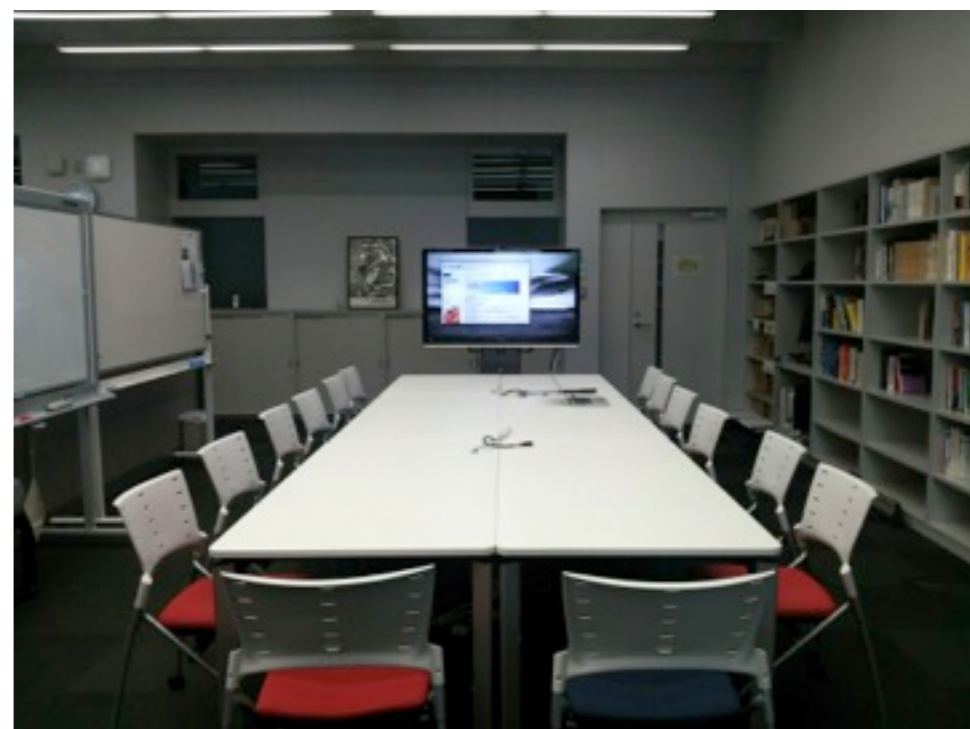
- コードの詳細情報を共有し、実際にその場でコードやプロファイラの結果を見ながら、コンサルティングを行う

- データポスト処理システム phi

- セミナー・研究会

- 「京」物性セミナー、他

- ミーティングスペース、ワークスペース



# HPCI戦略プログラム SPIRE：戦略5分野

## 1 予測する生命科学・医療 および創業基盤

ゲノム 全身  
タンパク質 細胞  
組織、臓器  
多階層の生命現象

The diagram illustrates the multi-layered nature of life phenomena, showing the flow from the genome (ゲノム) and proteins (タンパク質) to the whole body (全身), cells (細胞), and tissues/organs (組織、臓器). A circular arrow indicates a feedback loop between the genome/proteins and the whole body/cells.

## 2 新物質・エネルギーの創成

新物質・新現象  
-新しい結晶や分子をデザイン-  
エネルギー創成  
電極 電界液 電圧印加 電極  
次世代電子デバイス  
電極 電新機能素子 電極  
-機能を予測し実験で検証-

The diagram shows the creation of new materials and energy. It starts with designing new crystals or molecules (新しい結晶や分子をデザイン), leading to energy creation (エネルギー創成) using electrodes (電極) and electrolyte (電界液) with voltage application (電圧印加). This leads to next-generation electronic devices (次世代電子デバイス) with new functional elements (電新機能素子). The process involves predicting functions and verifying them through experiments (-機能を予測し実験で検証-).

## 3 防災・減災に資する 地球変動予測

雲解像データ同化による集中豪雨の  
再現・予測実験 (2005年9月4日杉並区の豪雨)  
東南海地震の地震波・津波シミュレーション

The diagram shows typhoon prediction and tsunami simulation. It includes a map of Japan with a typhoon track, a 3D visualization of a typhoon, and a 3D visualization of a tsunami simulation. The text indicates that this is a reproduction and prediction experiment of heavy rain in Suginami Ward on September 4, 2005, and a simulation of seismic waves and tsunamis from the Great East Japan Earthquake.

## 4 次世代ものづくり

The diagram shows next-generation manufacturing, including a 3D model of a factory floor, a 3D model of a car, and a 3D model of a building.

## 5 物質と宇宙の起源と構造

The diagram shows the origin and structure of matter and the universe, featuring a glowing yellow sphere and blue/purple structures.



# 講義内容

---

- HPCI戦略プログラム分野2 <新物質・エネルギー創成> CMSIについて
- 物質科学(物性物理)におけるシミュレーションと代表的アルゴリズム
- モンテカルロ法の基礎と応用
- ソフトウェアの開発と普及

# CMSI - 計算物質科学イニシアティブ

## 人的ネットワークの形成

分野振興  
国際シンポジウム  
滞在型ワークショップ  
連続研究会  
産官学連携  
国際連携  
講習会活動

## 次世代スパコンを中核とする HPCI



## 人材育成

大学院教育  
単位互換  
カリキュラム策定  
若手研究者・若手研究リーダー育成  
サマースクール、集中実習、ワークショップ  
社会人教育

アジア発の中核拠点形成を目指して

物性科学

材料科学

分子科学

## 計算機資源の効率的 マネジメント

課題の見直し  
共同利用スパコンとの連携

## 研究成果の普及

広報誌  
ソフトウェア公開  
ホームページ  
データ公開

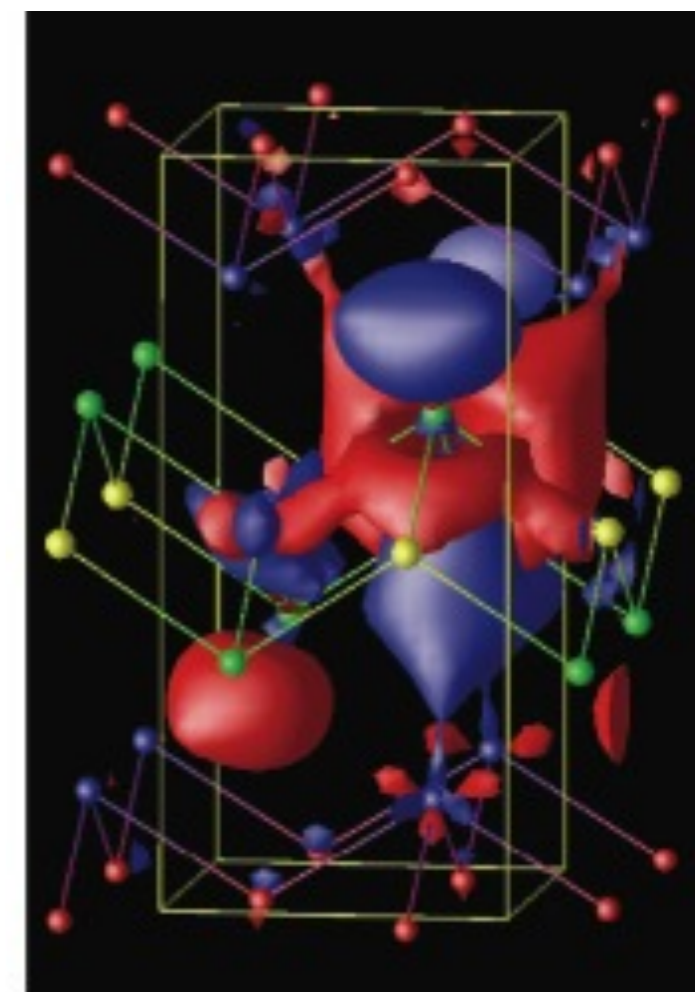
## 分野を越えた 取り組み

神戸への研究者常駐  
研究会、ワークショップ  
計算機科学との連携  
実験グループとの連携



# CMSIが「京」を用いて現在進めている課題

- 高温超伝導物質のしくみの解明
- 超高精度電子状態計算新手法の開発
- 電子の波動性を考慮した次世代半導体設計手法の開発
- 感染予防につながるウイルスの営みの解明
- 電池寿命を向上させる電極・電解液反応機構の解明
- 日本海溝に眠るメタンハイドレートの効率的利用
- 社会を支える固くてしなやかな金属構造材料の開発



応用  
(奔流)

# デバイス

# エネルギー変換

# 分子機能

重点; ナノ構造電子機能予測

電子的~機械的性質の  
マルチ・シミュレーション

スピントロニクス、  
マルチフェロイックス材料

光誘起電子ダイナミクスと  
光・電子機能量子デバイス

新材料探索

重点; 燃料電池物質

高性能リチウムイオン電池

重点; 水素・メタンハイドレート  
生成、安定

太陽電池高効率長寿命化

バイオマス酸素反応解析

高効率エネルギー  
変換構造用材料

ナノ構造体材料の高効率非平  
衡エネルギー変換

重点; 全原子Simによる  
ウイルス分子科学

ナノ・生体系反応制御・  
化学反応ダイナミクス

生体分子高次構造と機能

光機能分子と非線形外場応答  
分子の光物性

ポリモルフ生起分子集団機能

重点; 相関の強い量子系新量子相探求とダイナミクス

電子相間の強い物質  
の新機構解明

強相関電子系の  
励起ダイナミクス

新しい量子相・量子臨界現象

重点; 電子状態・動力学・熱揺らぎ融和と物質理論新

凝縮分子科学系揺らぎとダイナミクス

分子における電子の動的  
過程と多体量子動力学

分子の微細量子  
構造予測

# 新量子相・新物質

基礎  
(源流)



## 重点課題代表者に聞く

# 電子状態・動力学・熱揺らぎの融和と分子論の新展開

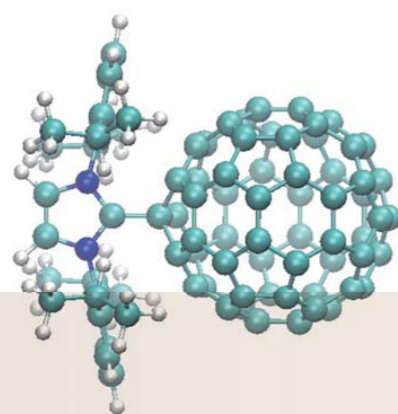
話し手：天能精一郎 てんのう せいいちろう  
神戸大学大学院システム情報学研究所 教授

聞き手：米原文博 よねはら たけひろ  
東京大学大学院総合文化研究科 CMSI分子科学拠点研究員

## 重点課題の概要

**米原** 現実の化学現象を予測、理解し、その制御につなげることをめざす理論分子科学の研究では、(1) 現実的なサイズの分子系・物質系への適用が可能で、(2) 簡便性と高精度な予測性を備えた計算手法の開発はきわめて重要です。実験に対し理論側が信頼性のあるレファレンスデータを提供するという大きな意義もっています。電子状態を主体とする理論物質科学においては、電子相関と呼ばれる電子同士の多体相関の記述が量子予測の鍵になります。まず、重点課題についてのご紹介をお願いします。

**天能** 重点課題の目的は、「京」コンピュータでなければ解けない問題にチャレンジし、社会的にも意義の大きな研究成果をあげることで、ガウス型基底関数を使う分子の電子状態計算のコードは非常に複雑で、「京」を使いこなすだけでもさまざまな技術が必要です。現在、F12理論が超並列実装され、ナノ炭素材料などのプロダクションランが行われていますが、ミッションの後半にかけては、有機ELや人工光合成での励起状態を含む材料設計や、希土類の代替物探索を可能にすることが重要だと考えています。



IDipp-C<sub>60</sub>のF12計算。福井謙一記念センターの永瀬茂教授との共同研究。

**米原** 重点課題のテーマを掲げられた経緯について教えてください。

**天能** 物質設計などの応用分野で主に用いられてきたのは密度汎関数法ですが、物理的に欠けているところがたくさんあります。分子科学分野で発展してきた摂動論や結合クラスター理論を「京」コンピュータで走らせることにより、これまでとは本質的に異なる物質科学をめざせないかというのが動機です。

## 成果と今後の展望

**米原** 最近の具体的成果について、ご紹介願えないでしょうか。

**天能** F12法で用いている分子求積法は超並列計算に向いており、これまでハイブリッド

並列化を進めてきました。これにより、数十万CPUコアでも非常に高い実行効率を引き出すことができるようになりました。また、分子軌道計算に不可欠な積分の実行効率が問題でしたが、これも求積法を用いたコードのSIMD化を行い、有用な計算手法に発展させています。

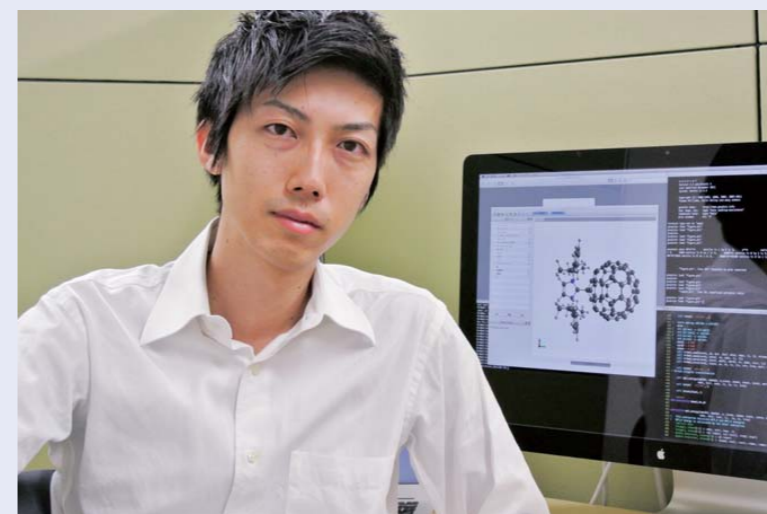
**米原** 化学においては、電子状態を含む分子構造に関する正確な知見に加え、しばしば、反応動力学の微視的情報も求められます。ご自身の研究技法を反応動力学に適用していくことの可能性、その際の課題、解決のイメージ等について、お聞かせ願えないでしょうか。

**天能** 低励起状態に関しては、ポテンシャル面と非断熱結合の行列要素を注意深く計算することにより、何が起きているかを知ることがおおよそ可能です。それを「見てきたかのように」定量化するためには反応動力学が必要ですが、一般に興味深い現象は多自由度ダイナミクスであるので、電子状態計算とは分離することができないと考えられます。動力学の技術が電子状態理論に取り入れられる発展が望ましいと思います。

## 計算物質科学の魅力

**米原** 若い世代(大学生や大学院生)に向

## 有機伝導体の結晶構造と分子間相互作用を大規模計算で求める



大西裕也 おおし ゆうや  
神戸大学大学院システム情報学研究所

け、分子科学や計算物質科学の魅力、科学における計算機の有用性に関するアピールをお願いいたします。

**天能** 現実の物質科学を理論計算で予言できること、それに向かってボトムアップでチャレンジする研究分野であるということが魅力です。長い間、大型計算機を使うよりも基礎理論の発展のほうが大きなブレークスルーをもたらすと考えてきました。しかしながら、近年の超並列計算環境のスケールを考えると、スパコン利用は科学技術計算では大きな優位性になってきていると思います。分子科学で発展してきた高精度な量子化学理論と「京」コンピュータを組み合わせることで、物質科学においてこれまでは見えなかった本質が今後明らかになっていくはずだと。

原子や分子に関する化学現象の理論的解明を目的とした計算化学は、高精度化と大規模化をめざして発展を続けており、ごく小さな分子ならば、精緻な実験と同等の精度で計算できるようになった。分子軌道法に基づいて高精度な計算を達成するためには、高精度な理論と同時に大きな基底関数を用意する必要がある。しかしながら、高精度な理論では基底関数のサイズの5乗以上で計算コストが増大するため、数十原子からなる分子の高精度計算は非常に難しい。

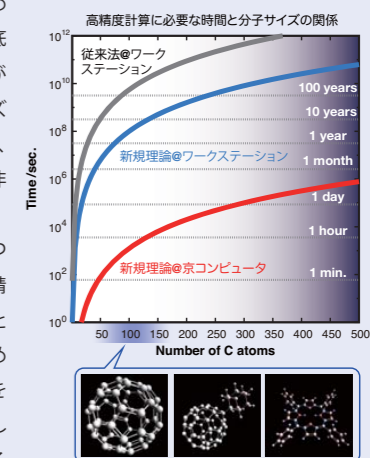
この問題を解決するアプローチは2つある。1つは、より少ない基底関数で高精度な計算を可能とする理論を開発することである。もう1つは、超並列計算機のための並列実装を行い、大規模分子の計算を可能とすることである。この両者を達成したものが、本課題で開発されているGELLANプログラムに並列実装された露

## 重点研究員のアプローチ

法)である。図に示したように、この新規理論と大規模並列実装によって、フラレンなどの巨大な分子の高精度な計算が可能となった。

私は現在、さらなる高精度化をめざして高次の摂動項を取り込んだ露わに相関した電子状態理論の開発を行うと同時に、すでに実装されているMP2-F12法を用いて、有機伝導体として有望なフラレン誘導体やポルフィリンからなる分子性結晶の微視的構造とその決定因子を解明する研究を行っている。

有機伝導体は分子の特性と同様に結晶構造の制御によっても効率が向上することが明らかになっているが、結晶構造と密接に関係する分子間相互作用を実験で正確に求めることは困難なため、これを大規模計算によって正確に見積もることで、より高性能な分子の設計に有用な知見を与えたい。



新規理論の超並列実装により、有機伝導体分子の高精度計算が可能になった。

# 物性物理における代表的なシミュレーション手法

---

- 密度汎関数法 (density functional theory)
  - 経験的なパラメタを含まない：「第一原理計算」
  - 相関・ゆらぎが強い場合には破綻
- モデル計算
  - 有効模型(ハイゼンベルグ模型など)に対する計算手法
  - 相関・ゆらぎの効果を正確に取り入れる
  - 数値対角化(厳密対角化) (ED)
  - 古典/量子モンテカルロ法 (MC/QMC)
  - 密度行列くりこみ群 (DMRG)
  - 動的平均場近似 (DMFT)
- 量子化学計算、分子動力学





# 物質科学のアプリケーションの特徴

---

- 相関の強い系の平衡状態・定常状態・アンサンブルに興味がある (1トラジェクトリの計算だけではだめ)
- シミュレーションする系の次元は3次元に限らない。量子的な相関など、空間的に局所的であるとも限らない
- 遠くの相関を取り込む/平衡状態にたどりつくための工夫として、非局所的な操作/演算が多くの場合必要
- メモリバンド幅を要求するアプリケーションが多い
- 大域通信・バタフライ型通信など高次元ネットワークを要求するものも多い
- 少数のコミュニティコードではなく、研究グループ毎に多数のコードが存在  
→ 手法・アルゴリズムの開発から応用までのサイクルが短い

# 数値対角化 (厳密対角化)

---

- 有限の大きさの系のハミルトニアンを行列の形で書き下し、数値的に対角化

- 例：ハイゼンベルグ模型

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle j,k \rangle} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k = J \sum_{\langle j,k \rangle} \left[ S_j^z S_k^z + \frac{1}{2} (S_j^+ S_k^- + S_j^- S_k^+) \right]$$

- スピン数  $N \Rightarrow$  行列のサイズ  $(2S+1)^N \times (2S+1)^N$

- 例： $S=1/2, N=20 \Rightarrow$  行列のサイズ  $1048576 \times 1048576 \Rightarrow$  メモリ 8TB

- どうやって対角化するか

- 完全対角化：Householder法 (三重対角化) + QR分解など (LAPACKなどを使う)

- 計算量が行列の次元の3乗に比例

- スピンを1つ増やすと、次元は2倍、メモリは4倍、計算時間は8倍!

