

物性物理におけるモンテカルロ法とその大規模化

藤堂真治

東京大学物性研究所 計算物質科学研究センター

wistaria@issp.u-tokyo.ac.jp



powered by ALPS
<http://alps.comp-phys.org/>

Acknowledgment

- 松尾春彦 (現 RIST), 設楽秀之 (富士通)
 - 諏訪秀磨 (現 Boston University), 本山裕一, 安田真也 (東大院工)
 - 川島直輝, 富田祐介, 渡辺宙志, Jie Lou (現 復旦大学), 正木晶子 (東大物性研), 鈴木隆史 (兵庫県立大), 原田健自 (京大), 坂倉耕太 (NEC)
 - Matthias Troyer (ETH), 五十嵐亮 (物性研), 他 (ALPS Collaboration)
-
- 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発
 - HPCI戦略プログラム(SPIRE) 分野2 <新物質・エネルギー創成> (CMSI)
 - 理研計算科学研究機構(AICS) 「京」試験利用

分野2「新物質・エネルギー創成」
計算物質科学イニシアティブ
Computational Material Science Initiative (CMSI)

戦略機関（代表 物性研）

分子科学研究所

物性研究所

金属材料研究所

協力機関（11機関）

産官学連携（2機関）

・産総研
・物材機構

教育（9機関）

・豊橋技科大
・総研大
・名古屋大学
・神戸大学
・京都大学
・金沢大学
・大阪大学
・東京大学
・東北大学

分子科学

物性科学

材料科学

戦略目標

計算物質科学：基礎科学の源流から 物質機能とエネルギー変換を操る奔流へ

戦略課題

第2部会

次世代先端 デバイス科学

量子論で切り開く
次世代デバイスの
ブレークスルー

第4部会

エネルギー 変換

次世代エネルギー技術の基盤
となる物質機能性の探索

第3部会

分子機能と 物質変換

ナノスケールの分子・分
子集団系の構造形成と
機能発現、機能制御

第1部会

新量子相・新物質の 基礎科学

計算基礎科学と革新手法から湧き出す潮流：
量子概念・量子機能の解明・予測・設計

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)

Why quantum lattice models?

- QLM: quantum spin models, bosonic Hubbard models, etc
- Effects of **strong correlations** in **multi-degree-of-freedom** systems

- various types of **long-range order**
- quantum disordered phase
(**quantum liquids**, spin gap phases)

$$\mathcal{H} = \frac{J^{xy}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + J^z \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z$$

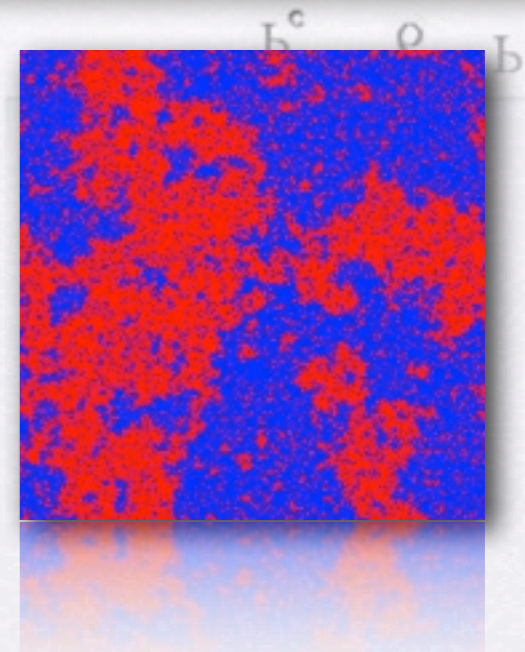
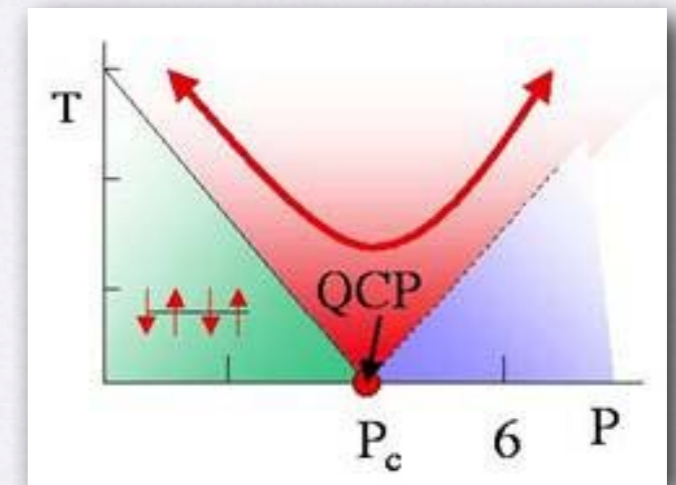
- phase transitions and critical phenomena
 - 1st order transitions, continuous phase transitions, **quantum critical point**

- **Universality**

- depends on few parameters: dimensionality, symmetry of order parameter, etc

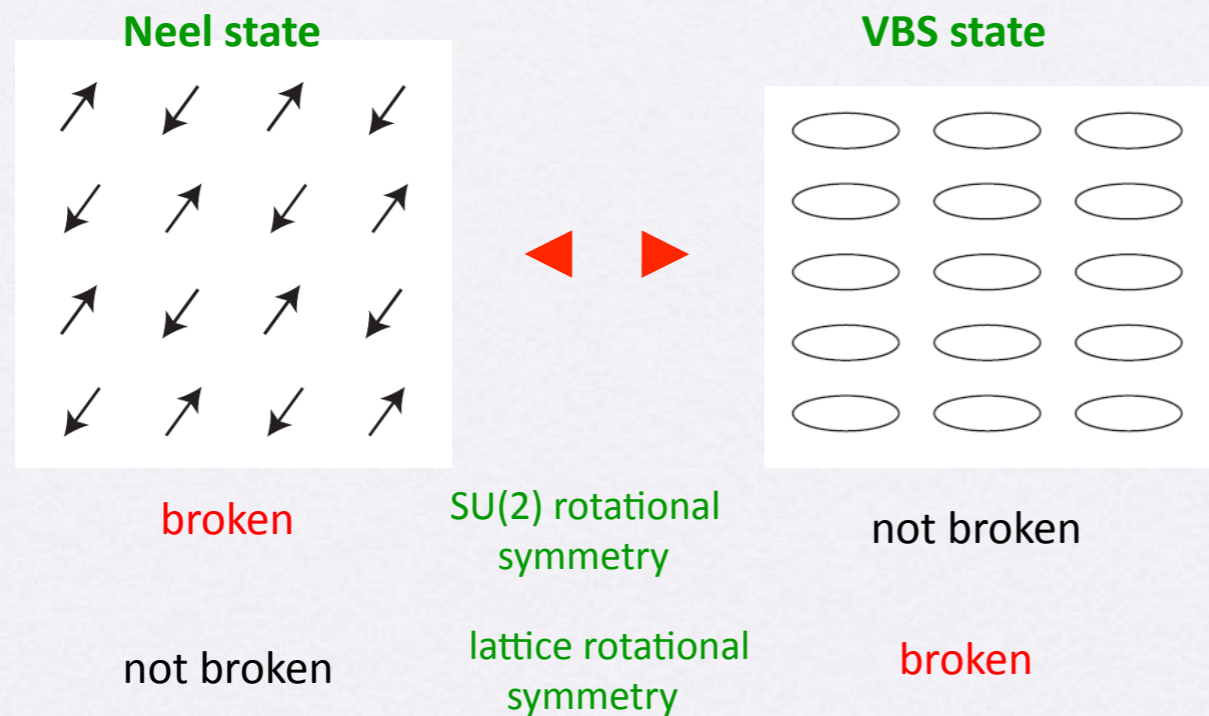
- **Powerful unbiased simulation algorithms**

