第１回 CMSI 人材育成シンポジウム
「応用数理と計算科学の連携Ｉ」

日時：２０１２年１１月３０日(金)

場所：基礎工学研究科 G217

主催　大阪大学ナノサイエンスデザイン教育研究センター、
　　計算物質科学イニシアティブ(CMSI)
　（文部科学省 HPCI 戦略プログラム分野２「新物質・エネルギー創成」）

共催　名古屋大学計算科学連携教育研究センター

９月２７日から京コンピュータが共用開始となり、これを十分活用した計算科学を推進していく中、計算科学において開発されるコードの高速化、大規模化などのさらなる改良を目指して各研究者が取り組んでいます。しかし、その過程で数値計算そのものの様々な困難に直面することが少なくありません。それらの問題は、実は数値計算などの応用数理の分野で専門的に取り組んでいる研究者が少なからずいて、様々なブレイクスルーとなるアイデアを提案されている場合がいくつもあります。残念ながらこれまでは両者が出会う場面がなく、分野間でも交流はごく一部の研究者同士のつながりに頼っていました。

本シンポジウムでは、そのような異分野で研究を進めながら同じテーマに違う方面から関心を持って取り組んでいる研究者が出会い、新しい発展の方向性を模索する機会になることを願って企画いたしました。

<u>講演者</u>

１３：２０－１３：３０　下司雅章（阪大ナノセンター）「趣旨説明」

１３：３０－１４：００　丸山勲（阪大基礎工）

「テンソルを用いた量子スピン系の厳密解と数値計算法」

量子スピンは大きさが S=1/2 であれば、アップかもしくはダウンの状態の２自由度（１ビット分）しか取り得ない。このスピンが N 個あるスピン系を考えた場合、イジング模型などの古典系ならば、状態は N ビットで指定される事になる。しかし、一般の量子系では、波動関数の重ね合わせのために、状態の記述には 2^N 次元のベクトルが必要になる。この巨大な次元を持つ波動関数の表現として、小さなテンソルを多数用いる方法が古くから用いられてきた。最も簡単な行列積状態と呼ばれる波動関数の表現法は、AKLT 模型の厳密解[1]では古くから用いられていたが、S=1/2 XXZ 模型では最近になってようやく厳密解が行列積状態として書かれる事が導かれた[2] 。さらに近年の数値計算では、より一般的なテンソルネットワーク状態が注目され、我々もその性質を調べている[3]。今回の発表では、それぞれのテンソルが、スピン間の関係性（エンタングルメント）と関連している事を紹介しながら、我々の数値計算[3]上のボトルネックについて議論したい。

[1]Klumper, et.al., J Phys. A. 24. 955 (1991)
[2]H.Katsura, I. Maruyama,J. Phys. A, 43. 175003(2010)[3]M.Orii, H.Ueda, I.Maruyama, J. Phys. Soc. Jpn. 81. 043001 (2012)

〃　上田宏（理研）

「テンソル積状態の最適化―テンソル分解手法への期待―」

大規模な量子多体系の振る舞いを記述するハミルトニアン行列の、基底エネルギーに相当する最低固有値と、それに対応する基底状態（固有）ベクトルを数値的に求める場合、計算機資源の制限からしばしば厳密に解くことは困難で、適切な近似手法を導入しなければならない。

系が１次元的な場合、有限次元の行列積で基底状態ベクトルの要素を近似的（もしくは厳密）に与える行列積状態（MPS）ベクトルと、その最適化手続きとなる密度行列繰り込み群（DMRG）や

Time-evolving block decimation (TEBD) が極めて強力であった。これらの近似精度は、その手続き中にたびたび現れる特異値分解による行列の近似精度で決定される[1]。
より高次元系では、基底状態ベクトルの近似に、MPS ベクトルの拡張となるテンソル積状態（TPS）ベクトルを利用することが有望視されており、その最適化手続きは現在多くの研究者によって研究が進められている[2]。TEBD の素直な拡張に従えば、特異値分解の高次元版となるテンソル分解法によるテンソル近似を利用した最適化アルゴリズムが考えられるが、そのような最適化アルゴリズムが報告された例はない[3]。
本発表では、特に２次元正方格子上の TPS に注目して、テンソル分解法によるテンソルの近似精度が、固有ベクトルの近似精度を直接決定する最適化アルゴリズムについて提案・議論したい。
[1] MPS 全般のレビュー論文として：U Schollwöck: Ann. Phys. (N. Y.) **326** (2011) 96.
[2] 例えば：Z.-C. Gu *et al.*: PRB **78** (2008) 205116; J. Jordan *et al.*: PRL **101** (2008) 250602; R. Orús and G. Vidal: PRB **80** (2009) 094403.
[3] テンソルの縮約の近似にテンソル分解法が使われた論文はある：Z. Y. Xie *et al.*: PRB **86** (2012) 045139.