# 数値対角化における計算上の工夫

---

- 行列のサイズを小さくする
  - 保存量(ハミルトニアンと可換な量)を使う (total momentam, total S, etc)
  - ハミルトニアンは保存量毎にブロック対角化。それぞれを独立に対角化
  - 例：total Sz  $\Rightarrow$  N=20 の系で total Sz=0 の部分空間の次元

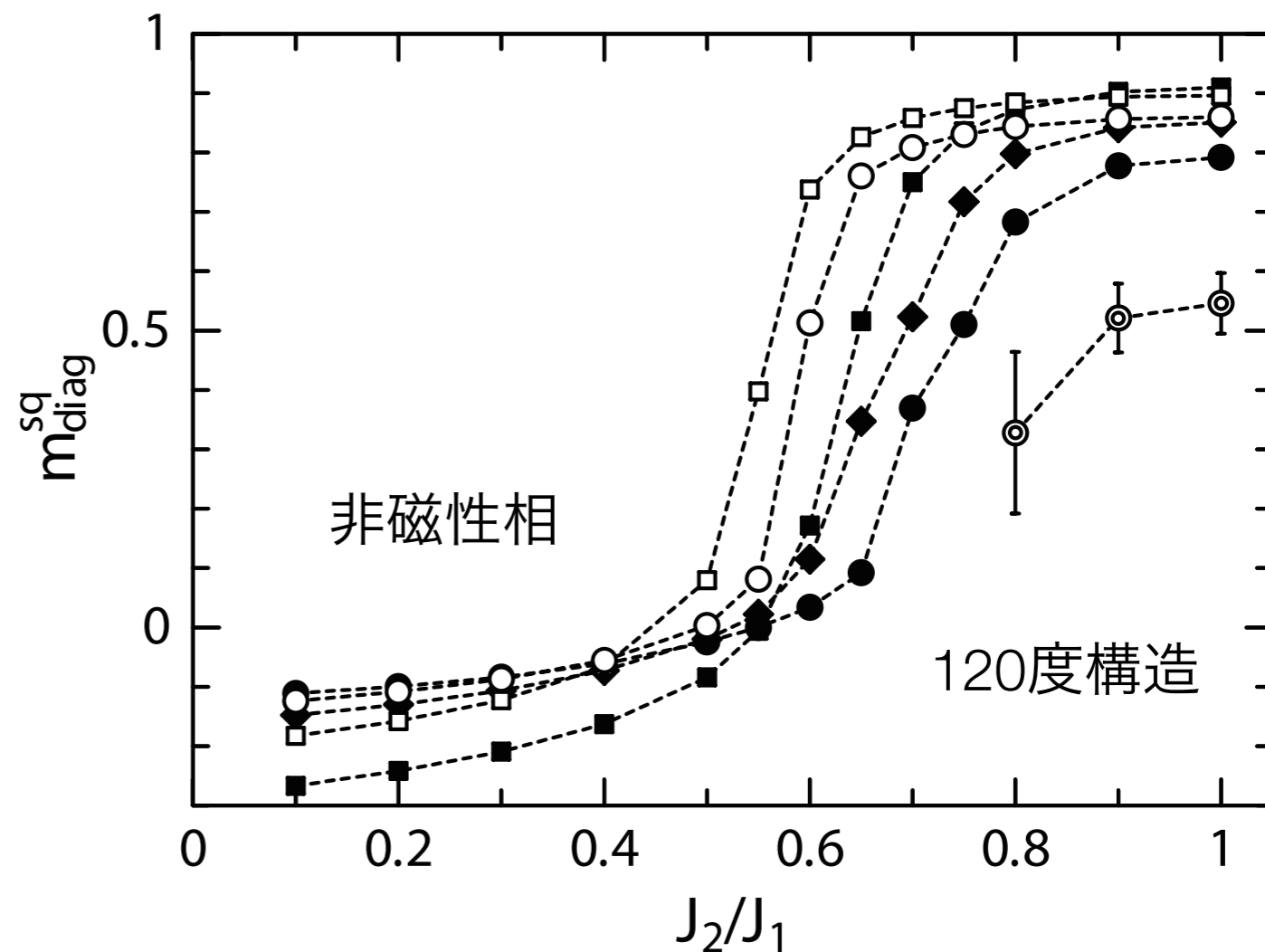
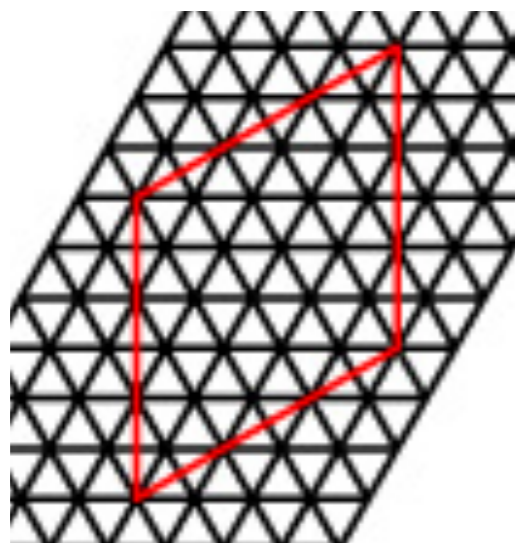
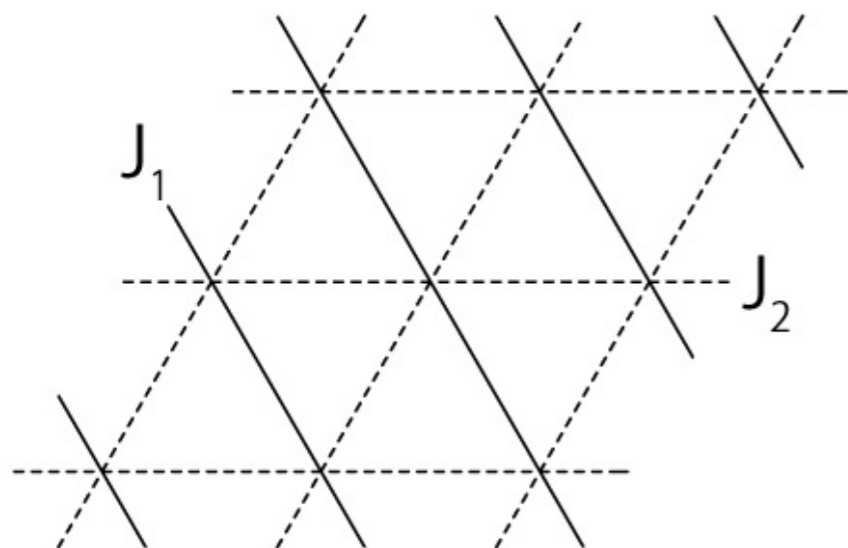
$${}_{20}C_{10} = \frac{20!}{10!10!} = 184\,756 \ll 2^{20} = 1\,048\,576$$

- 全固有値・固有ベクトルではなく、基底状態と低励起状態だけを求める
  - ハミルトニアン行列はかなり「疎」 (1行/1列の非零要素の数  $\sim$  ボンド数)
  - べき乗法の利用： $\mathcal{H}^n v \rightarrow \Psi_0$  (絶対値最大の固有ベクトルに収束)
    - 行列の非零要素のみ保存、あるいは行列要素をその場で計算
  - べき乗法の改良：Lanczos法、CG (共役勾配)法



# 超大規模数値対角化の例 (Nakano et al 2013)

- (歪んだ)三角格子  $S=1$  反強磁性ハイゼンベルグ模型
- $N=27 \Rightarrow$  次元 712 070 156 203  $\Rightarrow$  メモリ15TB (情報基盤センター FX10 4400ノード)



# 乱数を用いた数値計算手法

---

- 確率の計算
- 自然過程の再現
- 乱択アルゴリズム (randomized algorithm)
  - モンテカルロ法 (サンプリング、数値積分)
  - 乱択グラフアルゴリズム
  - 乱択ソーティング
  - 機械学習 (ベイズ推定)
- 常に正解が得られるわけではない。繰り返しにより少しずつ正確になっていく
- 物性物理、素粒子物理、化学、生物、医学、統計、バイオインフォマティクス、金融分野など、あらゆる分野で用いられている



from *SIAM News*, Volume 33, Number 4

## The Best of the 20th Century: Editors Name **Top 10 Algorithms**

By Barry A. Cipra

*Algos* is the Greek word for pain. *Algor* is Latin, to be cold. Neither is the root for *algorithm*, which stems instead from al-Khwarizmi, the name of the ninth-century Arab scholar whose book *al-jabr wa'l muqabalah* devolved into today's high school algebra textbooks. Al-Khwarizmi stressed the importance of methodical procedures for solving problems. Were he around today, he'd no doubt be impressed by the advances in his eponymous approach.

Some of the very best algorithms of the computer age are highlighted in the January/February 2000 issue of *Computing in Science & Engineering*, a joint publication of the American Institute of Physics and the IEEE Computer Society. Guest editors Jack Dongarra of the University of Tennessee and Oak Ridge National Laboratory and Francis Sullivan of the Center for Computing Sciences at the Institute for Defense Analyses put together a list they call the "Top Ten Algorithms of the Century."

"We tried to assemble the 10 algorithms with the greatest influence on the development and practice of science and engineering in the 20th century," Dongarra and Sullivan write. As with any top-10 list, their selections—and non-selections—are bound to be controversial, they acknowledge. When it comes to picking the algorithmic best, there seems to be no best algorithm.

Without further ado, here's the CiSE top-10 list, in chronological order. (Dates and names associated with the algorithms should be read as first-order approximations. Most algorithms take shape over time, with many contributors.)

**1946:** John von Neumann, Stan Ulam, and Nick Metropolis, all at the Los Alamos Scientific Laboratory, cook up the Metropolis algorithm, also known as the **Monte Carlo method**.

The Metropolis algorithm aims to obtain approximate solutions to numerical problems with unmanageably many degrees of freedom and to combinatorial problems of factorial size, by mimicking a random process. Given the digital computer's reputation for deterministic calculation, it's fitting that one of its earliest applications was the generation of random numbers.



<http://www.siam.org/news/news.php?id=637>

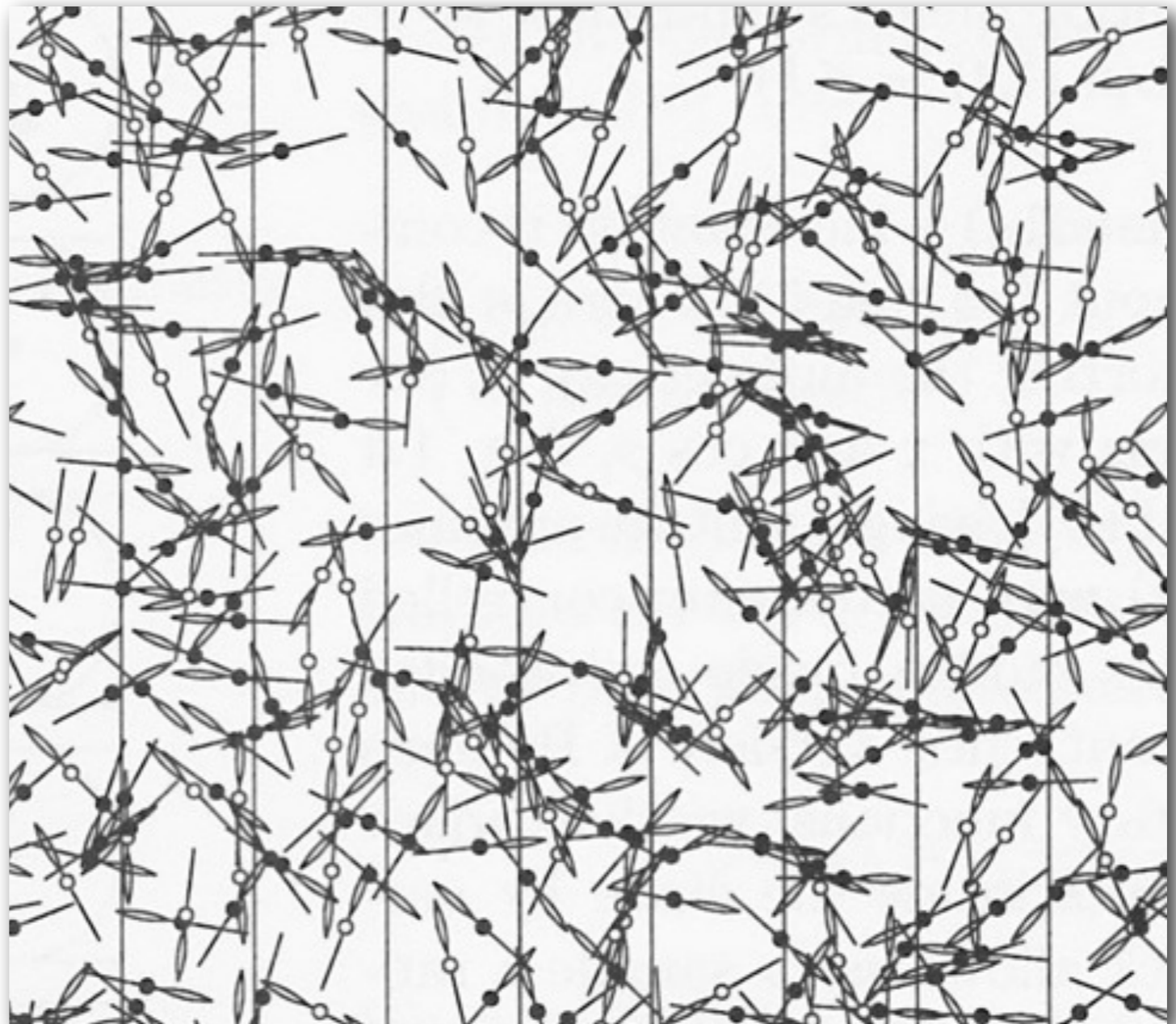
- Other algorithms:  
Quicksort, fast Fourier transform (FFT), QR algorithm, Krylov subspace iteration methods, simplex method for linear programming, Fortran optimizing compiler, etc



# Buffon の針

---

- 等間隔  $b$  で線が描かれた床の上に長さ  $a$  の針をばらまく (ただし  $a < b$  とする)
- 線に針がかかる確率は?

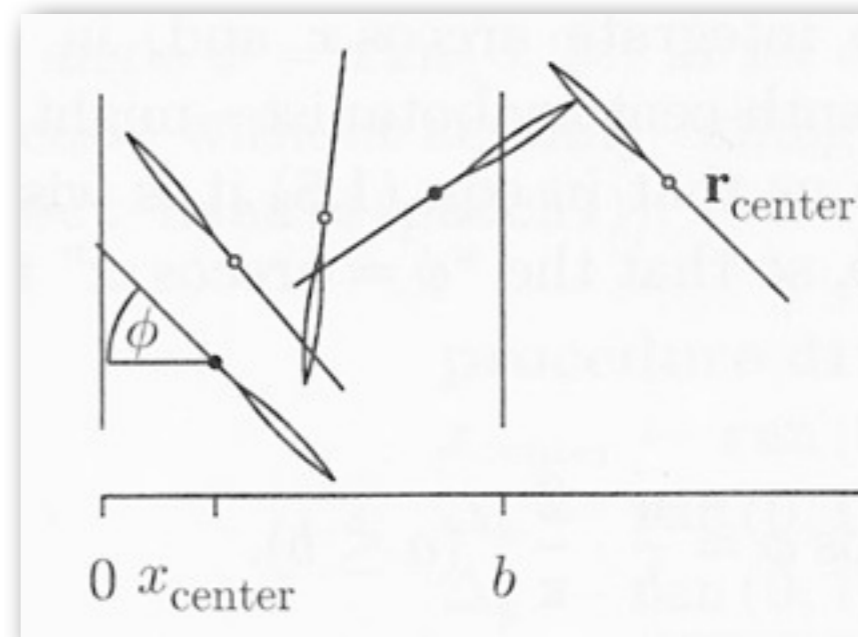


W. Krauth (2006)

# Buffon の針 (つづき)

- 最も近い線から、針の中心までの距離  $x$  は  $0 \sim b/2$  に均一に分布
- 中心のまわりの針の角度  $\phi$  は  $0 \sim \pi/2$  に均一に分布
  - $x < (a/2) \cos \phi$  ならば、針は線にかかる  $N_{\text{hits}}(x, \phi) = 1$

$$P = \frac{\int_0^{b/2} dx \int_0^{\pi/2} d\phi N_{\text{hits}}(x, \phi)}{\int_0^{b/2} dx \int_0^{\pi/2} d\phi} = \frac{a}{b} \cdot \frac{2}{\pi}$$

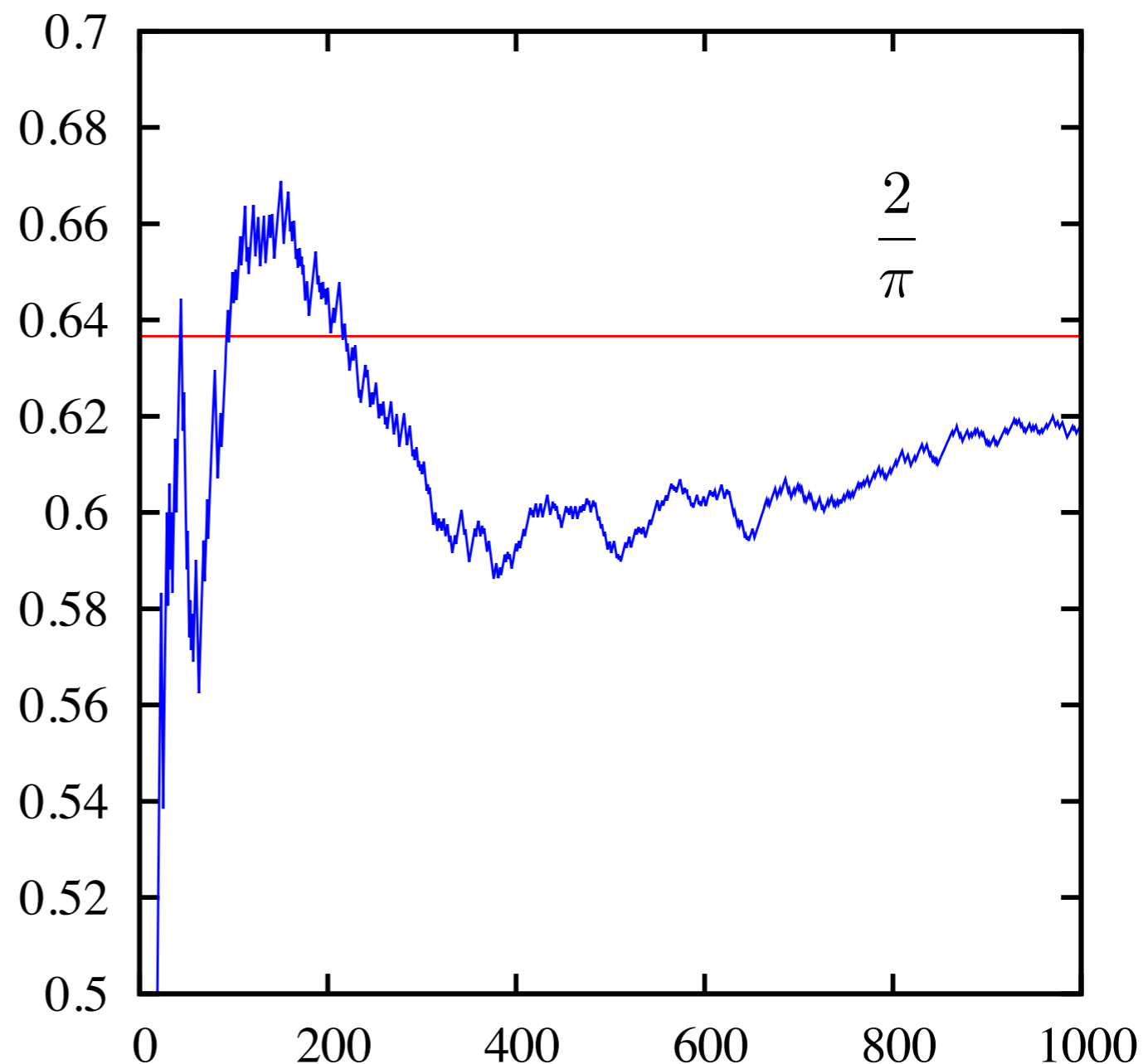


- この確率過程を計算機中でシミュレーションすれば、円周率が求まる!
  - モンテカルロ積分、モンテカルロ・サンプリング

# 乱数によるサンプリング – モンテカルロ法

- $a = b = 1$  のとき

```
import math
import random
success = 0
for i in range(10000):
    x = 0.5 * random.random()
    phi = (math.pi/2) * random.random()
    if (x < 0.5 * math.cos(phi)):
        success += 1
    print i, success / float(i+1)
```





# 乱数を用いたグラフアルゴリズム – 最小カット問題

- 「最小カット (min-cut)」 = 連結グラフを二つの部分に分けるために切らなければならない辺(エッジ)の集合のうち、もっとも小さいもの

- 右の図では  $\{(3,5), (4,5)\}$

- “Randomized Min-Cut Algorithm”

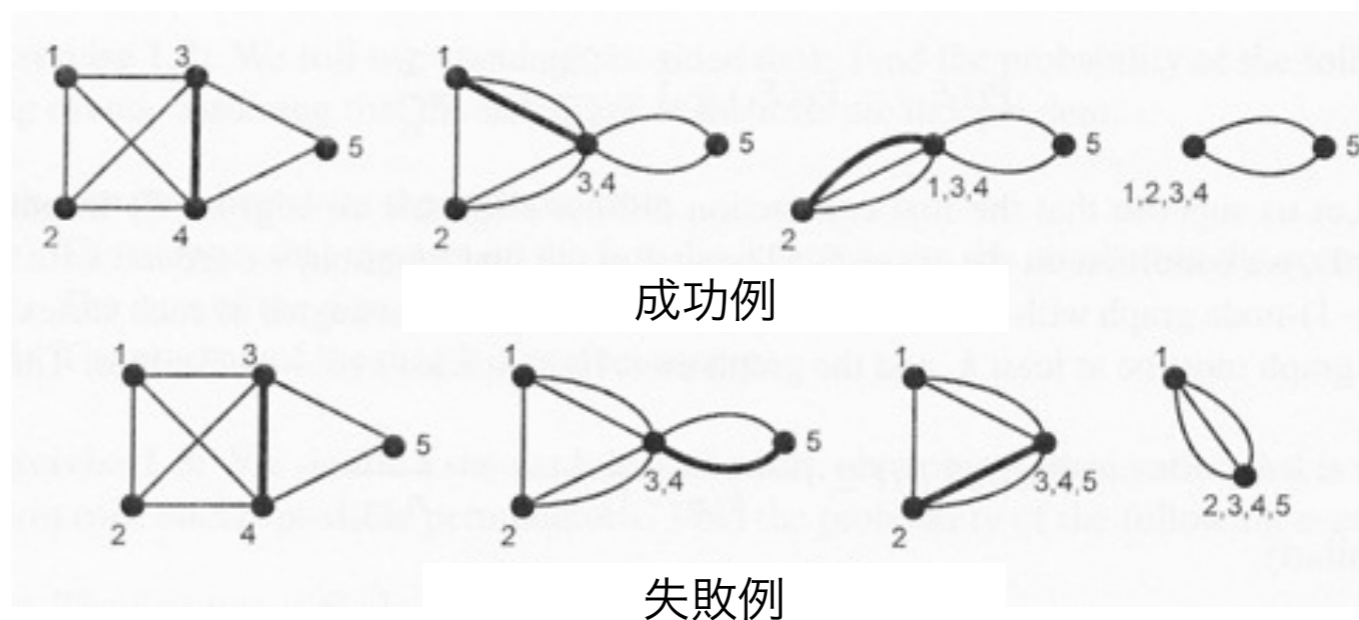
- ランダムに辺を一つ選ぶ

- 辺の両端の頂点を一つにつぶす (自己ループは取り除く)

- 残りの頂点が二つになるまで繰り返す

- 上の試行を何回も繰り返して、得られたうちで最小なカットを結果とする

- 頂点の数が  $n$  のグラフに関して、正解が得られる確率：少なくとも  $\frac{2}{n(n-1)}$



# ベイズ推定に基づく画像修復

---

原画像 S



劣化画像 T



復元画像



Tanaka (2004)

# モンテカルロ法で求めた、世界で一番難しい数独

arXiv.org > cond-mat > arXiv:1303.1886

Search or Article-id

(Help | Advanced search)

All papers

Condensed Matter > Statistical Mechanics

## Difficult Sudoku Puzzles Created by Replica Exchange Monte Carlo Method

Hiroshi Watanabe

(Submitted on 8 Mar 2013 (v1), last revised 11 Mar 2013 (this version, v2))

An algorithm to create difficult Sudoku puzzles is proposed. An Ising spin-glass like Hamiltonian describing difficulty of puzzles is defined, and difficult puzzles are created by minimizing the energy of the Hamiltonian. We adopt the replica exchange Monte Carlo method with simultaneous temperature adjustments to search lower energy states efficiently, and we succeed in creating a puzzle which is the world hardest ever created in our definition, to our best knowledge. (Added on Mar. 11, the created puzzle can be solved easily by hand. Our definition of the difficulty is inappropriate.)