- **quantum Monte Carlo methods**
- exact diagonalization, DMRG, etc

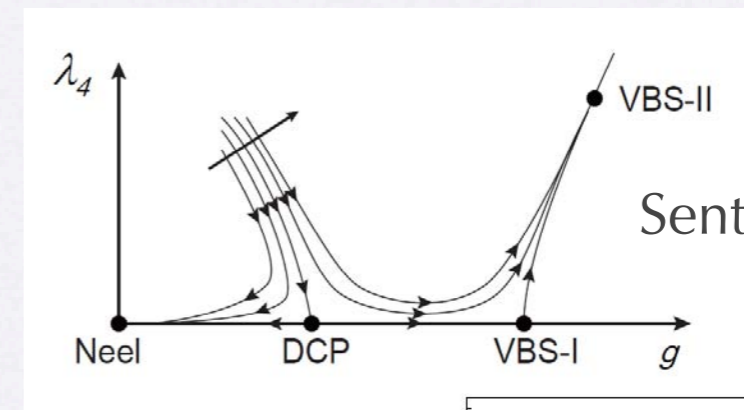


Deconfined critical phenomena

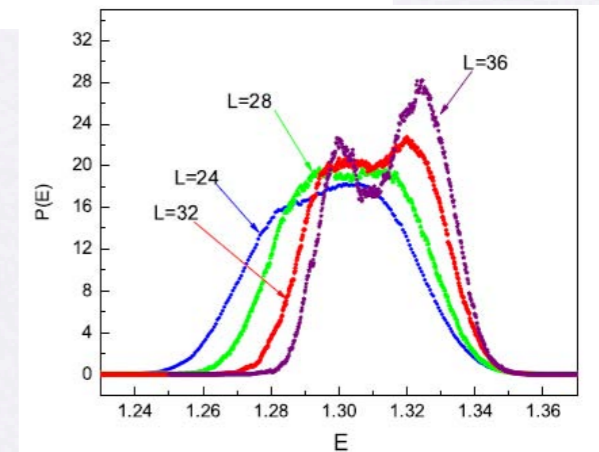
- Possibility of continuous phase transition between two symmetry broken phases \Rightarrow Novel critical phenomena due to quantum interference



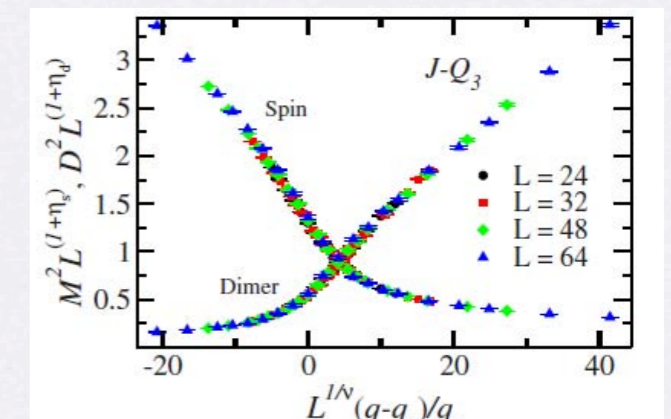
Emergence of U(1) symmetry



Senthil, et al (2004)