１４：００－１４：３０　冨岡亮太（東大情報）

「凸最適化に基づくテンソル分解アルゴリズム」

CP（CANDECOMP/PARAFAC）分解や Tucker 分解は NMR データや心理学データの解析を起源として今ではバイオインフォマティクスやウェブマイニングなど多様なデータ解析に利用されている。本発表ではこれらの分解の基本的な性質や、行列の特異値分解との類似点／相違点についてレビューしたあと、凸最適化に基づく自動的なランク決定法や部分観測からのテンソルの復元などの講演者の最近の研究を紹介する。

１４：３０－１５：００　Break

１５：００－１５：３０　安食博志（阪大光科学センター）

植本光治（阪大基礎工）

「半導体微細構造の有限要素法による電磁界解析：数値解法における問題点」

金属ナノ粒子に光を照射すると、表面プラズモンの共鳴励起により粒子の端面近傍で光電場が著しく増強することが知られている。この増強した光電場を用いることで単一分子レベルの原子振動を観測することができ、分子の超高感度分析が可能になる。また、微弱な光でも高効率な光化学反応が起きるなど、様々な応用が期待されている。光電場の増強度は金属ナノ粒子の形状や配置に依存するため、金属ナノ粒子の形状は FDTD をはじめとした電磁界解析シミュレーションで設計されている。
我々は半導体ナノ粒子による光電場増強効果を調べるため、任意形状に閉じ込められた励起子共鳴散乱の計算手法を有限要素法に基づいて開発した。励起子は縦と横の分極波モードを含み、励起子効果を含む誘電関数は振動数と波数の両方に依存する。そのため、FDTD を含む従来の電磁界解析シミュレーションはそのまま適用することができない。新たに開発した手法では、通常の有限要素法と同様に大規模な連立一次方程式を数値的に解く必要がある。一般に、有限要素法では非ゼロ要素の少ない疎行列が生成されるため、共役勾配法などの反復解法が非常に有効に働くことが知られている。ところが、本計算手法で扱う要素マトリクスでは反復法　の収束性が極めて悪く、連立一次方程式を解くために直接法に頼らなければならない
本講演では、半導体ナノ粒子による光電場増強効果について概観し、我々の開発した励起子共鳴電磁界解析シミュレーション手法について述べる。

１５：３０－１６：００　岩下武史（京大学術情報メディアセンター）

「高周波電磁場有限要素解析から生ずる連立一次方程式の性質とその高速解法」

高周波数領域での電磁場有限要素解析において生ずる連立一次方程式において，係数行列が不定かつ悪条件であることが知られている．このため，反復法により 当該の連立一次方程式を解く場合，一般的

な方法, 例えば ILU 分解前処理付きクリロフ部分空間反復法では十分な収束性が得られない場合が生ずる．本問題に 対する対処法として，ハイブリッドスムーザや AFW スムーザ，あるいはベクトルポテンシャルとスカラポテンシャルの両方を用いた定式化を利用することが知られている．本講演では，高周波電磁場有限要素解析から生ずる係数行列が持つ悪条件性や不定性の主たる要因を説明し，上記に挙げた対処法との関連性について述べる．また，AFW スムーザの並列化手法とそれを利用したマルチグリッド法により大規模解析を実現した事例について簡単に紹介する．

参考論文

[1] T. Iwashita et al., “Large-scale time-harmonic electromagnetic field analysis using a multigrid solver on a distributed memory parallel computer”, Parallel Computing, Vol. 38, Issue 9, Sep., 2012, pp. 485-500.

１６：００－１６：３０　山本有作（神戸大情報）

「計算物理学者と数値解析研究者の共同によるアルゴリズム開発の事例」

計算物理の研究者は大規模な問題を高速・高精度に解けるアルゴリズムを求めており，数値解析の研究者はアルゴリズム研究に関する新しい種を探している。したがって，両者の共同研究は双方にとってメリットが大きいはずである。本発表では，計算物理の研究者と数値解析の研究者の協力により新しいアルゴリズムが生まれた事例を 2 つ紹介する。一つは，物性物理におけるグリーン関数の，シフト線形方程式に基づく効率的な計算法であり，もう一つは，乱流におけるスケーリング指数の計算に現れる大規模非線形固有値問題の解法である。これらの解法は，従来解けなかった規模の問題を解くことを可能とした。発表では, 時間があれば, 共同研究の成功にとって重要なポイントは何かについても考察したい。

１６：４０－　　懇親会

なお、本シンポジウムの模様はテレビ会議システムを通じて名古屋大学と東京大学、金沢大学に配信されます。

問い合わせ先

ナノサイエンスデザイン教育研究センター　下司雅章　geshi@insd.osaka-u.ac.jp 内線６３４２

以上