Comments: 6 pages, 5 figures. Remarks were added

Subjects: **Statistical Mechanics (cond-mat.stat-mech)**

Cite as: [arXiv:1303.1886](https://arxiv.org/abs/1303.1886) [cond-mat.stat-mech]

(or [arXiv:1303.1886v2](https://arxiv.org/abs/1303.1886v2) [cond-mat.stat-mech] for this version)

### Submission history

From: Hiroshi Watanabe [[view email](#)]

[v1] Fri, 8 Mar 2013 05:28:32 GMT (21kb)

[v2] Mon, 11 Mar 2013 05:22:55 GMT (21kb)

### Download:

- [PDF](#)
- [PostScript](#)
- [Other formats](#)

Current browse context:

cond-mat.stat-mech

< [prev](#) | [next](#) >

[new](#) | [recent](#) | [1303](#)

Change to browse by:

[cond-mat](#)

### References & Citations

- [NASA ADS](#)

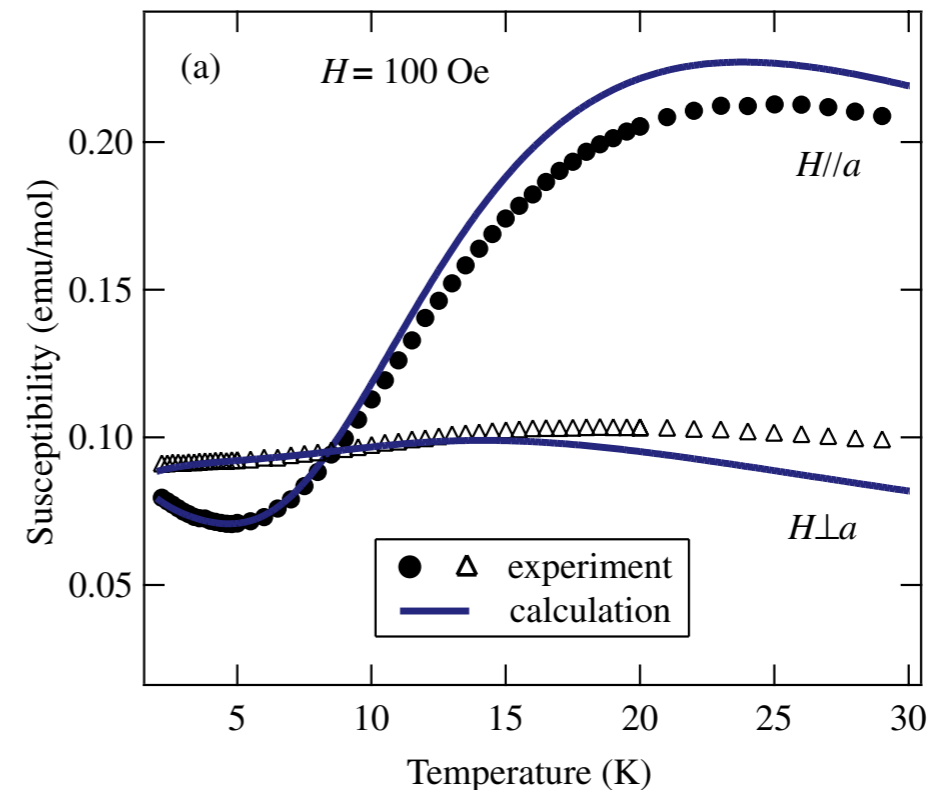
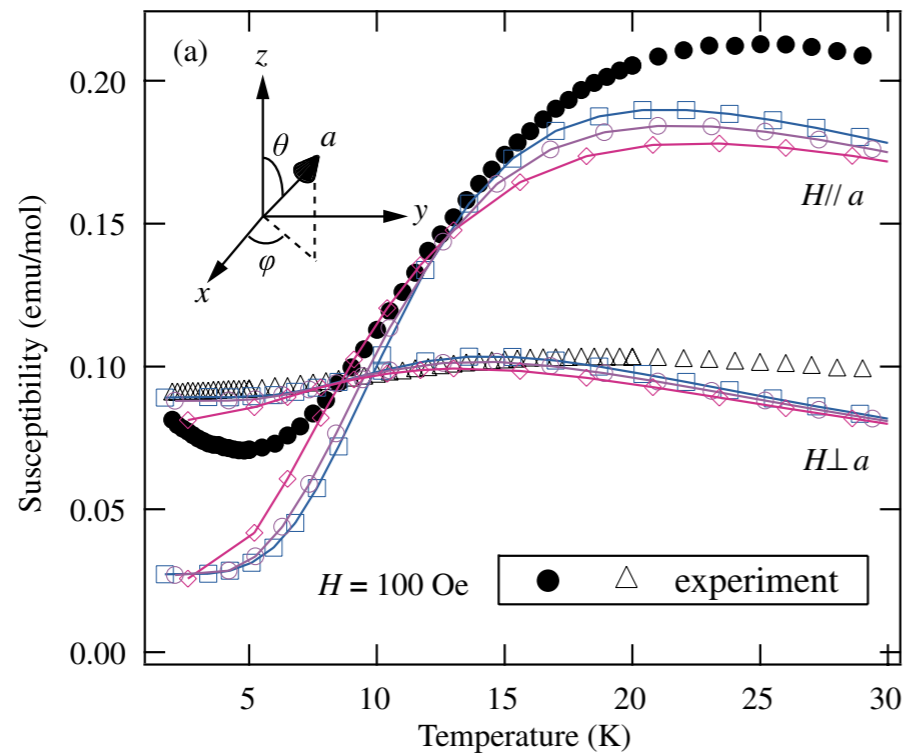
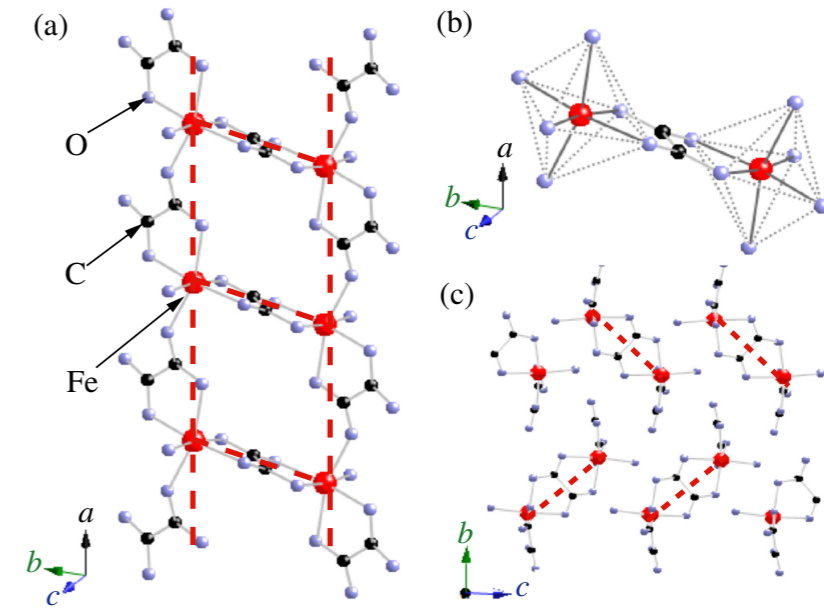
Bookmark ([what is this?](#))





# Spin ladder material $\text{Na}_2\text{Fe}_2(\text{C}_2\text{O}_4)_3(\text{H}_2\text{O})_2$

- $\text{Fe}^{2+}$  ions in octahedral crystal field  
⇒ **effective  $S=1$  spins** at low T
- Fitting experimental data by QMC results for several theoretical models (**ladders**, **dimers**, etc)

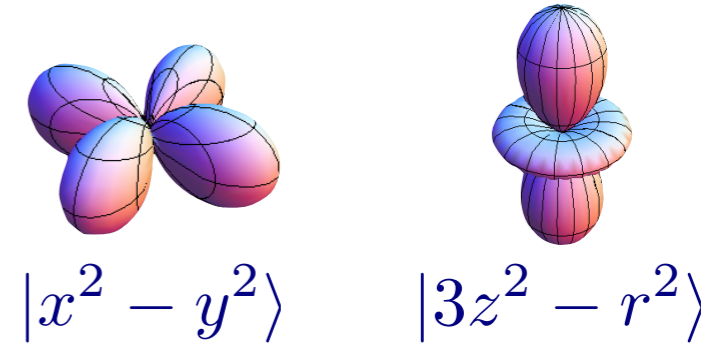


Yamaguchi, Kimura, Honda, Okunishi, Todo, Kindo, Hagiwara (2009)

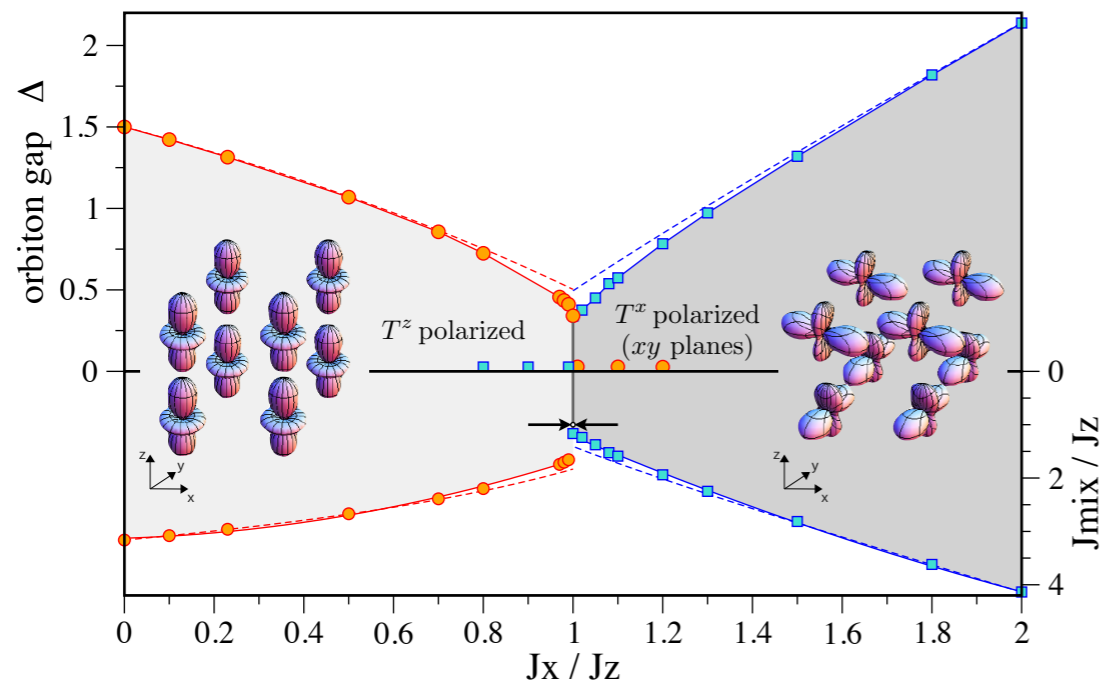


# Orbital ordering in $e_g$ orbital systems

- Mott insulators with partially filled d-shells
- Non-trivial interplay of charge, spin, and orbital degrees of freedom
- Effective Hamiltonian for orbital degrees of freedom (120° model)



$$H_{120} = - \sum_{i, \gamma=x, y} \frac{1}{4} \left[ J_z T_i^z T_{i+\gamma}^z + 3J_x T_i^x T_{i+\gamma}^x \right. \\ \left. \pm \sqrt{3} J_{\text{mix}} (T_i^z T_{i+\gamma}^x + T_i^x T_{i+\gamma}^z) \right] - \sum_i J_z T_i^z T_{i+z}^z$$



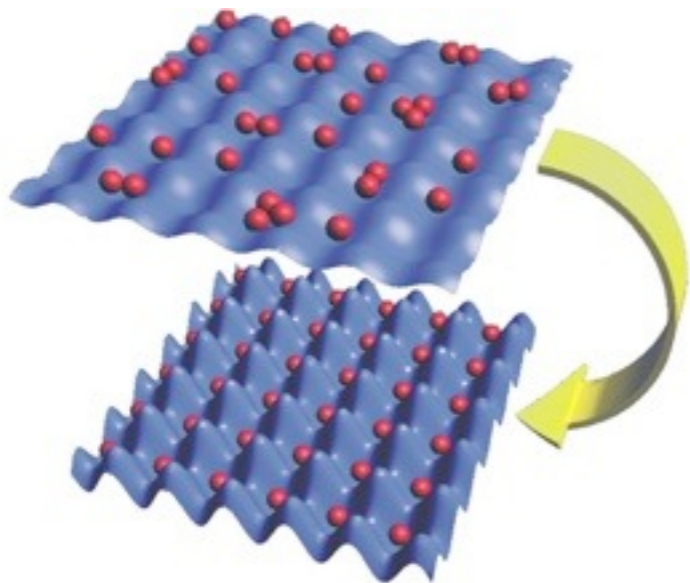
van Rynbach, Todo, Trebst (2010)

# Supersolid in extended Bose-Hubbard model

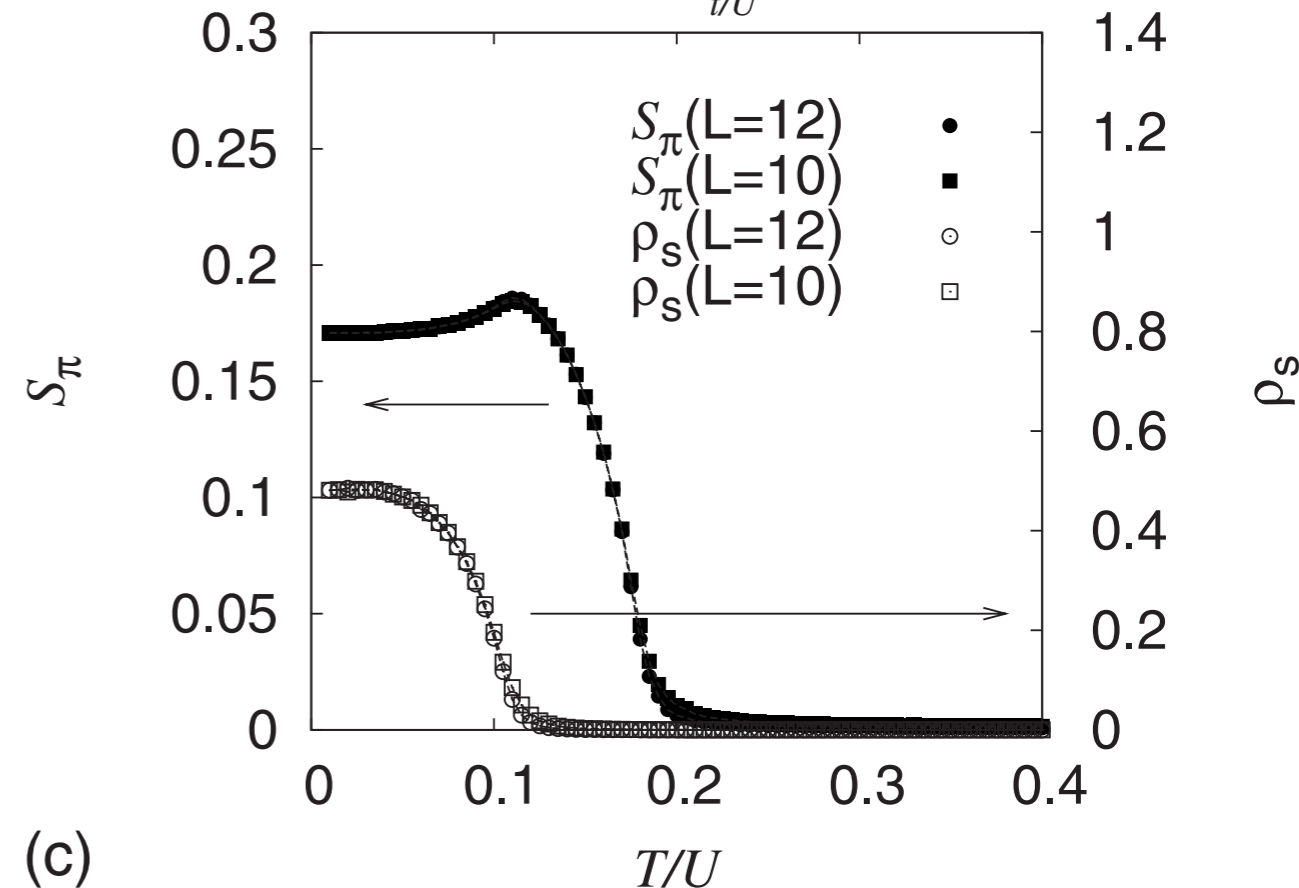
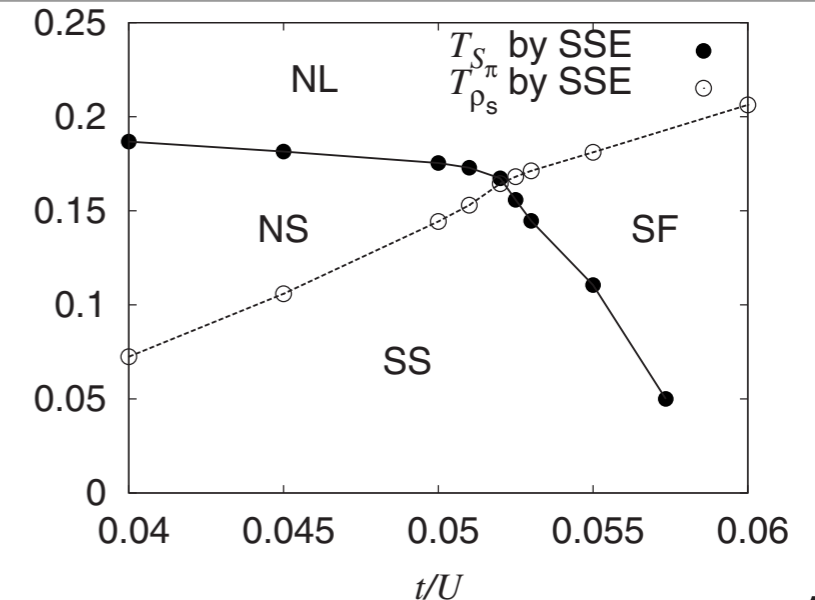
- Interacting soft-core bosons

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_i a_j^\dagger) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + \frac{1}{2} U \sum_i n_i (n_i - 1) - \mu \sum_i n_i, \quad T/U$$

- Supersolid = co-existence of diagonal long-range order (=solid) and off-diagonal long-range order (=superfluid)
- Experimental realization: optical lattice?