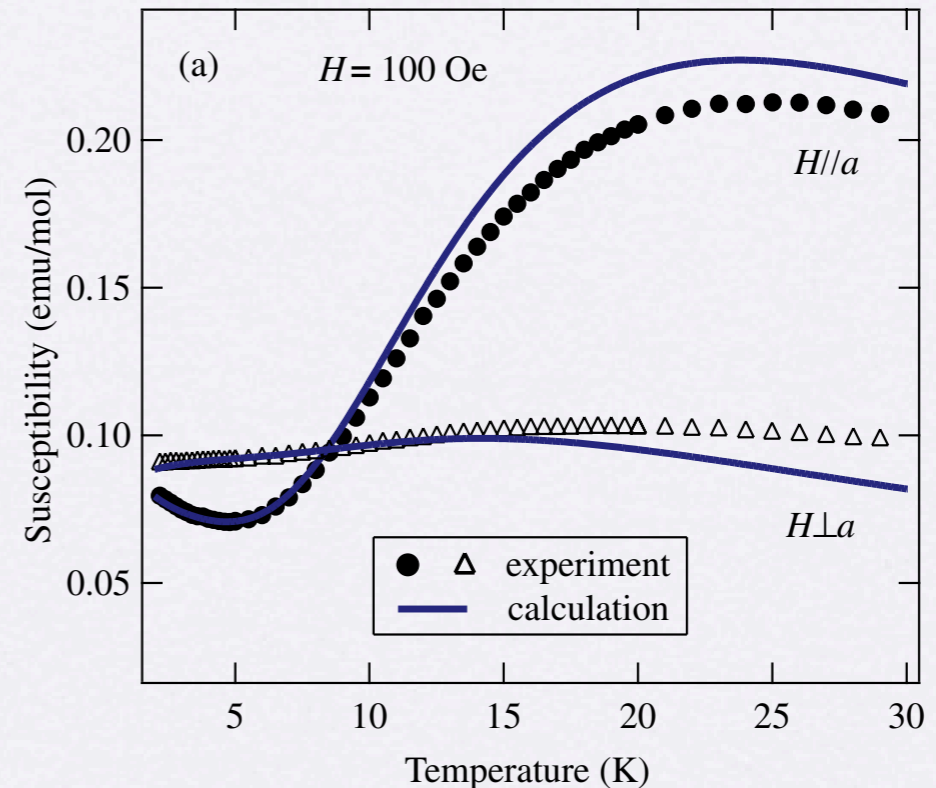
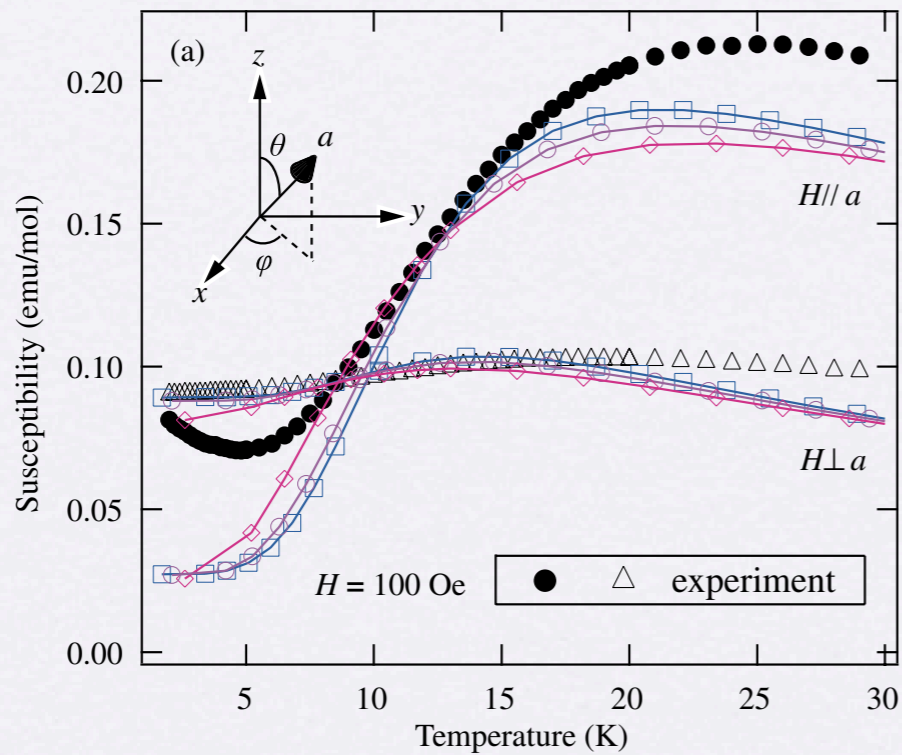
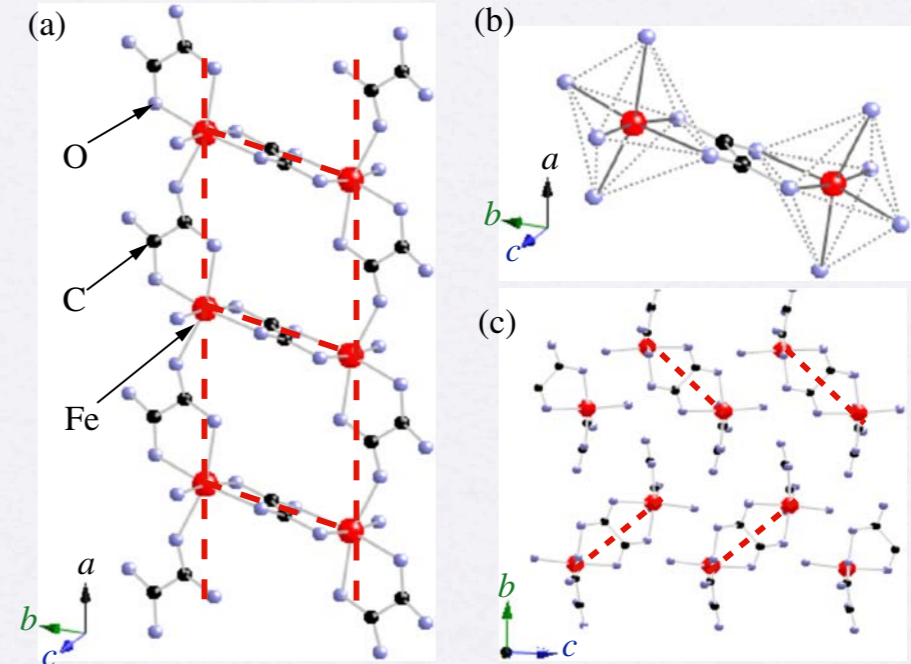


- SU(2) symmetric NCCP¹ model (Kukulov et al 2008)
 \Rightarrow weak 1st order?
- SU(N) J-Q model (Lou et al 2009)
 \Rightarrow consistent with DCP scenario



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

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



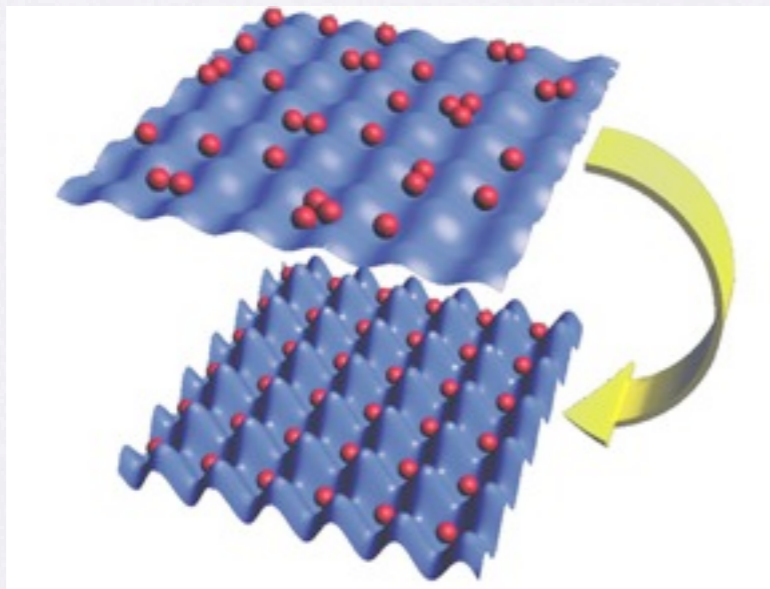
Yamaguchi, Kimura, Honda, Okunishi, Todo, Kindo, Hagiwara (2009)