<http://www.uibk.ac.at/th-physik/go>



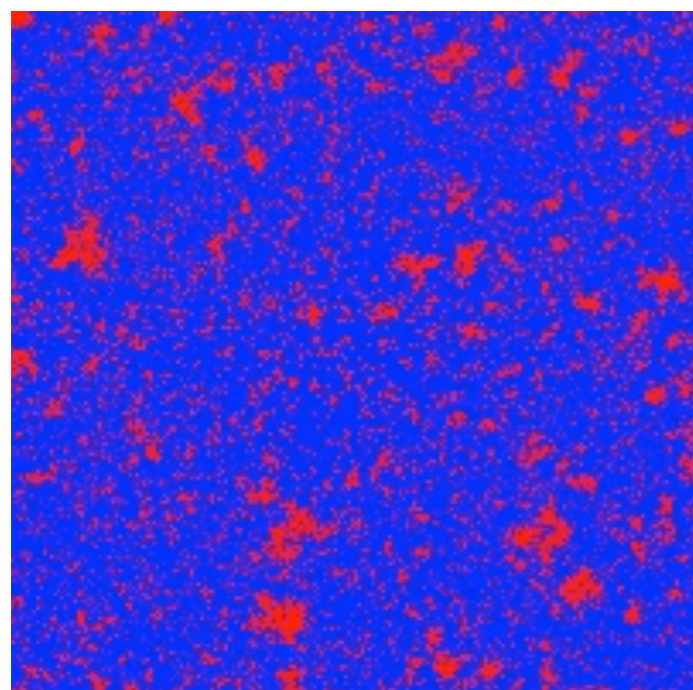
(c)

Yamamoto, Todo, Miyashita (2009)

# 磁性体における相転移と臨界現象

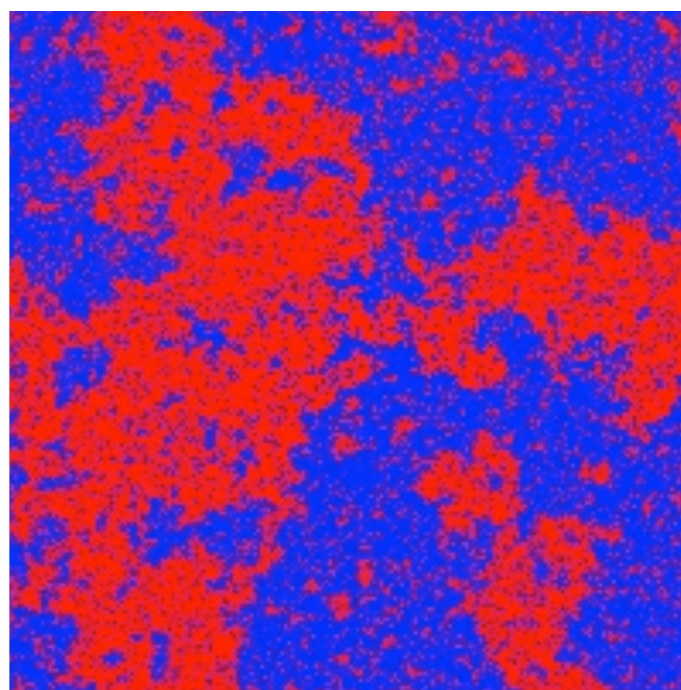
- 例：強磁性体 (磁石)
  - 結晶中のひとつひとつの原子が小さな磁石 (スピン)
  - 隣り同士は同じ方向を向いた方がエネルギー的に得 (強磁性的相互作用)

$T=0.995T_c$



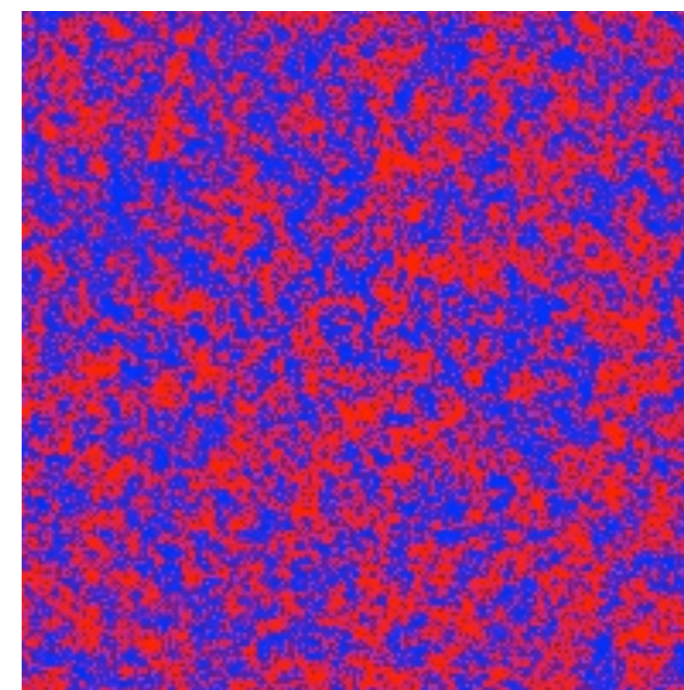
エネルギー利得  
秩序状態  
ordered state

$T=T_c$



臨界点 critical point  
キューリー点

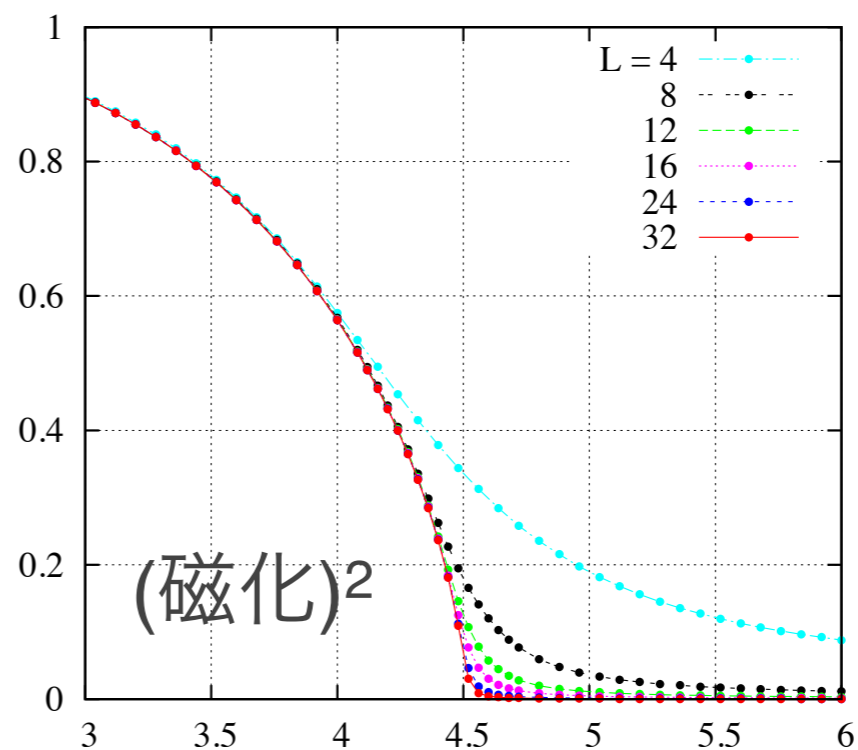
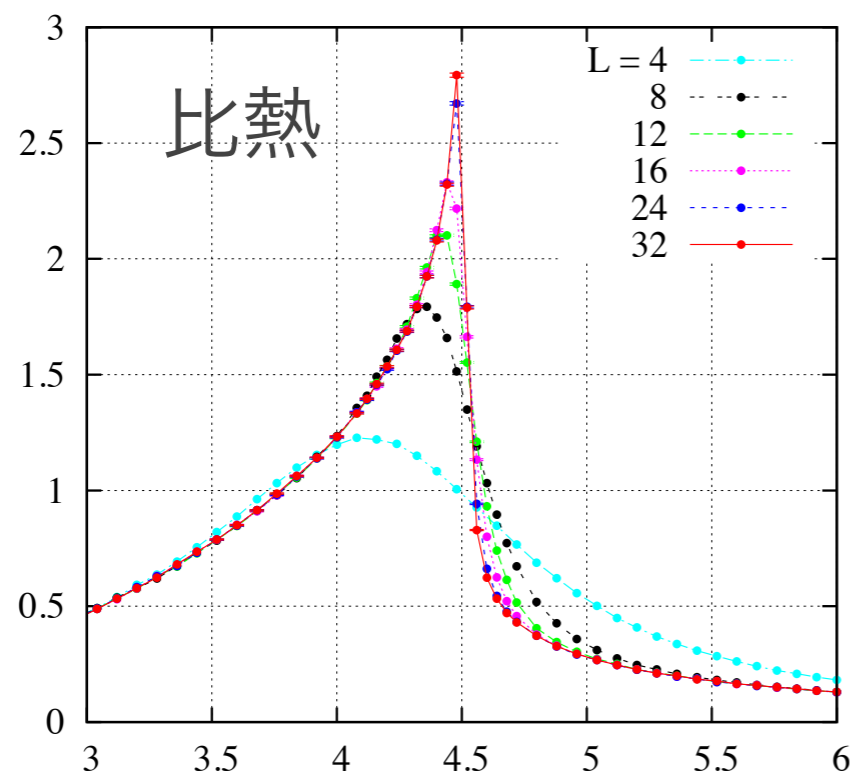
$T=1.05T_c$



エントロピー利得  
無秩序状態  
disordered state

# 相転移と臨界現象

- 相転移点の近くでは様々な物理量 (比熱、磁化) が異常を示す (臨界現象)



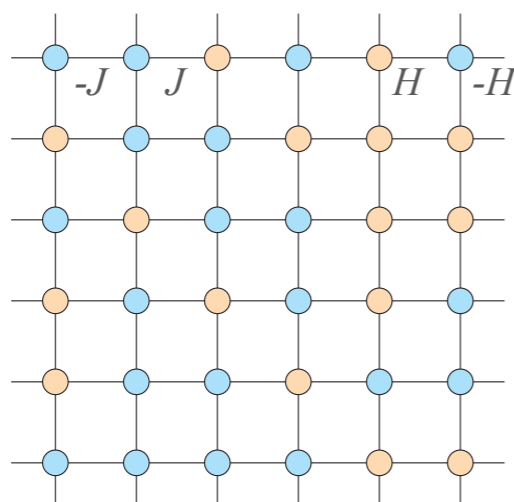
- 小さな系ではなめらかに変化する  $\Rightarrow$  相転移や秩序状態は非常にたくさんの原子 (~アボガドロ数) が集ってはじめて現われる!
- スーパーコンピュータによる大規模シミュレーションが必要



# 強磁性体のモデル化

- イジング (Ising) 模型

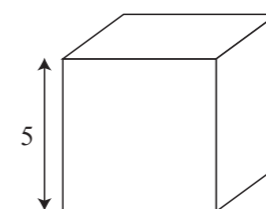
$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i$$



- 物理量の期待値の計算(例: 磁化)

$$m = \frac{\text{Tr} \sigma_i \exp[-\mathcal{H}/kT]}{\text{Tr} \exp[-\mathcal{H}/kT]}$$

- 単純立方格子(一辺の長さ 5)



スピン数 125  $\rightarrow 2^{125} \approx 10^{38}$  の和

- 期待値の計算にかかる時間

$$10^{38} \div (10^{16}/\text{sec}) \approx 300 \text{兆年}$$

- モンテカルロ法

配位空間の中から  $10^4 \sim 10^7$  程度をランダムにサンプルすることにより期待値を効率良く評価

$\rightarrow$  重みつきサンプリング

Markov chain Monte Carlo

## Equation of State Calculations by Fast Computing Machines

NICHOLAS METROPOLIS, ARIANNA W. ROSENBLUTH, MARSHALL N. ROSENBLUTH, AND AUGUSTA H. TELLER,  
*Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico*

AND

EDWARD TELLER,\* *Department of Physics, University of Chicago, Chicago, Illinois*

(Received March 6, 1953)

A general method, suitable for fast computing machines, for investigating such properties as equations of state for substances consisting of interacting individual molecules is described. The method consists of a modified Monte Carlo integration over configuration space. Results for the two-dimensional rigid-sphere system have been obtained on the Los Alamos MANIAC and are presented here. These results are compared to the free volume equation of state and to a four-term virial coefficient expansion.

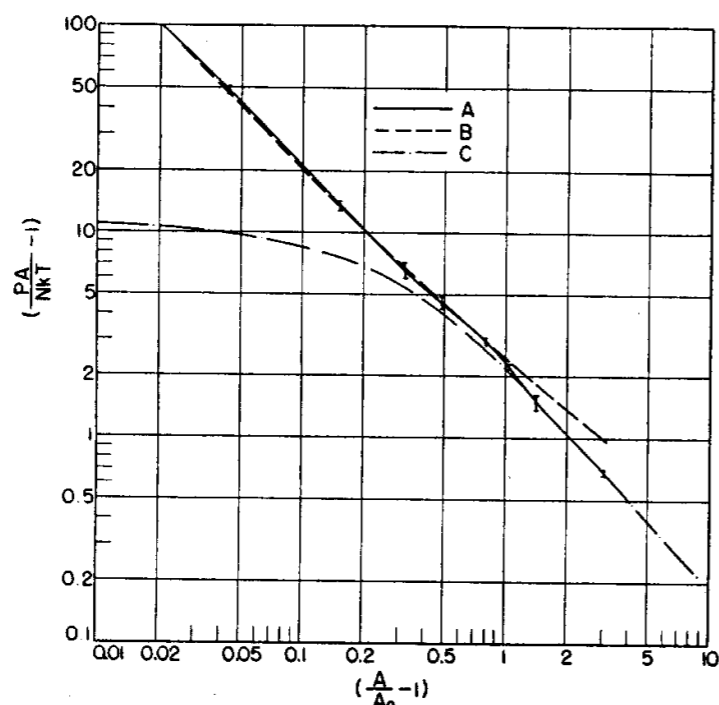


FIG. 4. A plot of  $(PA/NkT) - 1$  versus  $(A/A_0) - 1$ . Curve A (solid line) gives the results of this paper. Curves B and C (dashed and dot-dashed lines) give the results of the free volume theory and of the first four virial coefficients, respectively.

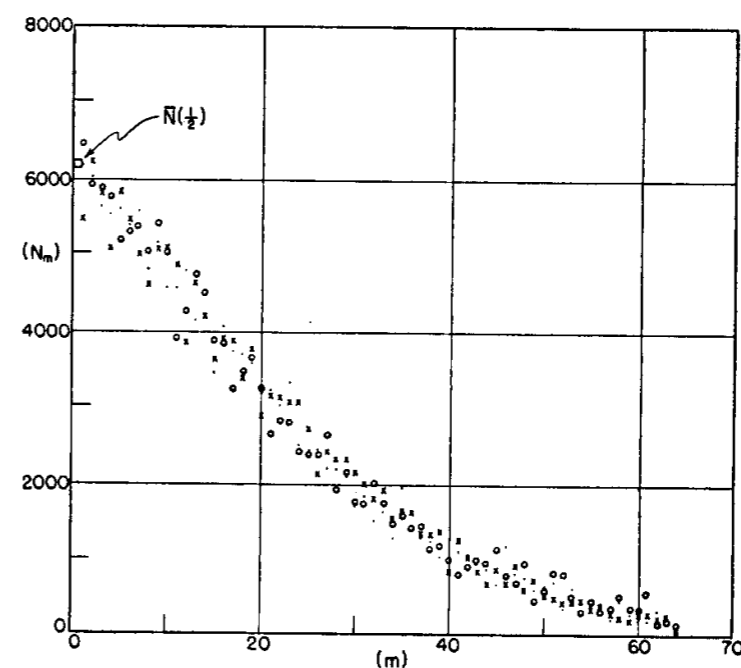


FIG. 5. The radial distribution function  $N_m$  for  $\nu=5$ ,  $(A/A_0) = 1.31966$ ,  $K=1.5$ . The average of the extrapolated values of  $N_{1/2}$  in  $\bar{N}_{1/2} = 6301$ . The resultant value of  $(PA/NkT) - 1$  is  $64\bar{N}_{1/2}/N^2(K^2 - 1)$  or 6.43. Values after 16 cycles,  $\bullet$ ; after 32,  $\times$ ; and after 48,  $\circ$ .

# イジング模型に対するマルコフ連鎖モンテカルロ

---

## メトロポリス法 Metropolis

```
for (int m = 0; m < total_mcs; ++m) { // loop over Monte Carlo steps
  for (int s = 0; s < num_sites; ++s) { // loop over lattice sites
    double delta = 0;
    for (int j = 0; j < num_neighbors; ++j) {
      int v = neighbor(s, j);
      delta += 2 * J * spin[s] * spin[v]; // calculate energy difference
    }
    if (random() < exp(-beta * delta)) // accept/reject trial configuration
      spin[s] = -1 * spin[s];
  }
  // measure physical quantities
}
```

## 熱浴法 heat bath

```
if (random() < (1 + tanh(-beta * delta / 2)) / 2)
  spin[s] = -1 * spin[s];
```

# 円周率の計算

- 円周率を与える公式

$$\pi = \lim_{c \rightarrow \infty} \int_0^c f(x) dx \quad f(x) = \frac{2}{\cosh x}$$

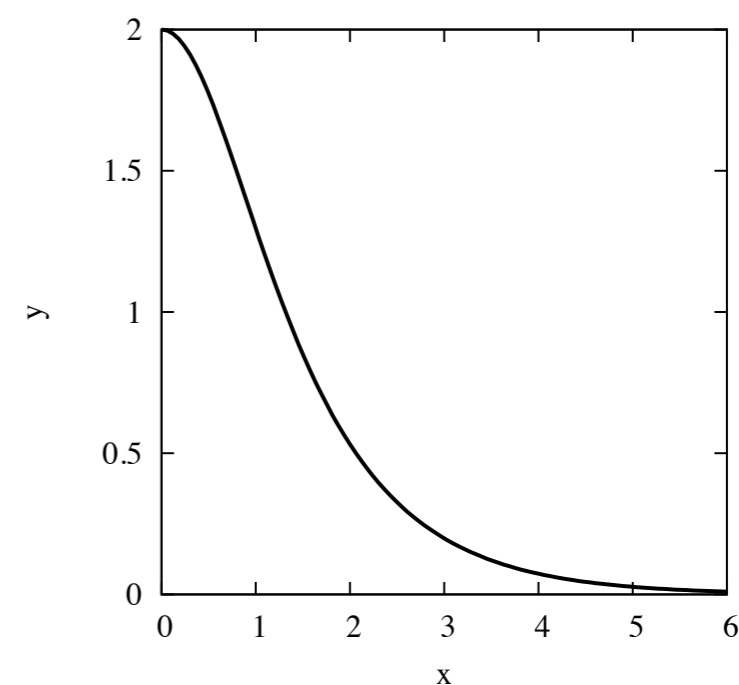
- スタンダードな数値積分法

- 台形公式 (一次式補間), シンプソン公式 (二次式補間), etc

- カットオフ  $c$  の値

- 誤差  $\delta = \int_c^\infty \frac{2}{\cosh x} dx < \int_c^\infty 4e^{-x} dx = 4e^{-c}$

- 例えば  $c = 20$  で誤差は  $8.3 \times 10^{-9}$  以下



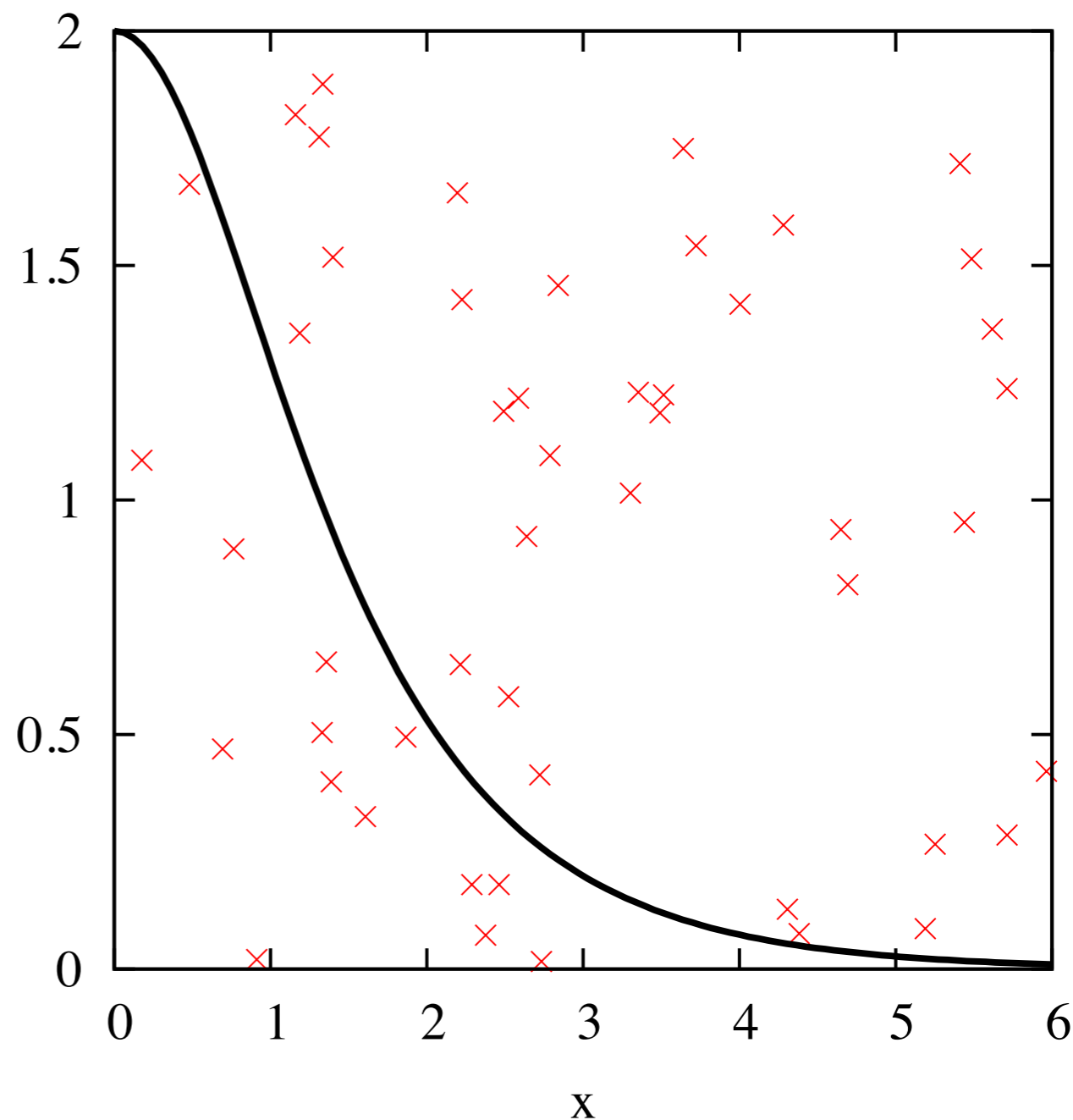


# 単純サンプリング (1) (random sampling)

- $[0,c]$  と  $[0,2]$  の一様分布から二次元上の点  $(x,y)$  を  $M$  組生成
- $f(x)$  の下に入った数  $N$  をカウント

$$\pi \simeq 2c \times \frac{N}{M}$$

M	平均値	誤差
100	4.8	1.3
10000	3.12	0.11
1000000	3.154	0.011
100000000	3.1396	0.0011



# 統計誤差の評価

---

- このモンテカルロ積分が実際に評価している積分

$$\int_0^c \int_0^2 \theta(x, y) \frac{dx dy}{2c} \quad \theta(x, y) = \begin{cases} 2c & \text{if } y < f(x) & \text{成功} \\ 0 & \text{otherwise} & \text{失敗} \end{cases}$$

- 統計誤差の評価

- 試行の成功確率(success probability)  $q \simeq \frac{\pi}{2c}$

- 一回の試行の平均値(mean)  $\mu = 2c \times q + 0 \times (1 - q) \simeq \pi$

- 分散(variance)  $s^2 = (2c)^2 \cdot q + 0^2 \cdot (1 - q) - \mu^2 = 2c\pi - \pi^2 = 4c^2q(1 - q)$

- $c=20$  の時

$$q \simeq 0.0785 \quad s^2 \simeq 116$$

# 統計誤差の評価

---

- M 回の試行のうち N 回成功する確率 ( $\pi$  の見積もり値が  $m=2cN/M$  となる確率)

$$p\left(m = 2c\frac{N}{M}\right) = \frac{M!}{N!(M-N)!} q^N (1-q)^{M-N} \quad \text{二項分布}$$

- 両辺の対数をとってスターリングの公式を使う

$$\log p(m) \simeq \frac{M}{2c} \left( m \log \frac{\pi}{m} + (2c - m) \log \frac{2c - \pi}{2c - m} \right)$$

- $m$  に関して平均値  $\pi$  の周りで二次まで展開

$$\log p(m) \simeq -\frac{M}{2s^2} (m - \pi)^2 + \mathcal{O}((m - \pi)^3)$$

- 分散  $\sigma^2 = \frac{s^2}{M}$  の正規分布 (中心極限定理 central limiting theorem)

- 統計誤差は  $\sqrt{M}$  に反比例して減少  $\rightarrow$  1桁小さくするには100倍の計算が必要

# 円周率の計算の世界記録 (2009年 筑波大)

---

- 2兆5769億桁 (95 Tera Flops 74時間)
- 同じ精度をモンテカルロ積分で実現するためには  $M \sim 100^{10^{12}}$
- 全然無理なので精度10桁に妥協する  $M \sim 100^{10}$
- 現在世界一の「京コンピュータ」(ピーク性能 10 Peta Flops)で仮に 10 浮動数演算で 1 サンプル生成できるとしても

$$\frac{100^{10} \times 10}{10^{16}} \text{ sec} = 10^5 \text{ sec} = 28 \text{ hour}$$

- 一方で、実は 17 分の計算で 9 桁, 10秒の計算で 8 桁 (パソコンで 1 分の計算で 5 桁)の精度が得られている
- $\sqrt{M}$  の立ち上がりは非常に速い



# 円周率の計算の世界記録 (2011年 会社員 近藤さん)

---

- 「長野男性、円周率で10兆桁達成 自作パソコンで」 (共同通信 2011/10/16)
- 同じ精度をモンテカルロ積分で実現するためには  $M \sim 100^{10^{13}}$
- 全然無理なので精度10桁に妥協する  $M \sim 100^{10}$
- 現在世界一の「京コンピュータ」 (ピーク性能 10 Peta Flops) で仮に 10 浮動数演算で 1 サンプル生成できるとしても

$$\frac{100^{10} \times 10}{10^{16}} \text{ sec} = 10^5 \text{ sec} = 28 \text{ hour}$$

- 一方で、実は 17 分の計算で 9 桁, 10秒の計算で 8 桁 (パソコンで 1 分の計算で 5 桁) の精度が得られている
- $\sqrt{M}$  の立ち上がりは非常に速い

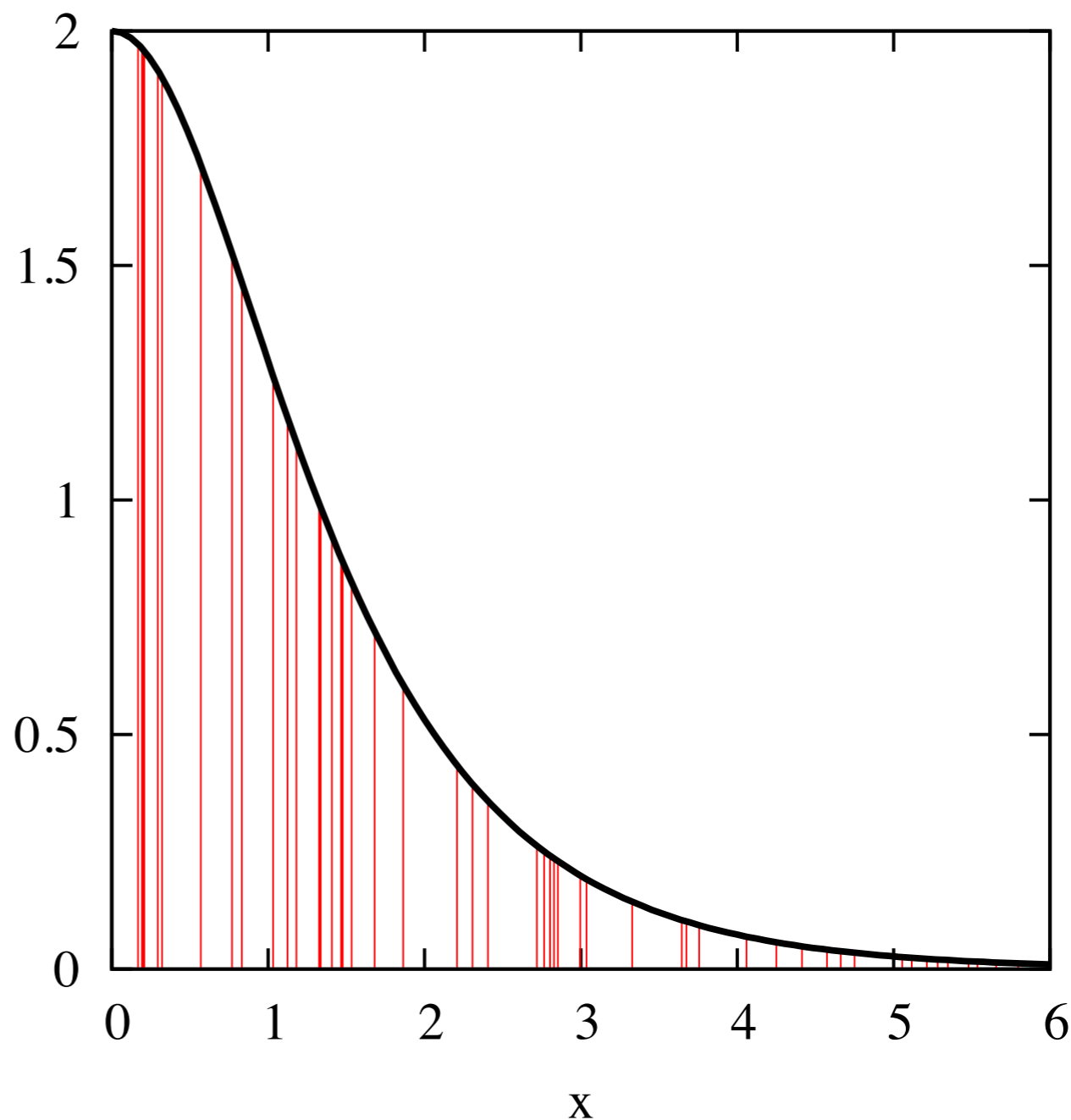
# 単純サンプリング (2)

- $y$  に関してあらかじめ積分
- $[0,c]$  の一様乱数  $x$  を用いて

$$\int_0^c \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx \simeq \frac{1}{M} \sum_i c f(x_i)$$

$$p(x) = \frac{1}{c} \quad \triangleright$$

M	平均値	誤差
100	3.1	0.8
10000	3.00	0.08
1000000	3.147	0.008
100000000	3.1407	0.0008



# 再び統計誤差の評価

---

- 関数  $f(x)/p(x)$  の分散

$$s^2 = \int_0^c \left( \frac{f(x)}{p(x)} \right)^2 p(x) dx - \pi^2 \simeq c \int_0^\infty f^2(x) dx - \pi^2 = 4c - \pi^2$$

- $c=20$  のとき  $s^2 \simeq 70.1$
- 同じ試行回数  $M$  の時, 誤差は  $\sqrt{(70.1/116)} = 0.77$  倍
- もしくは  $M$  を  $116/70.1 = 1.65$  倍したのと同じ効果
- 積分次元は低ければ低いほど良い

# 次元の呪い (curse of dimensionality)

---

- n次元超立方体(1辺の長さ 2, 体積  $2^n$ )に対するn次元単位球の体積の割合

$$q = \frac{\pi^{n/2} / \Gamma(\frac{n}{2} + 1)}{2^n} \sim (\pi/n)^{n/2}$$

n=10 で 0.2%, n=20 で  $10^{-8}$ , n=100 で  $10^{-70}$

- モンテカルロ積分で球の体積を計算しようとする時、標準偏差に対する平均値の割合は指数関数的に小さい

$$\frac{q}{\sqrt{q(1-q)}} \sim \sqrt{q}$$

- 次元が高くなるにつれて指数関数的に大きな M が必要となる
- c.f. 通常の数値積分(台形公式等)でも同様

# 重点的サンプリング

---

- (平均値が同じなら)被積分関数の分散が小さければ小さいほど良い (= 統計誤差が小さい)
- サンプリングの分布  $p(x)$  の形が  $f(x)$  に近い程良い
- $f(x)$  の値が大きい所をより頻繁にサンプリング
  - 重点的サンプリング (importance sampling)

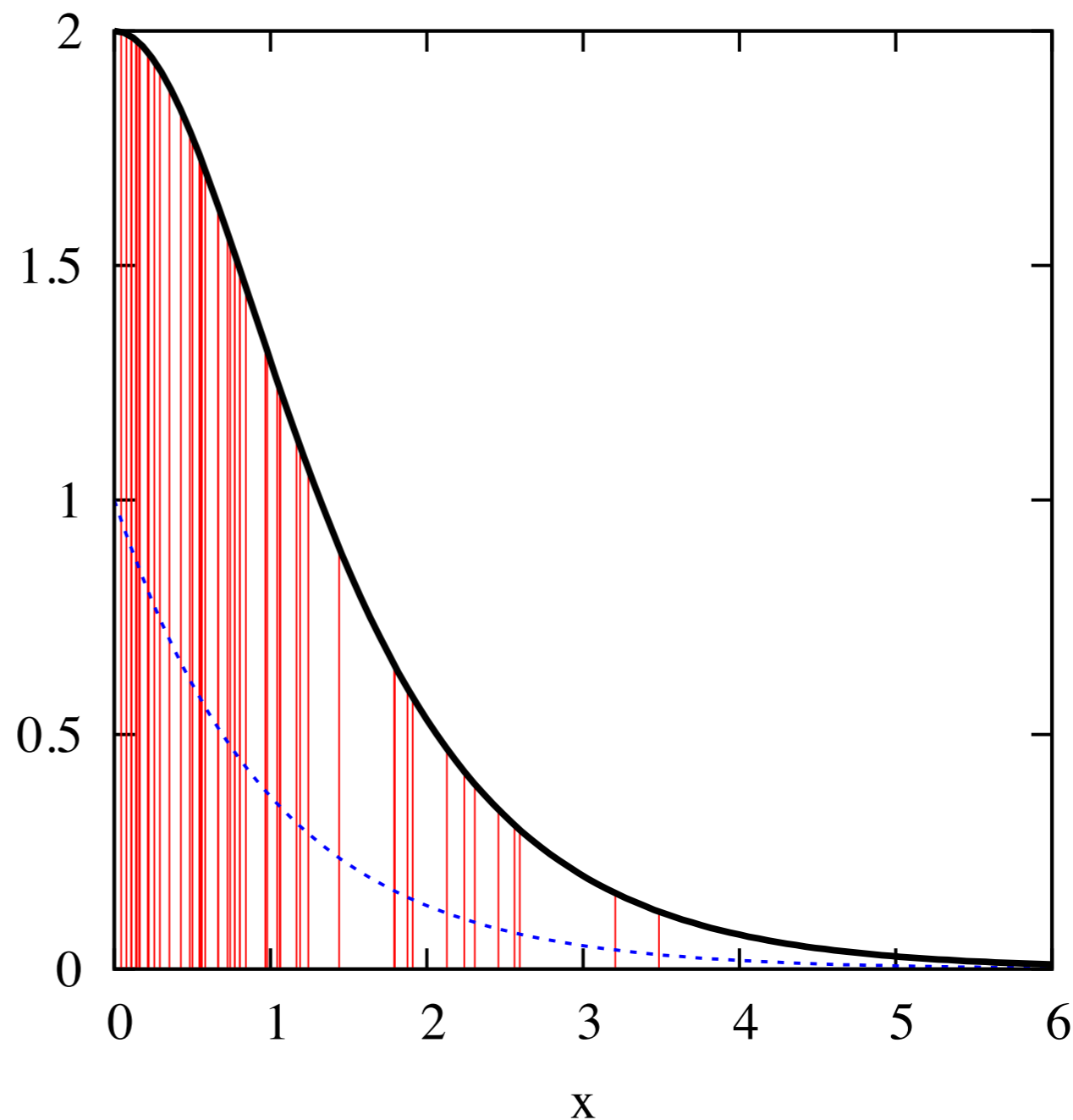


# 重点的サンプリング (importance sampling)

- 積分への寄与が大きな箇所をより重点的にサンプリング

$$p(x) = e^{-x}$$

M	平均値	誤差
100	3.06	0.06
10000	3.142	0.006
1000000	3.1412	0.0006
100000000	3.14164	0.00006



# 統計誤差のサンプル数依存性

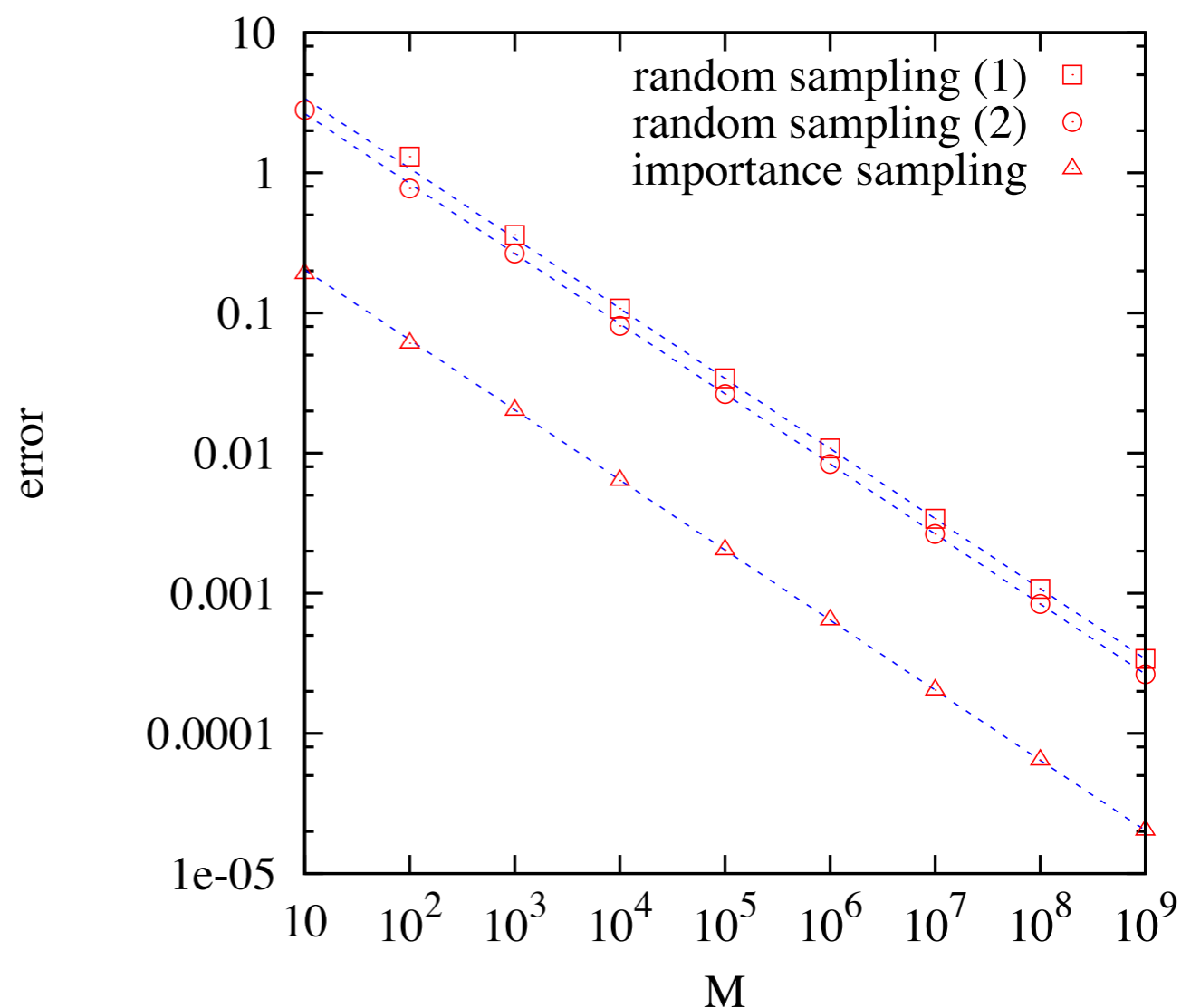
- 関数  $f(x)/p(x)$  の分散

$$s^2 = \int_0^c \left( \frac{f(x)}{p(x)} \right)^2 p(x) dx - \pi^2 \simeq 2(2 + \pi) - \pi^2 = 0.414$$

- 同じ試行回数  $M$  の時, 誤差は

$$\sqrt{(0.414/116)} = 0.06 \text{ 倍}$$

- もしくは  $M$  を **280 倍** したのと同じ



# 重点的サンプリング

---

- 理想的には  $p(x)$  を  $f(x)$  に比例するように取れば良い
- このとき  $f(x) / p(x)$  は定数(分散 0)
  - 1回のサンプリングで厳密な結果が得られる???

- 実際には  $p(x)$  が確率密度となるように規格化条件

$$\int p(x) dx = c \int f(x) dx = 1$$

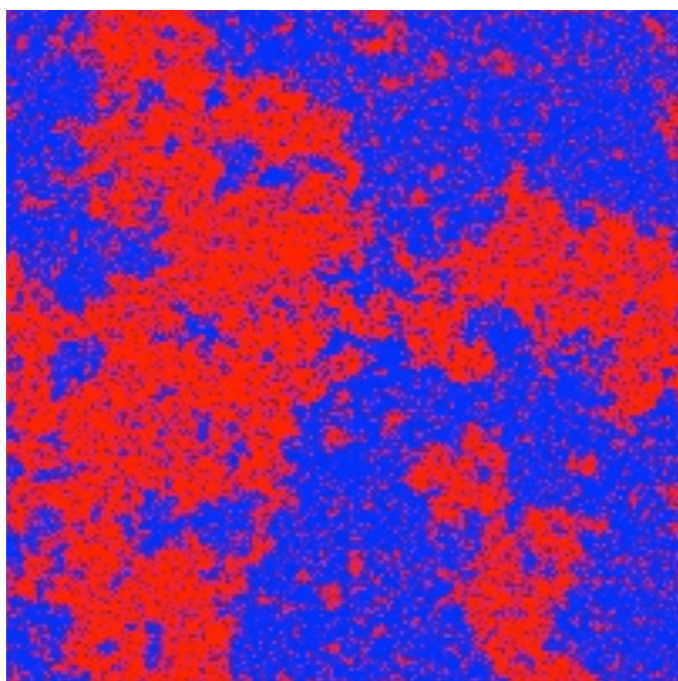
から定数  $c$  を決めておく必要あり

- $c$  は今欲しい答そのもの!