Supersolid in extended Bose-Hubbard model

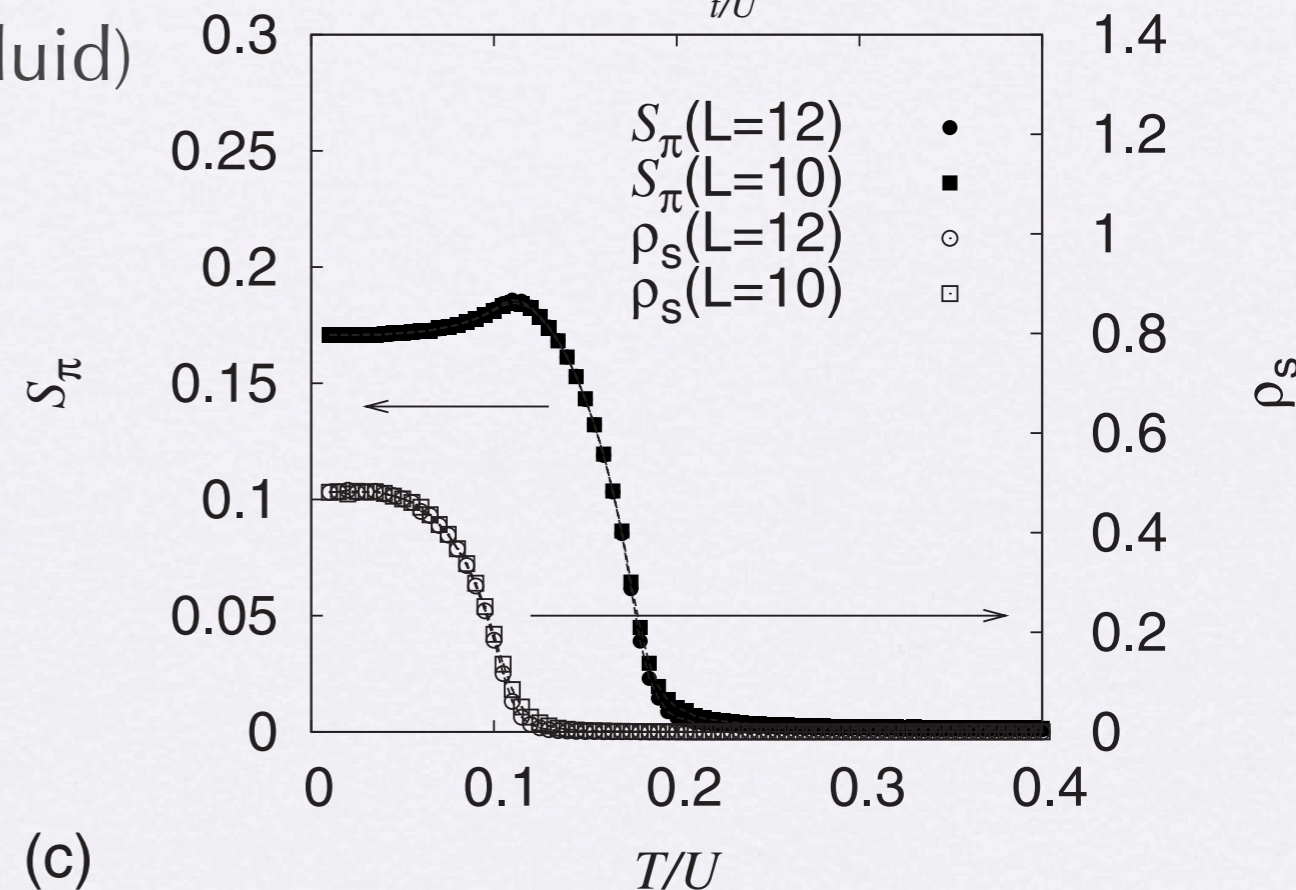
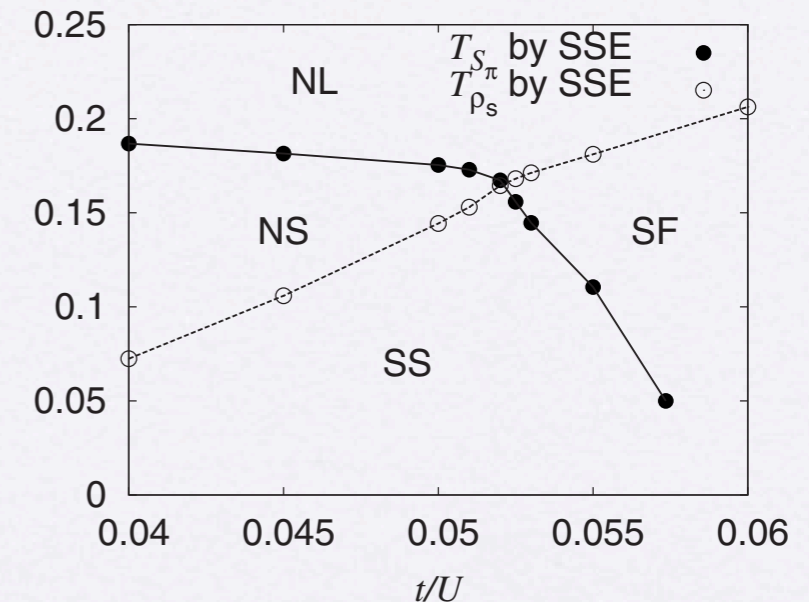
- Interacting soft-core bosons

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

- 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/qo>



(c)

Yamamoto, Todo, Miyashita (2009)

多体量子系のためのアルゴリズム

- 最近20年の進展
 - 厳密対角化、Lanczos法
 - 補助場量子モンテカルロ法 Scalapino, Hirsh, Sorella, Imada
 - 密度行列繰り込み群法 White
 - 動的平均場近似とその拡張 Kuramoto, Metzner, Vollhardt, Kotliar
 - 変分モンテカルロ法 Gros, Yokoyama, Shiba, Sorella, Ogata
 - 経路積分繰り込み群法 Kashima, Imada
 - ガウス基底モンテカルロ法 Gorney, Drummond, Assaad, Troyer, Imada
 - 第一原理計算との融合 Kotliar, Georges, Aryasetiawan, ...
 - クラスタールゴリズム量子モンテカルロ法 Evertz, Kawashima, Todo, ...