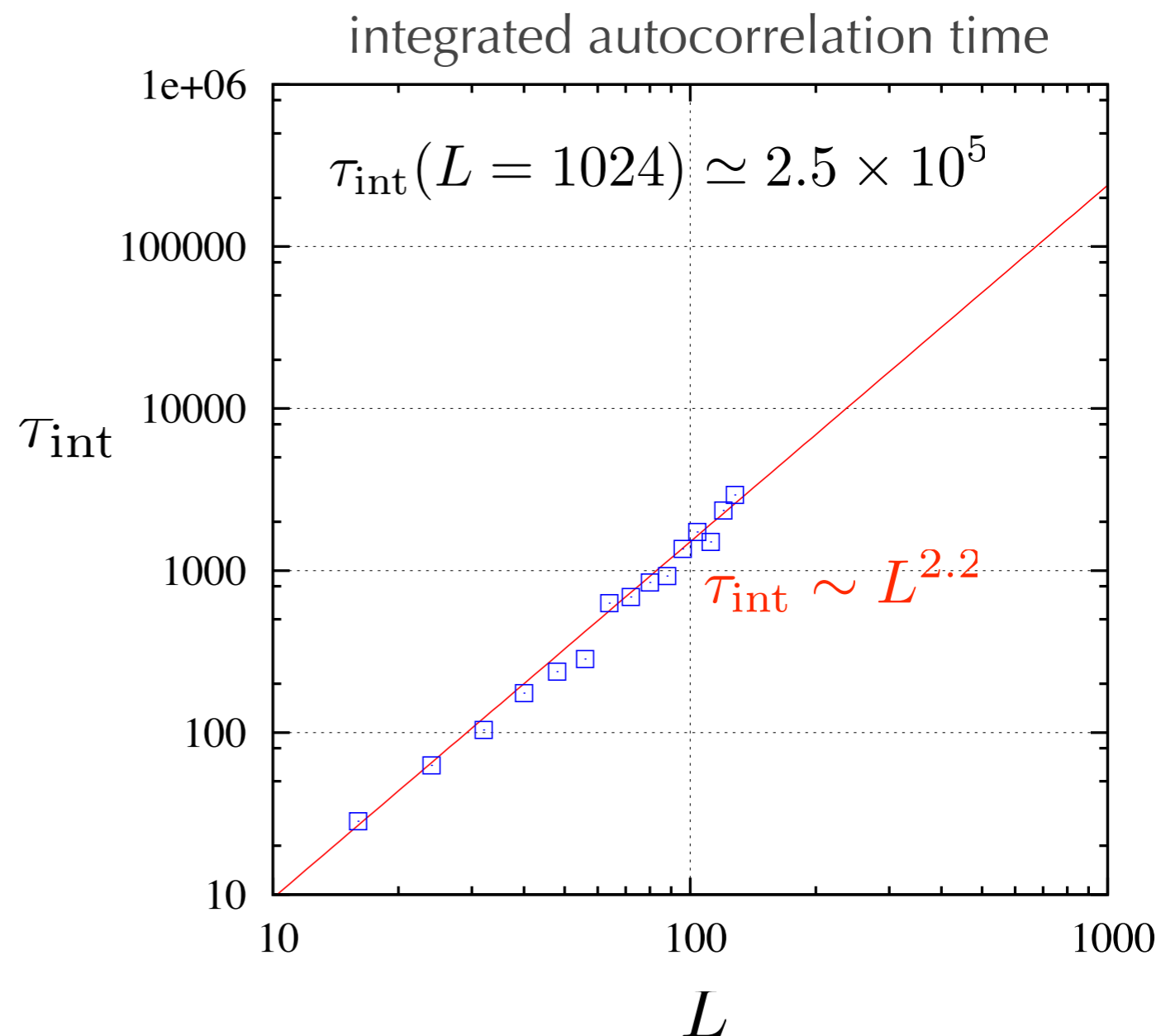
- モンテカルロ法で少し(数秒~1日?)計算してみて統計誤差が大きすぎる場合、それ以上がんばってもあまり意味のある結果は得られない
  - 1年計算しても統計誤差は1/10になるだけ
  - 無闇にMを大きくするより、 $M^{-1/2}$ の前の係数を小さくすることを考える
    - 積分の次元を下げる
    - 重点的サンプリングで被積分関数の分散を小さくする
- マルコフ連鎖モンテカルロ
  - モンテカルロ積分からモンテカルロ平均へ 
$$\frac{\int f(x)p(x) dx}{\int p(x) dx}$$
  - 直前の状態から次の状態を確率的に生成 (サンプル間の相関が生じる)
  - 任意の次元・分布(関数)に従う乱数(状態)の生成
  - ただし正規化定数を知ることは難しい

# 強相関係における緩和問題

- 相転移点の近傍



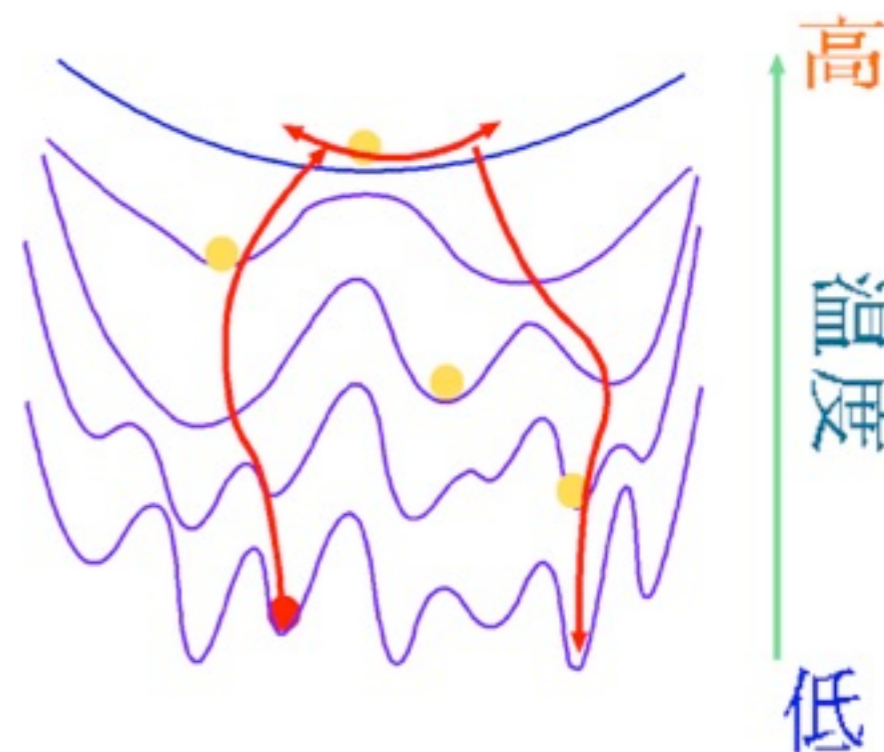
- ドメイン壁のダイナミクス
- 乱れた系における遅い緩和
- 緩和時間が系のサイズとともに発散





# 緩和時間を短くする試み

- 遷移確率のテーブルを最適化する
  - 棄却率の最小化アルゴリズム [Suwa-Todo (2010)]
- 拡張アンサンブル法
  - アンブレラサンプリング、レプリカ交換法、マルチカノニカル法
- 非局所的な更新の導入
  - クラスタールゴリズム、**ループアルゴリズム** [Todo-Kato (2001)]、ハイブリッドモンテカルロ
- 確率過程そのものは変えずに、計算時間を短くする
  - **並列化** [Todo-Matsuo-Shitara (2013)]
  - 長距離相互作用系に対するオーダーN法 [Fukui-Todo (2009)]



# Quantum Mechanics in a Nutshell

---

- 共役な物理量(例: 粒子の位置と運動量)を同時に正確に測定することはできない

不確定性原理 (Uncertainty Principle)

- エネルギー状態は量子化(離散化)される
- 物質の状態は波動関数 (wave function) により確率的に表現される
- 全ての物理量(位置、運動量、etc)は単なる数(c-数)ではなく、演算子(or 行列) (q-数)
- $\hat{p}$  と  $\hat{x}$  は基底の取り方によりその具体的な形は変わる
- $\hat{x}$  がc-数(対角)となる表示を取ると

$$\hat{x} = x \qquad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

- $\hat{p}$  と  $\hat{x}$  は非可換

$$(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})f(x) = -i\hbar x \frac{df}{dx} + i\hbar \frac{d}{dx}(xf(x)) = i\hbar f(x) \qquad [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

- 波動関数はシュレディンガー方程式に従う

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

# 量子調和振動子

- ハミルトニアン

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{K} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{k\hat{x}^2}{2}$$

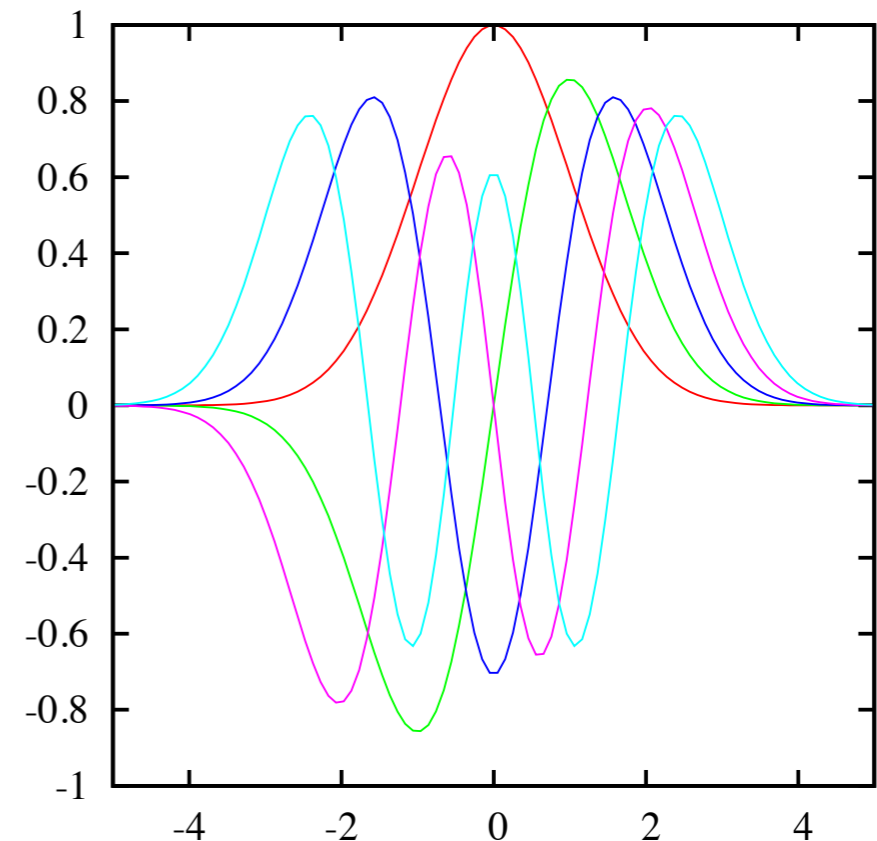
- シュレディンガー方程式

$$\left(-i\hbar\frac{d^2}{dx^2} + \frac{kx^2}{2}\right)\Psi(x) = E\Psi \quad \omega = \sqrt{k/m}$$

- 固有値と固有関数  $\Psi_n(x)$

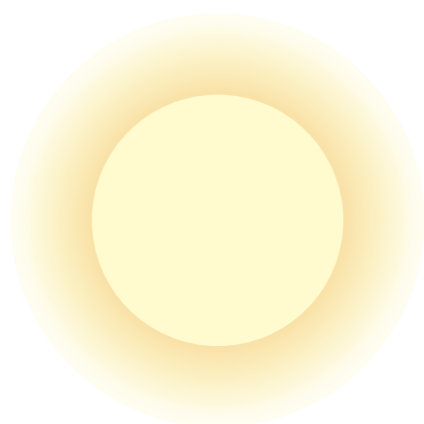
$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (n = 1, 2, \dots)$$

- 絶対零度(最低エネルギー状態)でも有限の幅を持って分布している (零点振動)

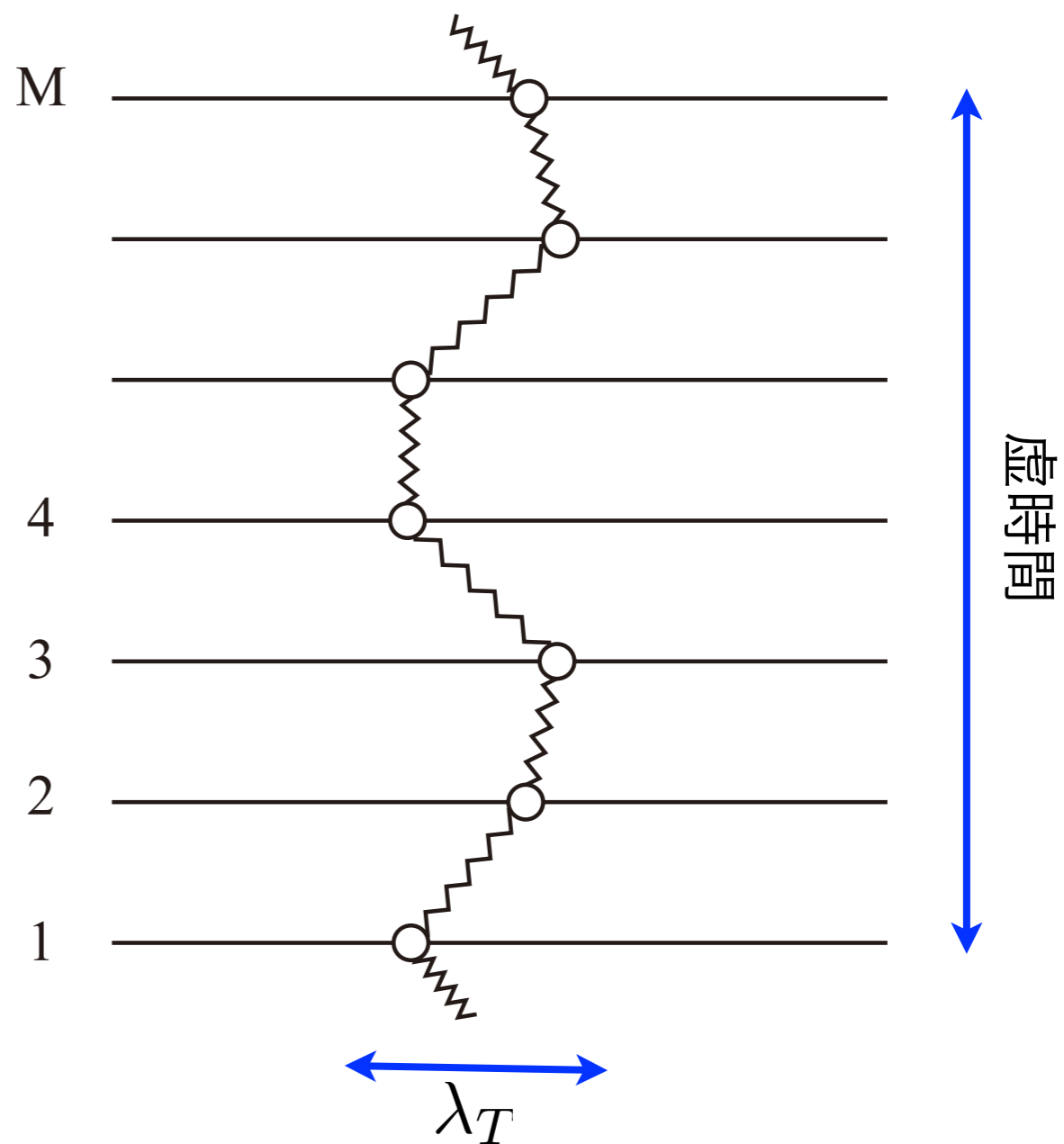


# 虚時間経路積分表示

量子1粒子



古典M粒子 (ポリマー)



# 「量子モンテカルロ法」とは何か？

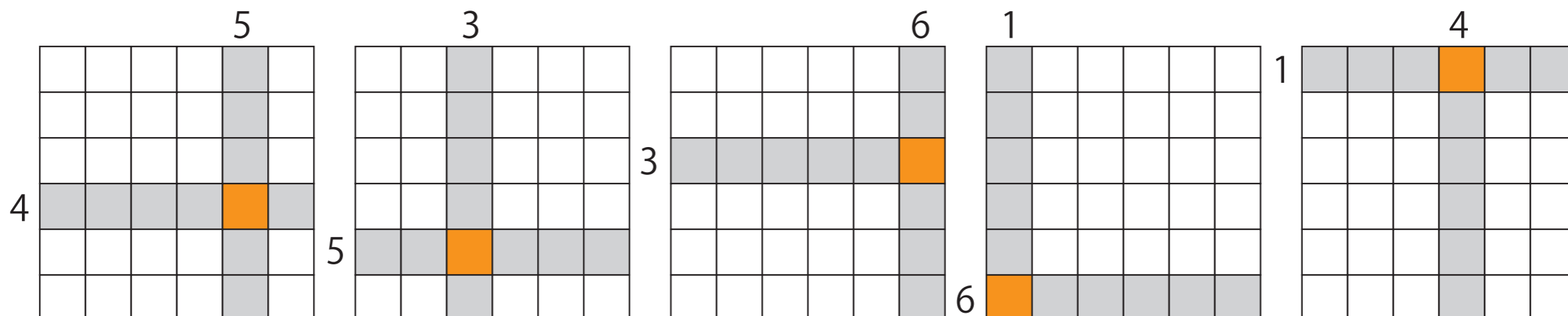
- 次の式を評価したい

$$\langle A \rangle = \frac{\text{tr}[A \exp(-\beta\mathcal{H})]}{\text{tr}[\exp(-\beta\mathcal{H})]}$$

- ただし、H も A も超巨大な行列 (次元  $\sim 10^{10^6}$ )
- テイラー展開の第 n 次の項を考える

$$\text{tr} \mathcal{H}^n = \sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_n} \mathcal{H}_{i_1, i_2} \mathcal{H}_{i_2, i_3} \cdots \mathcal{H}_{i_n, i_1}$$

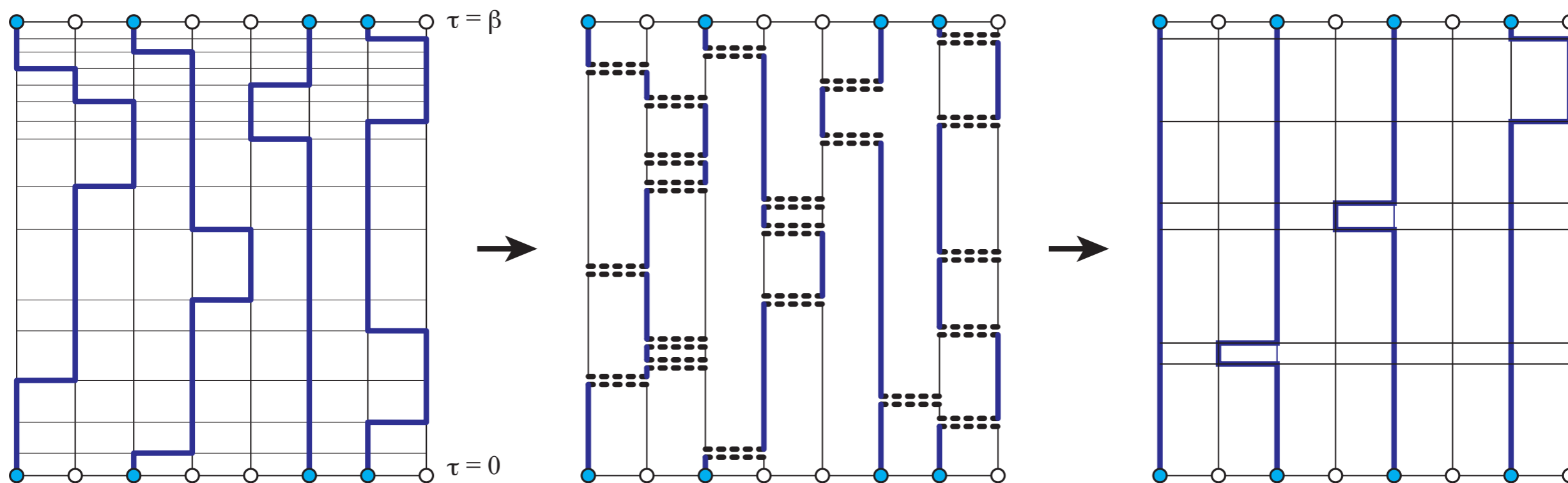
- この中に現われる  $(10^{10^6})^n$  個の項から確率的にサンプリング
- それぞれの項は、ある種の「経路」(path)を表す





# 連続虚時間ループアルゴリズム量子モンテカルロ法

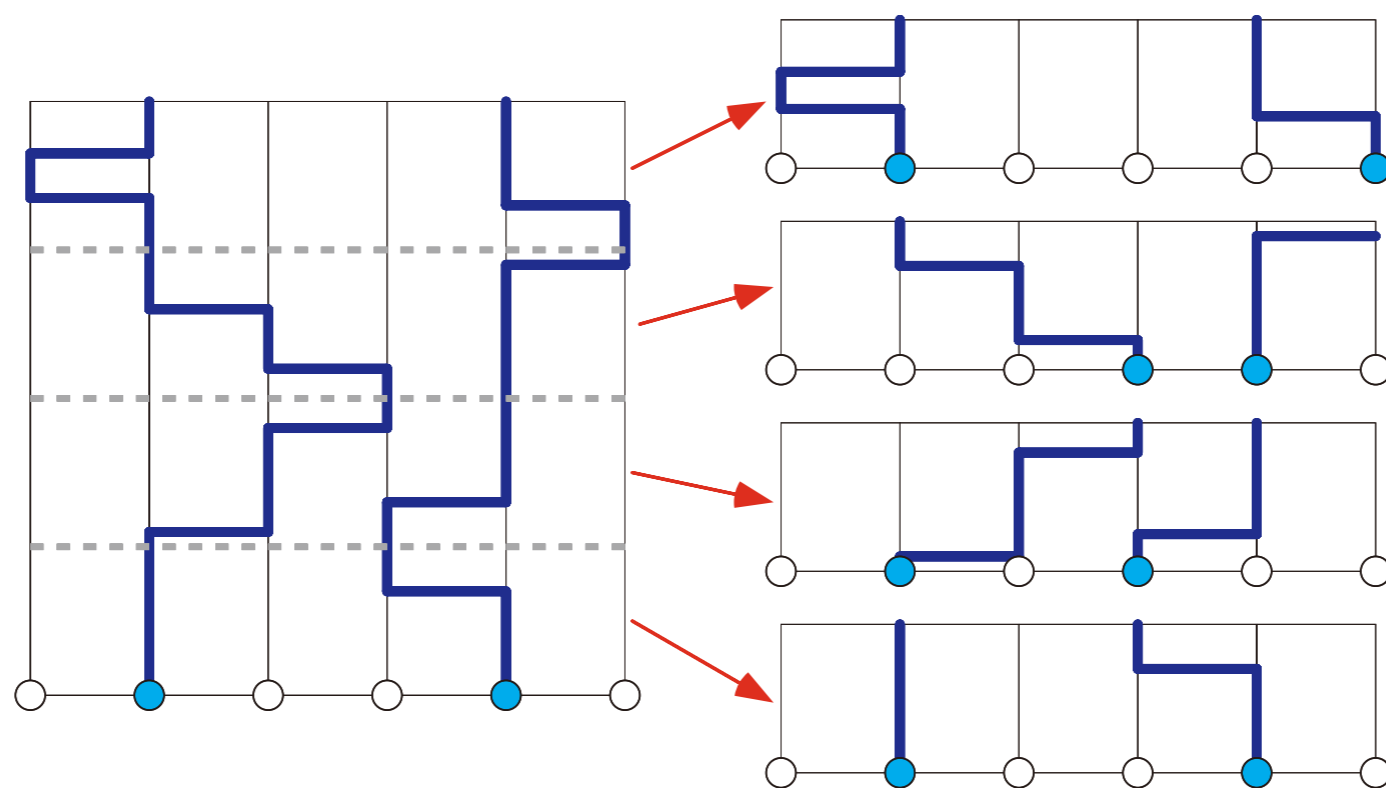
- 虚時間経路積分により  $d+1$  次元古典系に焼き直す (世界線表示)
- クラスタ(ループ)アルゴリズムによる非局所更新 - 緩和は非常に速い



- 実際にプログラムの内部で行っていること
  - 指数分布に従って、一定密度で「横木」を生成
  - Union-Find アルゴリズムを使って、全てのクラスタ(ループ)を認識

# ループアルゴリズムのMPI並列化

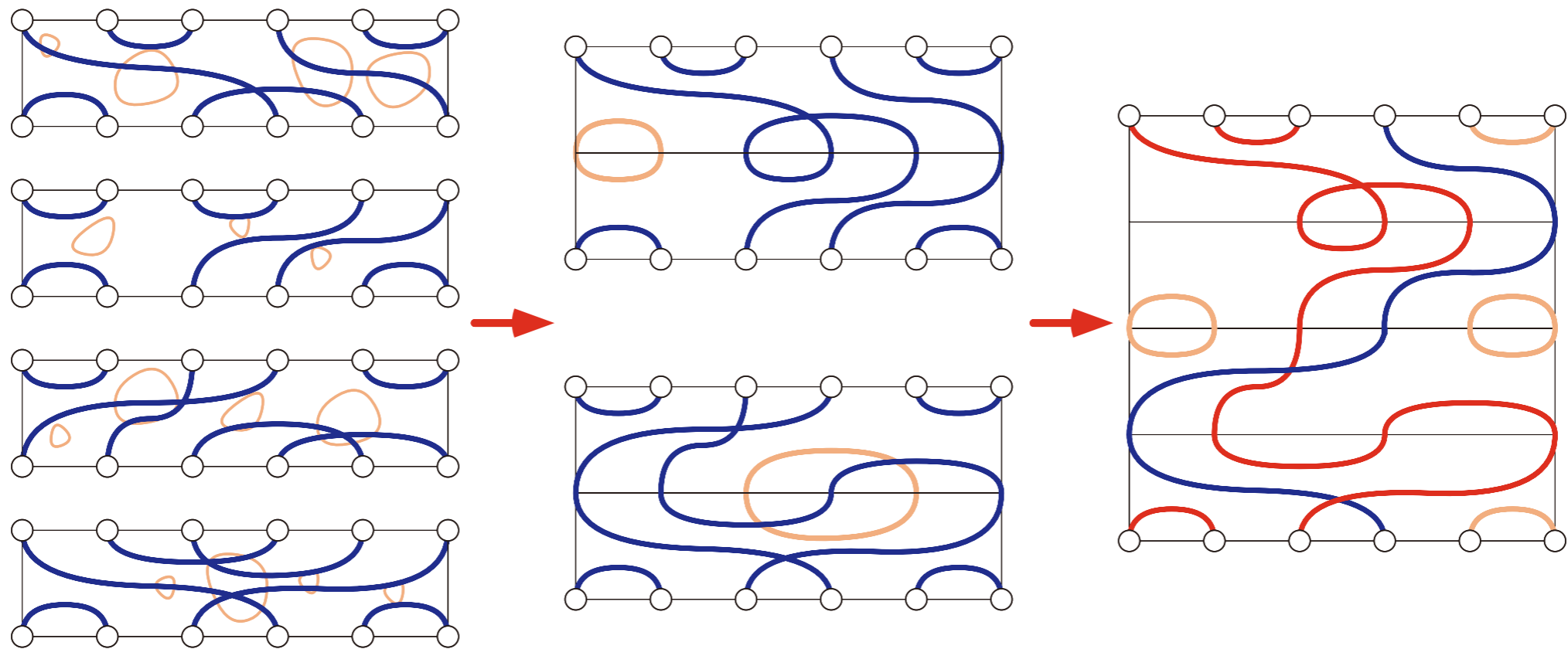
- 世界線の配位をプロセスに分散



- ( $d+1$ )-次元の格子を虚時間方向に同じ「厚さ」をもつ  $N_p$  個のスライスに分割
- 横木の生成は、各プロセスで独立に実行可能

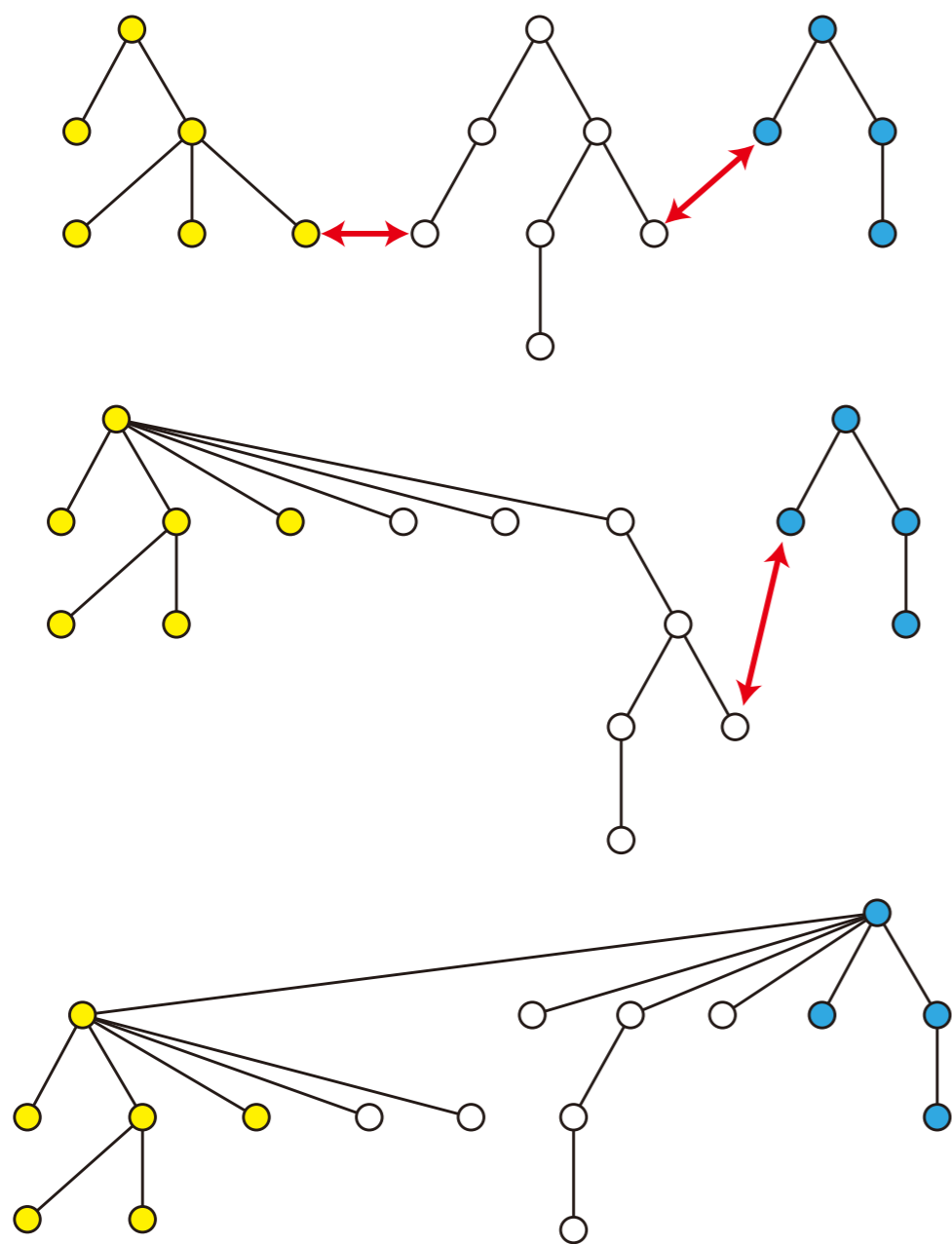
# ループアルゴリズムのMPI並列化

- 二分木アルゴリズムを用いて、クラスタ(ループ)を認識



- 並列化のオーバーヘッド  $(N \log N_p) / \left(\frac{N\beta}{N_p}\right) = N_p \log N_p / \beta$   
(低温では無視できる)

# ノード内のスレッド(OpenMP)並列化

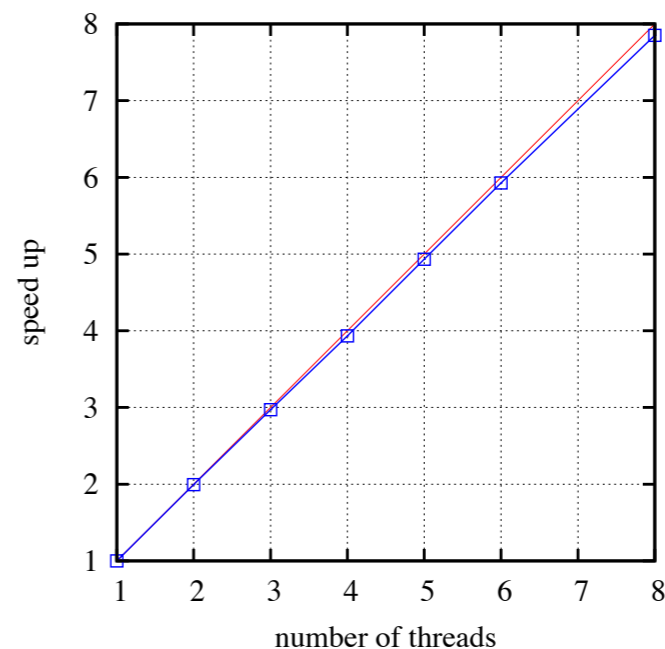


1. ツリーのルートノードを探索

2. 2つのツリーを結合

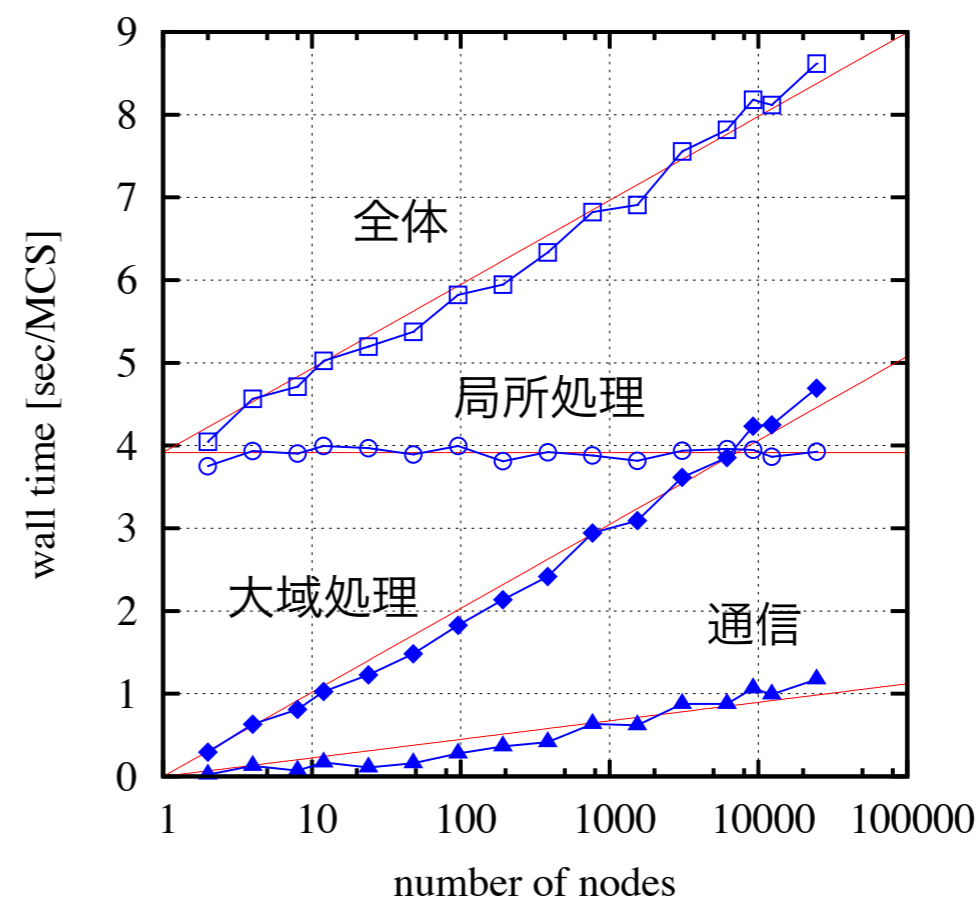
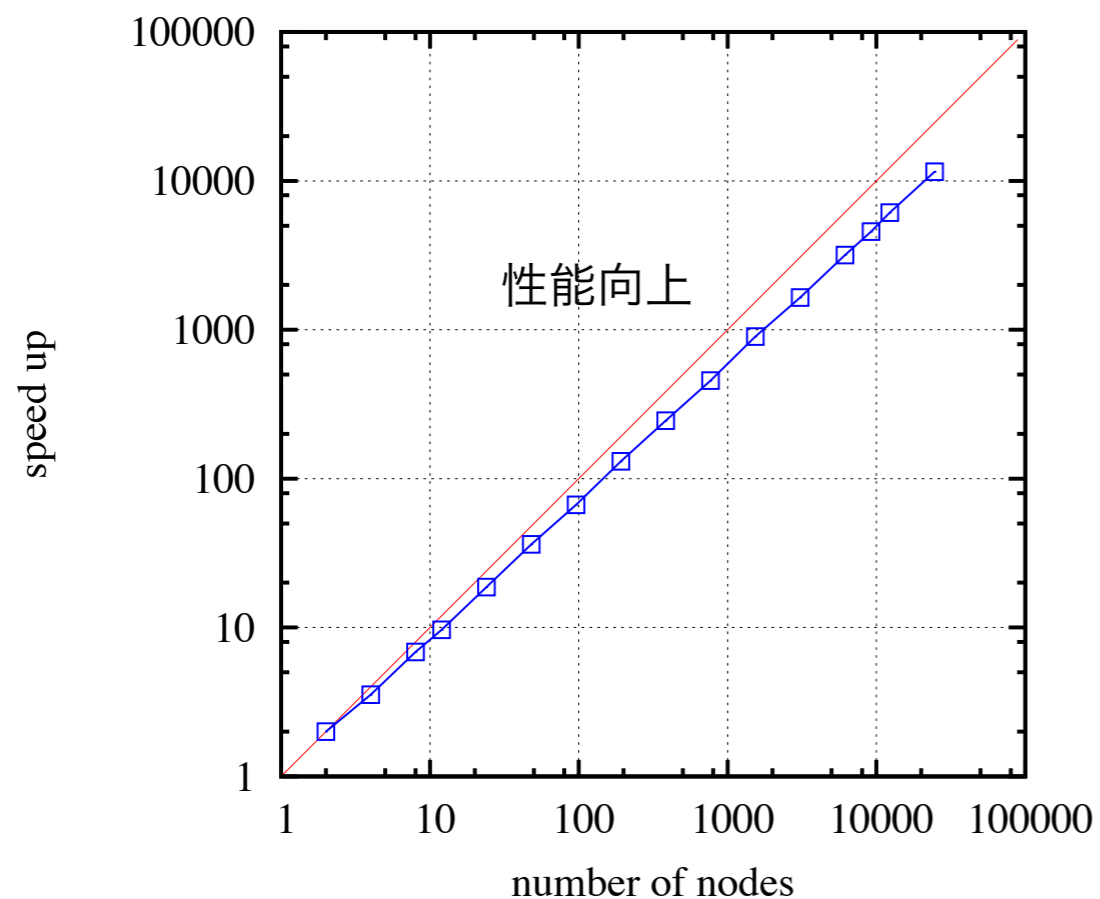
3. 新しいルートへの経路を圧縮

- クラスタ構造全体をロック(omp critical)するのは非常にコストがかかる
- ルート探索と経路圧縮は「スレッドセーフ」
- CAS (compare-and-swap)を使って非同期 wait-free 結合アルゴリズムを実装



# ベンチマークテスト - ループアルゴリズム

- スーパーコンピュータ京におけるウィークスケーリング



- 並列効率：45.6% (24576ノード)
- FLOPS：7.6 TFLOPS (理論ピーク性能の 0.24%)
- MIPS：0.164 PIPS (理論ピーク性能の 10.4%)



# ピーク性能比 対 Time-to-Solution

---

- 「京」全系を用いた計算：1000万スピン系の基底状態
  - 相関長  $\sim 2 \times 10^5$ 、エネルギーギャップ  $\sim 5 \times 10^{-5}$
  - ランダムグラフ中の全ての連結成分の識別問題
    - 頂点・辺の数  $\sim 10^{13}$ 、クラスター数  $\sim 10^{12}$
- Graph500 の “Large”  $\sim$  “Huge” 問題サイズ(メモリ 0.14 $\sim$ 1.1PB)に匹敵
- 従来の局所アルゴリズムでは
  - 並列化効率：ほぼ100%  $\Leftrightarrow$  緩和時間： $L^2 \sim 10^{14}$
- 非局所アルゴリズムによる並列シミュレーション
  - ハイブリッド並列化による高速化： $\sim 10^5$
  - ループアルゴリズムによる高速化： $\sim L^2 \sim 10^{14}$ 
    - $\Rightarrow$  ピーク性能比の低下を考慮に入れても実質的には  $10^{17}$  の高速化

# ソフトウェアの開発と普及

---

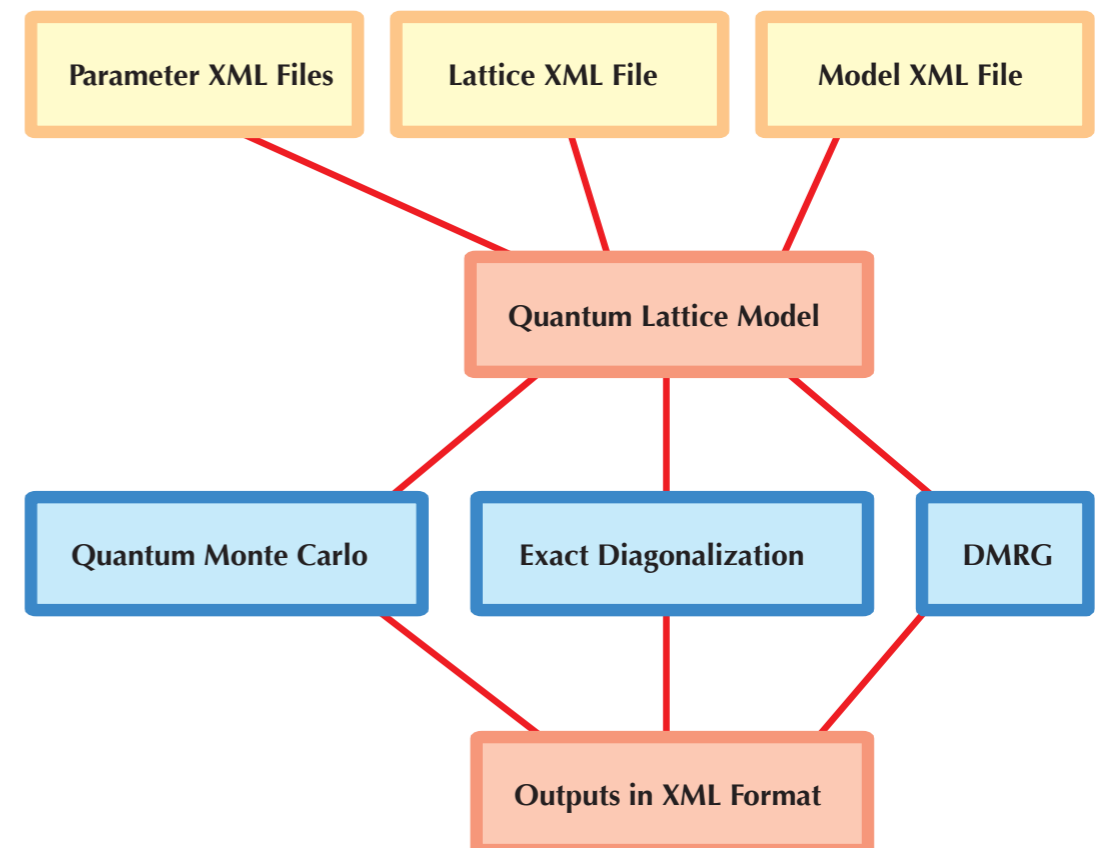
- 世の中には物性物理のための様々なパッケージソフトウェアが存在する
  - 有償：Gaussian、VASP、WIEN2k、
  - 無償：GAMESS、Quantum ESPRESSO、ABINIT、Amber、Gromacs、ALPS、
- 日本国内でも数多くの高性能なソフトが開発・公開されている
  - 小さなグループでこつこつと開発しているソフトが多い
  - 知名度は高くない
  - ドキュメント、宣伝、ユーザインタフェース、ユーザサポートなどの問題
- 開発者から見ると
  - ソフトを開発・公開しただけでは成果にならない (職がない)
  - ドキュメント作成やユーザサポートには時間も手間もかかる
  - 海外の大規模なソフトに対抗するのはしんどい

# ALPS プロジェクト

---

- <http://alps.comp-phys.org/>
- 量子格子模型(量子スピン系、電子系)のための並列シミュレーションソフトウェアパッケージの開発
- 開発物(ライブラリ・アプリケーション)をフリーウェアとして公開
- 様々な模型に対する様々なシミュレーションアルゴリズムの入力・計算結果を

XML 形式で統一的に入出力可能に



# The ALPS project

---

ALPS = **A**lgorithms and **L**ibraries for **P**hysics **S**imulations

- International collaboration for developing **open-source softwares** for simulation of **quantum lattice models**, such as quantum spin systems, electron systems, etc
- **ALPS Libraries** = collection of **generic C++ libraries**
- **ALPS Applications** = collection of application packages using **modern algorithms** such as QMC, DMRG, ED, etc
- **ALPS Framework** = environment for executing large-scale parallel simulations including XML schemas, tools, scheduler, etc

# Target audience

---

- **Experimental physicists**
  - Use “canned codes” to **model materials**
  - **Determine microscopic parameters** by fitting experimental data to simulations
- **Theoretical physicists**
  - **Quick check of theoretical ideas** using many modern algorithms
    - Monte Carlo, Diagonalization, DMRG, ...
    - Also useful for debugging
  - Libraries **simplify and accelerate code development**