World-line QMC for lattice models

- Progress since 1990s
 - Direct simulation in **imaginary time continuum**
 - Alternative representation based on high-temperature expansion (SSE)
 - Simulation in **grand-canonical ensemble**
 - Solving **critical slowing down** by **cluster updates** (**loop algorithm**, etc)
 - Worm (directed-loop) updates for systems with less symmetries
 - Large spin size $S \geq 1$, bosons
 - **Off-diagonal** correlation functions
 - Solving **negative sign problem** (only for very special models)
 - **Extended ensemble Monte Carlo method** (quantum Wang-Landau)
 - **Order-N method** for long-range interaction
 - Non-trivial **parallelization** of loops using MPI and OpenMp
 - Using **balance-condition** instead of DBC

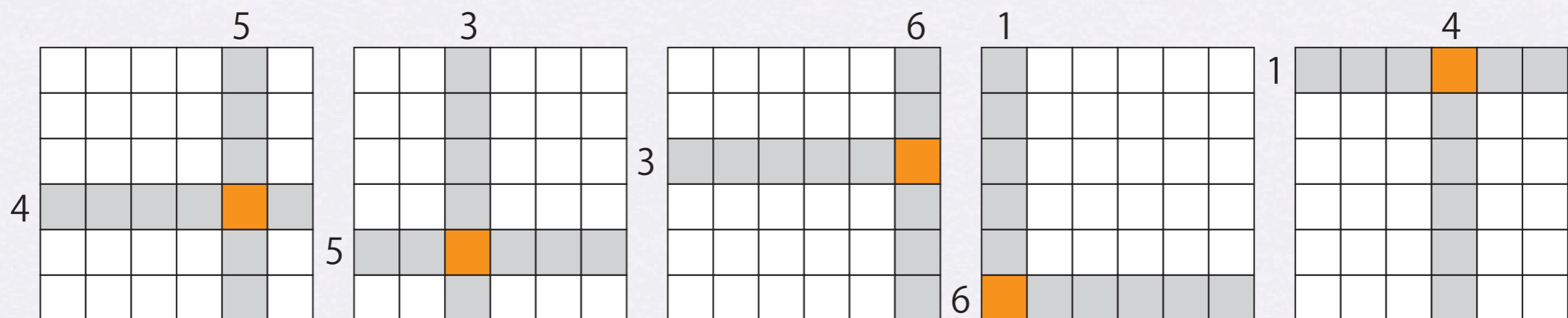
「量子モンテカルロ」とは何か?

- 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

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

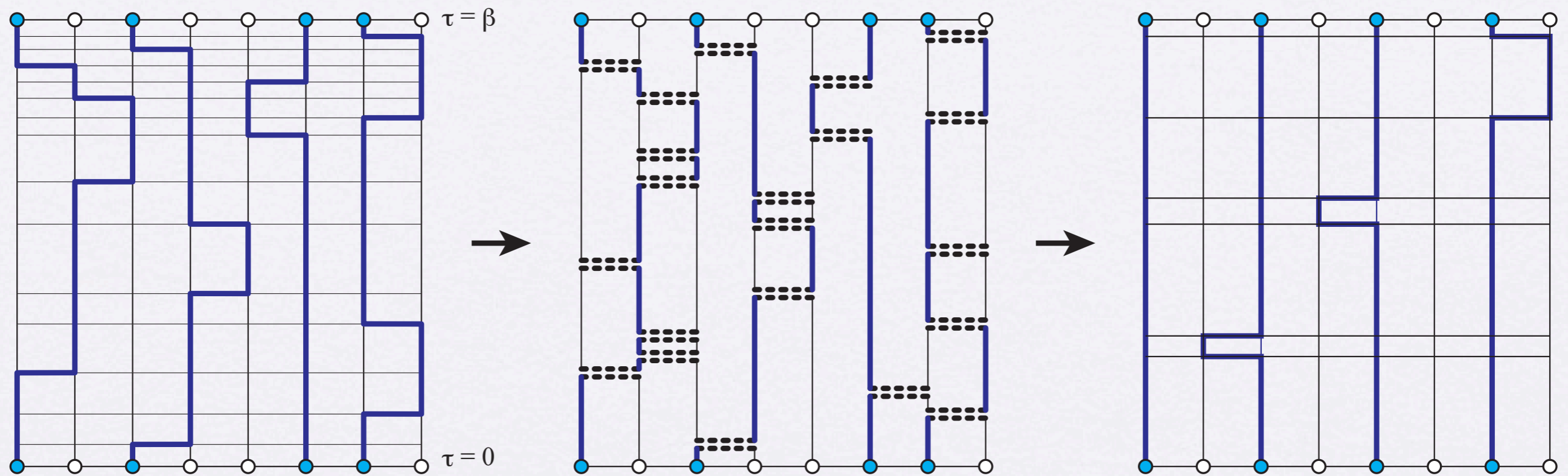
- この中に現われる $(10^{10^6})^n$ 個の項を確率的にサンプリング
- それぞれの項は、ある種の「経路」(path)を表す



連続虚時間ループアルゴリズム量子モンテカルロ法

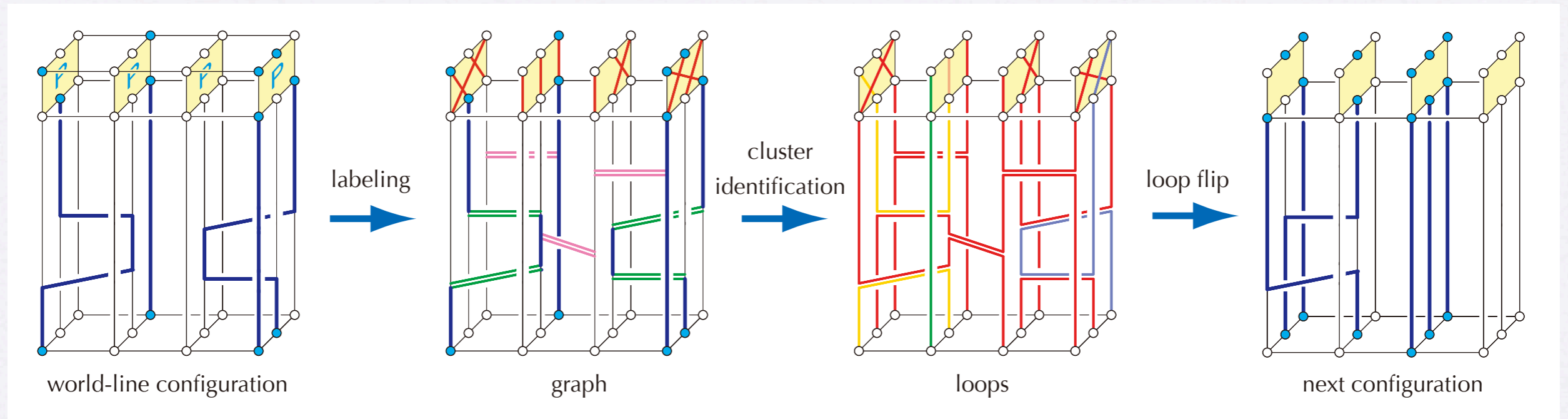
(Continuous imaginary-time loop algorithm quantum Monte Carlo method)