# ALPS libraries and applications

---

<b>tools</b>	XML manipulation	GUI	database	
<b>applications</b>	MC	QMC	ED	DMRG
<b>domain-specific libraries</b>	lattice	model	observables	scheduler
<b>numerics</b>	random	ublas	iterative eigenvalue solver	
<b>generic C++</b>	Boost library	graph	serialization	XML/XSLT
<b>C / Fortran</b>	BLAS	LAPACK	MPI	

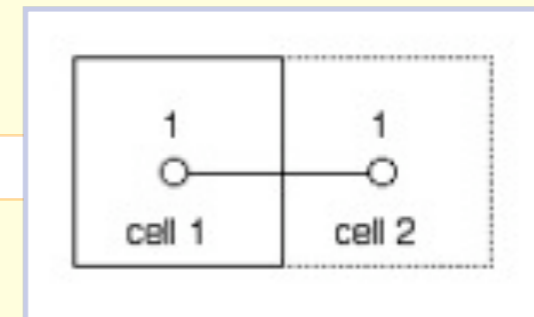


# ALPS Lattice XML

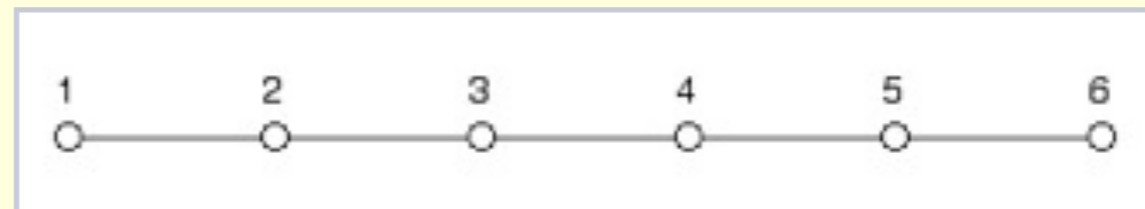
periodic chain with length L

```
<LATTICE name="chain lattice" dimension="1">  
  <BASIS><VECTOR> 1 </VECTOR></BASIS>  
</LATTICE>
```

```
<UNITCELL name="simple1d" dimension="1" vertices="1">  
  <EDGE>  
    <SOURCE vertex="1" offset="0"/><TARGET vertex="1" offset="1"/>  
  </EDGE>  
</UNITCELL>
```



```
<LATTICEGRAPH name = "chain lattice">  
  <FINITELATTICE>  
    <LATTICE ref="chain lattice"/>  
    <PARAMETER name="L"/>  
    <EXTENT size = "L"/>  
    <BOUNDARY type="periodic"/>  
  </FINITELATTICE>  
  <UNITCELL ref="simple1d"/>  
</LATTICEGRAPH>
```



# Model XML for describing Hamiltonian

XXZ spin model with two types of bonds (e.g. nearest and next nearest neighbor interactions)

```

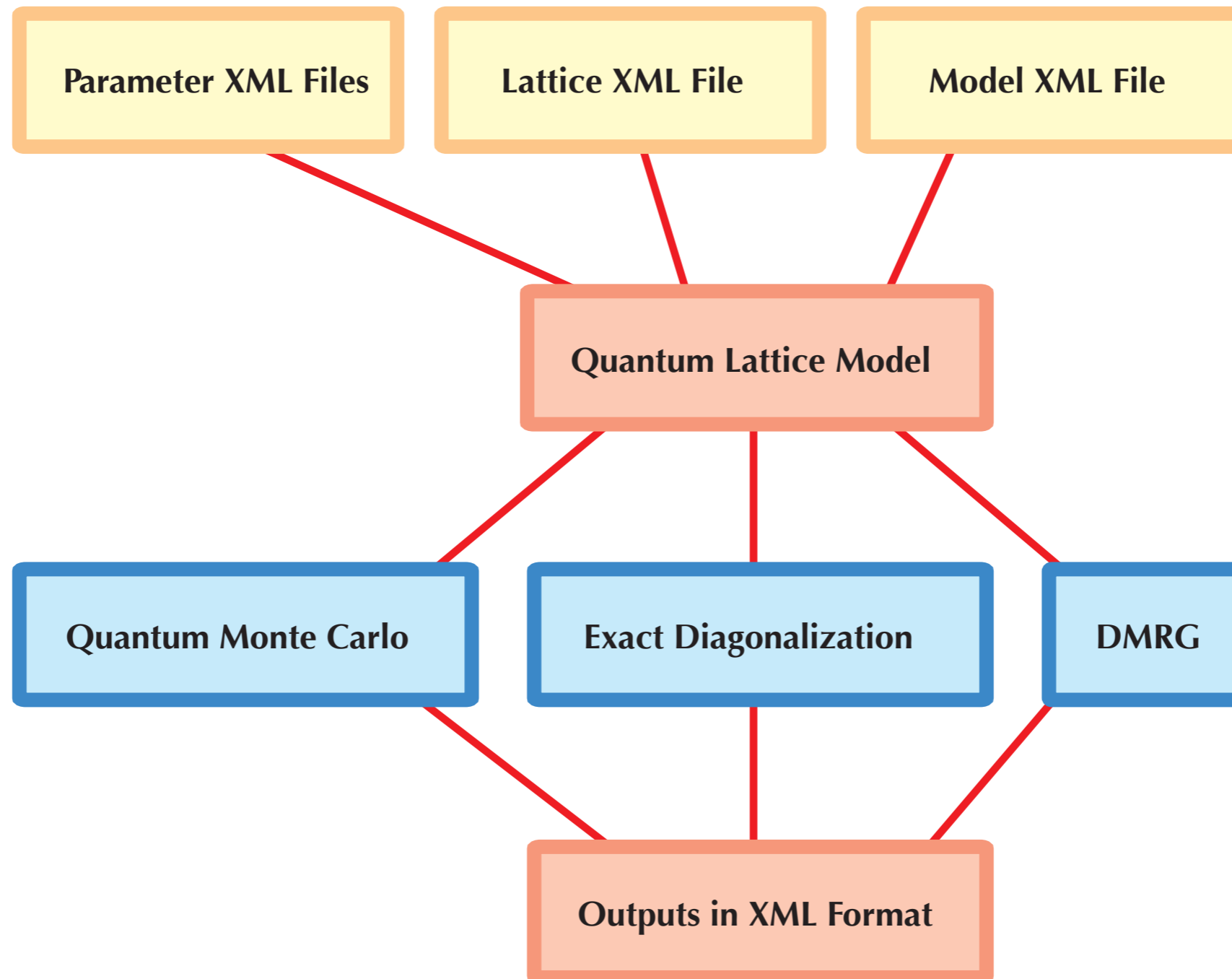
<HAMILTONIAN name="spin">
  <PARAMETER name="Jz" default="J"/>
  <PARAMETER name="Jxy" default="J"/>
  <PARAMETER name="J" default="1"/>
  <PARAMETER name="Jz'" default="J'"/>
  <PARAMETER name="Jxy'" default="J'"/>
  <PARAMETER name="J'" default="0"/>
  <PARAMETER name="h" default="0"/>
  <BASIS ref="spin"/>
  <SITETERM site="i"> -h * Sz(i) </SITETERM>
  <BONDTERM type="0" source="i" target="j">
    Jz * Sz(i) * Sz(j) + Jxy * (Splus(x)*Sminus(y)+Sminus(x)*Splus(y)) / 2
  </BONDTERM>
  <BONDTERM type="1" source="i" target="j">
    Jz' * Sz(i) * Sz(j) + Jxy' * (Splus(x)*Sminus(y)+Sminus(x)*Splus(y)) / 2
  </BONDTERM>
</HAMILTONIAN>

```

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ J_z S_i^z S_j^z + \frac{J_{xy}}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right] - \sum_i h S_i^z$$

# Simulations with ALPS

---



# ALPS Version 2.1

- 2012年5月
- 論文 - JSTAT P05001 (2011)
- <http://alps.comp-phys.org/>

The ALPS project release 2.0:  
open source software for strongly correlated systems

B. Bauer<sup>1</sup> L. D. Carr<sup>2</sup> H.G. Evertz<sup>3</sup> A. Feiguin<sup>4</sup> J. Freire<sup>5</sup>  
S. Fuchs<sup>6</sup> L. Gamper<sup>1</sup> J. Gukelberger<sup>1</sup> E. Gull<sup>7</sup> S. Guertler<sup>8</sup>  
A. Hehn<sup>1</sup> R. Igarashi<sup>9,10</sup> S. Isakov<sup>1</sup> D. Koop<sup>5</sup> P.N. Ma<sup>1</sup>  
P. Mates<sup>1,5</sup> H. Matsuo<sup>17</sup> O. Parcollet<sup>12</sup> G. Pawłowski<sup>13</sup>  
J.D. Picon<sup>14</sup> L. Pollet<sup>11,1</sup> T. Pruschke<sup>6</sup> E. Santos<sup>5</sup>  
V.W. Scarola<sup>15</sup> U. Schollwöck<sup>16</sup> C. Silva<sup>5</sup> B. Surer<sup>1</sup> S. Todo<sup>17,10</sup>  
S. Trebst<sup>18</sup> M. Troyer<sup>1†</sup> M. L. Wall<sup>2</sup> P. Werner<sup>1</sup> S. Wessel<sup>19,20</sup>

<sup>1</sup>Theoretische Physik, ETH Zurich, 8093 Zurich, Switzerland

<sup>2</sup>Department of Physics, Colorado School of Mines, Golden, CO 80401, USA

<sup>3</sup>Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Graz, A-8010 Graz, Austria

<sup>4</sup>Department of Physics and Astronomy, University of Wyoming, Laramie, Wyoming 82071, USA

<sup>5</sup>Scientific Computing and Imaging Institute, University of Utah, Salt Lake City, Utah 84112, USA

<sup>6</sup>Institut für Theoretische Physik, Georg-August-Universität Göttingen, Göttingen, Germany

<sup>7</sup>Columbia University, New York, NY 10027, USA

<sup>8</sup>Bethe Center for Theoretical Physics, Universität Bonn, Bonn, Germany

<sup>9</sup>Center for Computational Science & e-Systems, Japan Atomic Energy Agency, 110-0015 Tokyo, Japan

<sup>10</sup>Core Research for Evolutional Science and Technology, Japan Science and Technology Agency, 332-0012 Kawaguchi, Japan

<sup>11</sup>Physics Department, Harvard University, Cambridge 02138, Massachusetts, USA

<sup>12</sup>Institut de Physique Theorique, CEA/DSM/IPhT-CNRS/URA 2306, CEA-Saclay, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

<sup>13</sup>Faculty of Physics, A. Mickiewicz University, ul. Umultowska 85, 61-614 Poznan, Poland

<sup>14</sup>Institute of Theoretical Physics, EPF Lausanne, CH-1015 Lausanne, Switzerland

<sup>15</sup>Department of Physics, Virginia Tech, Blacksburg, Virginia 24061, USA

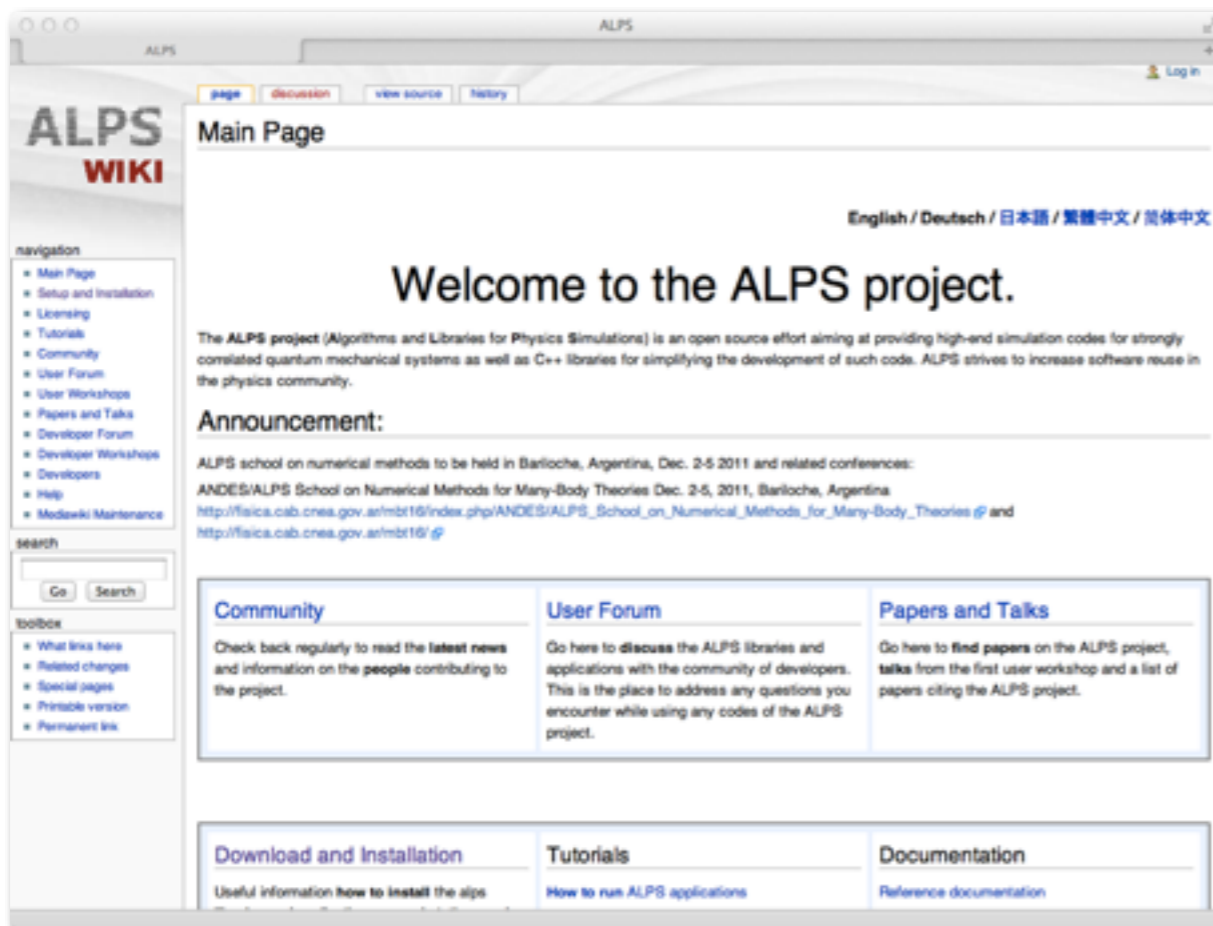
<sup>16</sup>Arnold Sommerfeld Center for Theoretical Physics and Center for NanoScience, University of Munich, Theresienstrasse 37, 80333 Munich, Germany

<sup>17</sup>Department of Applied Physics, University of Tokyo, 113-8656 Tokyo, Japan

<sup>18</sup>Microsoft Research, Station Q, University of California, Santa Barbara, CA 93106, USA

<sup>19</sup>Institute for Solid State Theory, RWTH Aachen University, 52056 Aachen, Germany

<sup>20</sup>Institut für Theoretische Physik III, Universität Stuttgart, Pfaffenwaldring 57, 70550 Stuttgart, Germany



<http://www.iop.org/EJ/abstract/1742-5468/2011/05/P05001>

# ソフトウェアの開発と普及

---

- 世の中には物性物理のための様々なパッケージソフトウェアが存在する
  - 有償：Gaussian、VASP、WIEN2k、
  - 無償：GAMESS、Quantum ESPRESSO、ABINIT、Amber、Gromacs、ALPS、
- 日本国内でも数多くの高性能なソフトが開発・公開されている
  - 小さなグループでこつこつと開発しているソフトが多い
  - 知名度は高くない
  - ドキュメント、宣伝、ユーザインタフェース、ユーザサポートなどの問題
- 開発者から見ると
  - ソフトを開発・公開しただけでは成果にならない (職がない)
  - ドキュメント作成やユーザサポートには時間も手間もかかる
  - 海外の大規模なソフトに対抗するのはしんどい

物質科学シミュレーションのポータルサイト

# MateriApps

<http://ma.cms-initiative.jp/>

⇒ MateriApps



# アプリの横断的な利用、開発を促進するWebサイト



## サイト活用によるメリット

- 利用者の立場から
  - ・利用したいアプリが見つかる！
  - ・アプリの使い方をサポート！
  - ・フォーラムで意見交換、疑問解消！
- 開発者の立場から
  - ・開発・公開をサポート
  - ・開発者の生の声を届ける！

## 機能

- 「やりたいこと」からアプリを検索できるシステム  
検索タグ：対象となる物質・模型、計算手法・アルゴリズム、知りたい物理量・物理現象
- 開発者の声を利用者に届けるアプリ紹介開発者ページの設置 (アプリ最大の魅力、アプリの将来性・応用性 etc.)
- 掲示板を利用した意見交換の促進
- 共同研究・開発を支えるシステム (実装予定)  
Web 上でのバージョン管理・ソースコード開発

お問い合わせ先：ma@cms-initiative.jp

# MateriAppsのソフトウェア (2013/09/28現在)

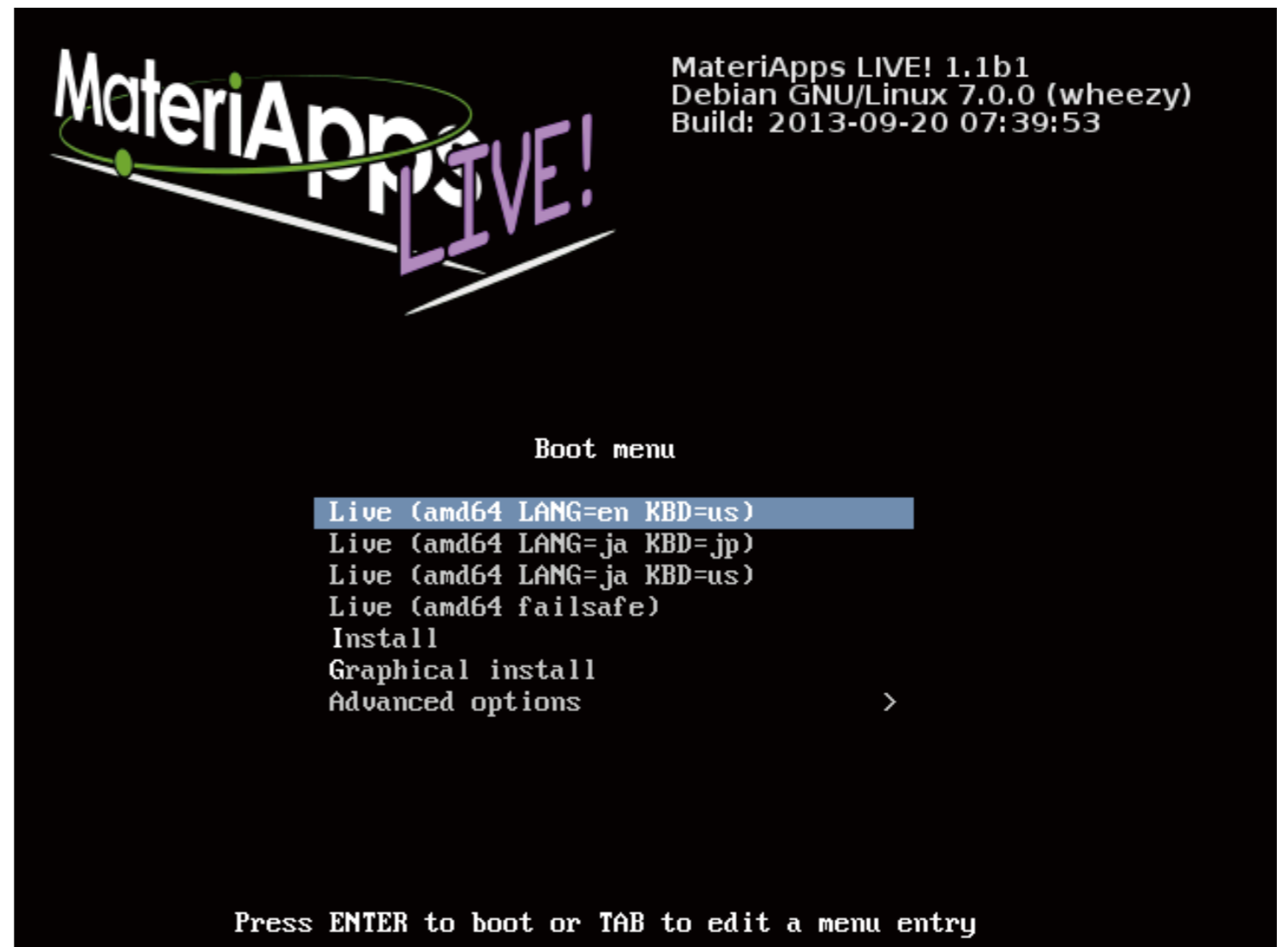
- 第一原理計算 (DFT)
  - 計17ソフトウェア
- 量子化学計算 (HF近似、CI法、CC法)
  - 計 4ソフトウェア
- 分子動力学法
  - 計 8ソフトウェア
- 格子模型 (QMC, DMRG, ED等)
  - 計 9ソフトウェア
- 2013年度中に100以上に拡充予定



# MateriApps LIVE! - <http://cmsi.github.io/MateriAppsLive/>

---

- USBメモリから直接ブートできる Linux システム (Debian Live)
- MateriAppsで紹介している公開ソフト・ツールがあらかじめインストールされている
- Windows、Macなどで利用可
- 2013年9月末 ver. 1.1 公開
  - MateriApps サイトで配布
  - 学会・アプリ講習会でも配布予定



# おわりに

---

- 物質科学におけるシミュレーションとアルゴリズム
- モンテカルロの原理と量子モンテカルロ法
  - アルゴリズムの発展 >> 計算機の発展
  - グラフアルゴリズムなどの非浮動小数点数演算の重要性
  - ピーク性能比 対 Time-to-Solution
- コミュニティコード開発・普及の必要性
  - MateriApps による開発者・利用者支援