- 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

One Monte Carlo step in loop algorithm

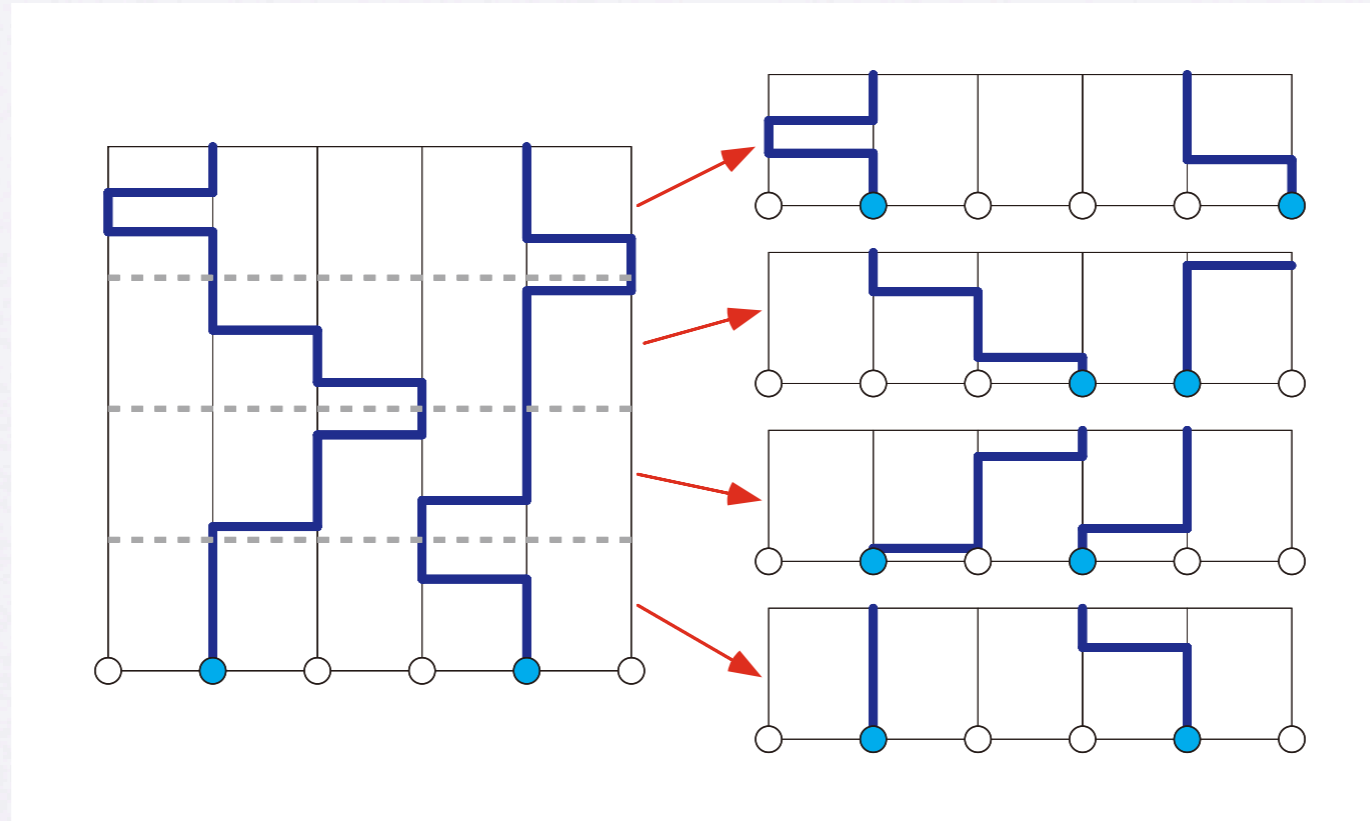


parallelization of loop algorithm is nontrivial!

- insertion of operators/cuts with constant density \Rightarrow Poisson process
- cluster identification \Rightarrow non-local operations on trees/lists
- cf) conventional local flip is easy to parallelize, but is suffered from critical slowing down $\sim (\text{system size})^2$

Parallelization of loop algorithm

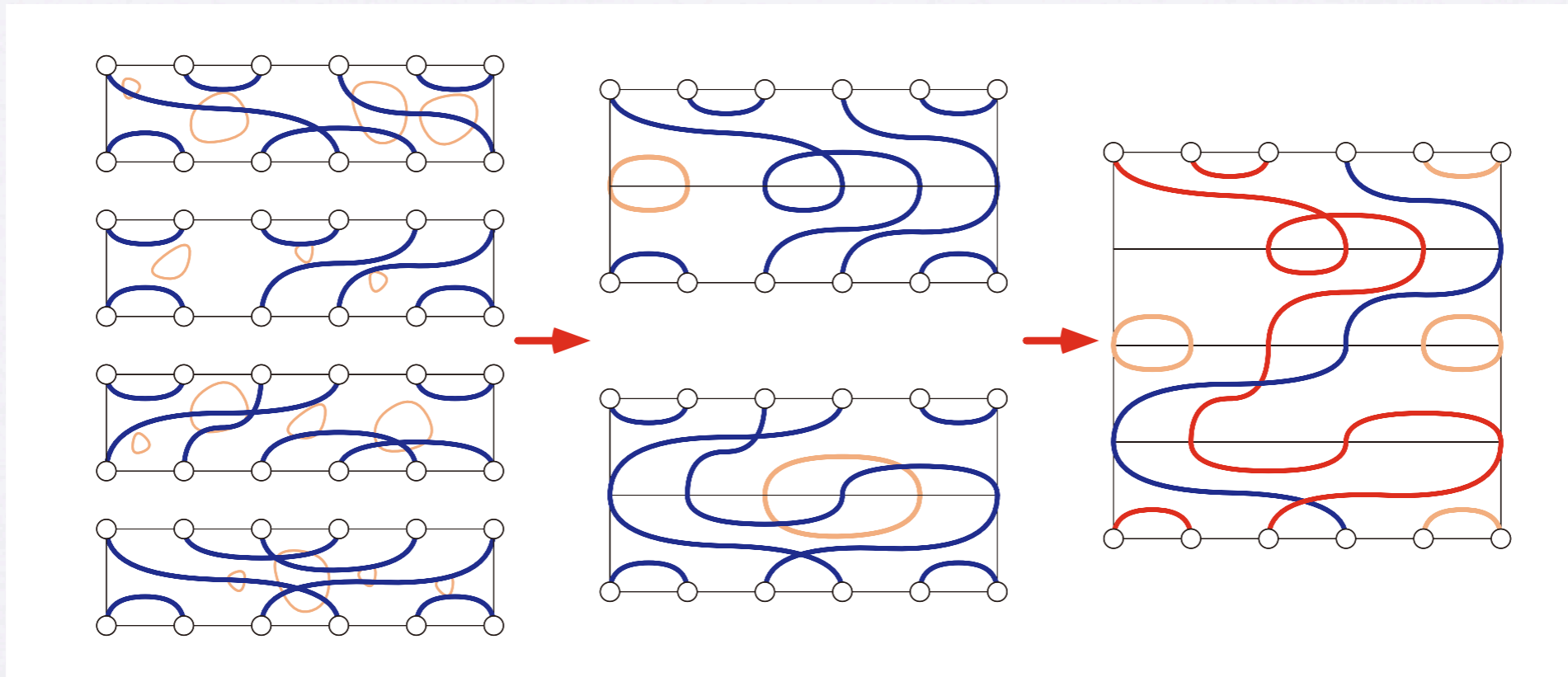
- distributing world-line configuration to several processors



- $(d+1)$ -dimensional lattice is split into N_p slices with equal imaginary time thickness
- labeling process can be performed independently on each process

Parallelization of loop algorithm

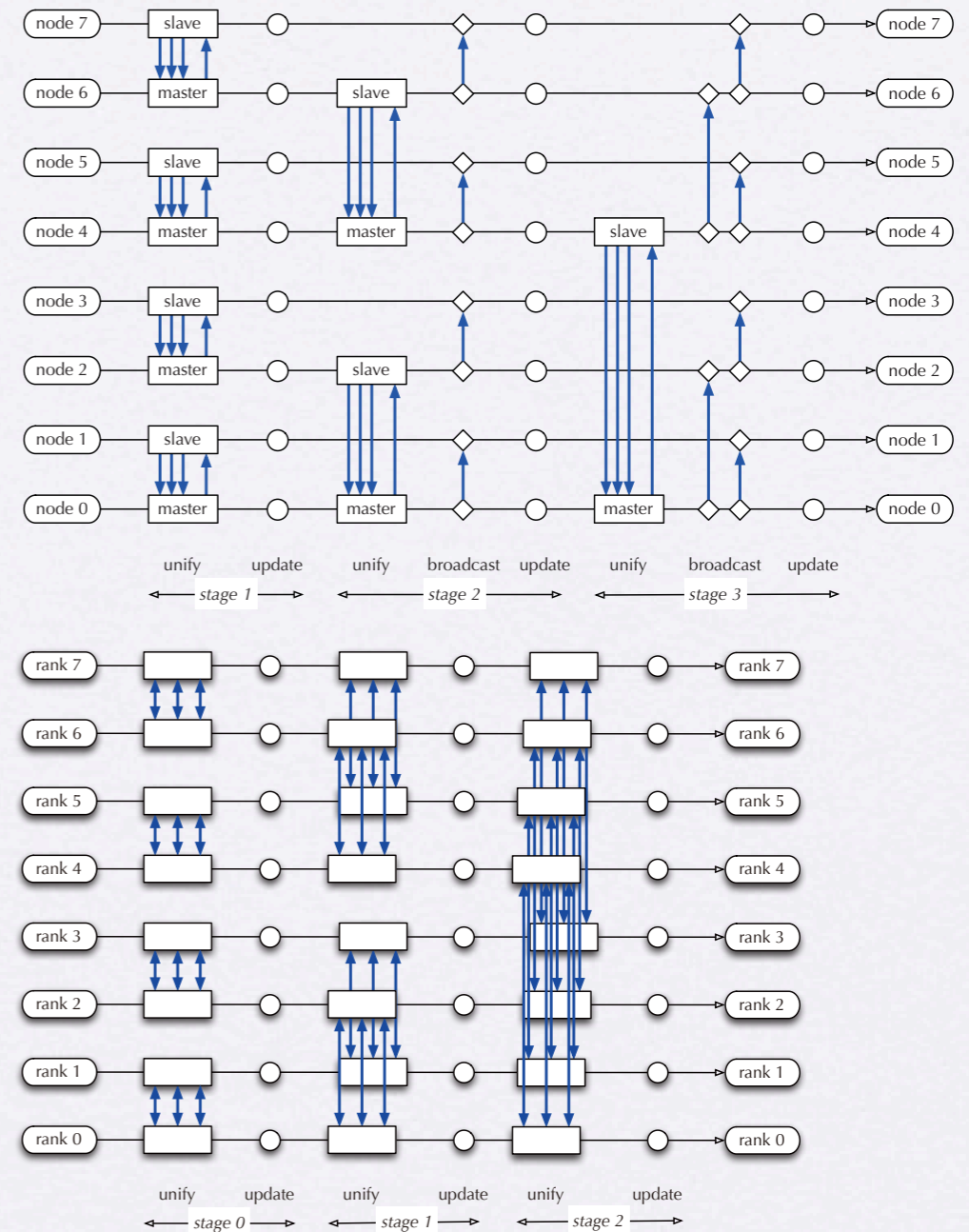
- binary-tree algorithm for cluster identification



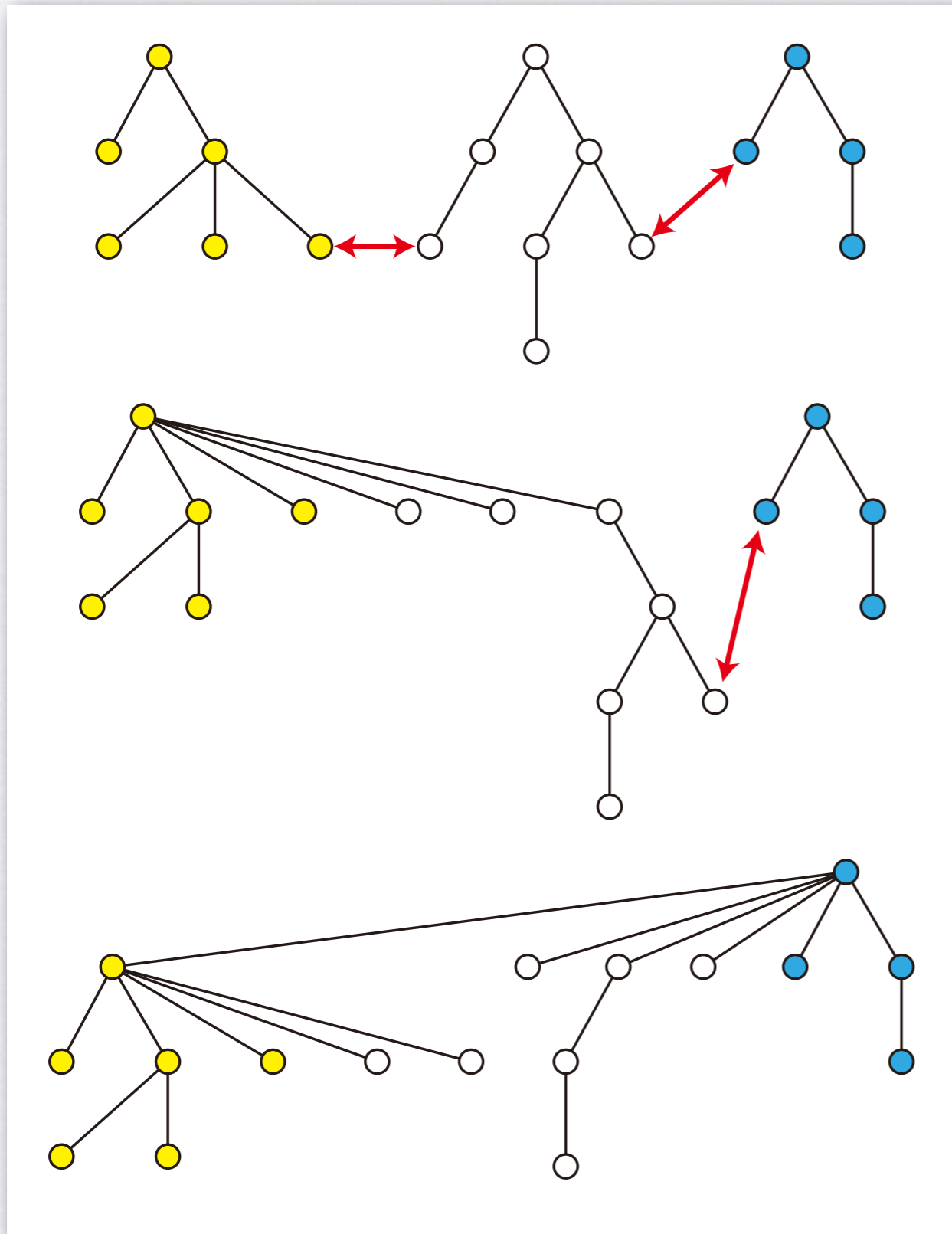
- overhead of parallelization is $(N \log N_p) / \left(\frac{N\beta}{N_p}\right) = N_p \log N_p / \beta$
(negligible at very low temperatures)

Further Optimization

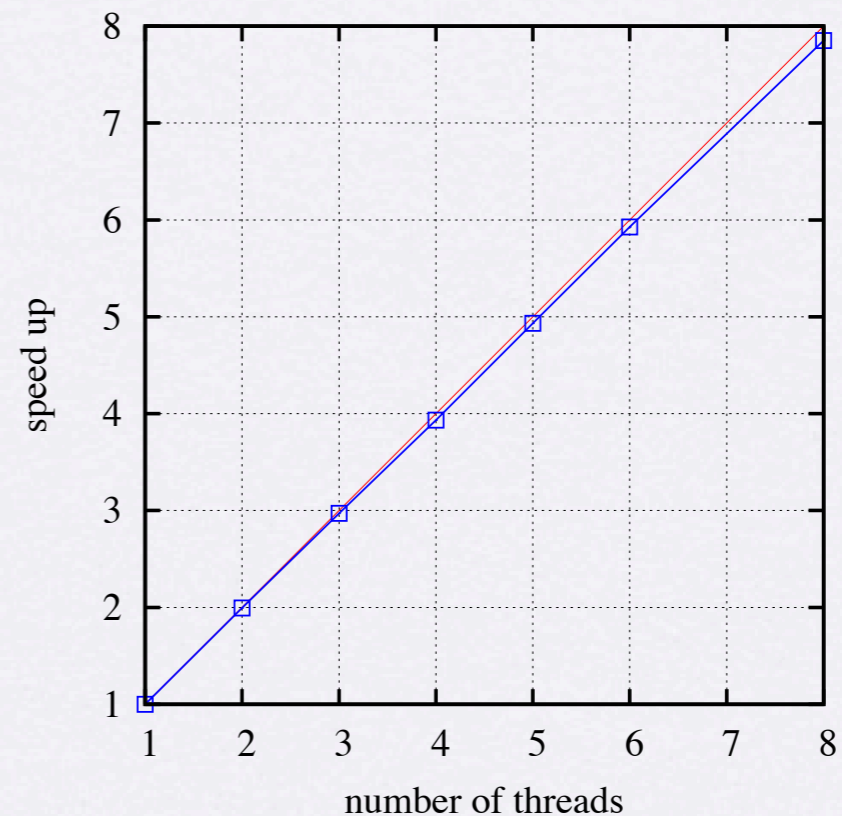
- Introduction of **butterfly-type** communication
 - eliminates overhead in distribute process
 - **majority vote trick** to determine loop directions with minimum communication
 - efficient for high-dimensional torus
- Reduction of number of stages
 - **'bucket brigade' adjacent communication**
 - effective for low-dimensional torus
- **Hybrid parallelization** with MPI and OpenMP
 - multi-thread parallelization with Open MP
 - inter-node parallelization with MPI
 - reduces memory and communication overhead in each node
 - fine-grained parallelization of cluster identification by introducing **asynchronous wait-free union-find algorithm**



Asynchronous wait-free union-find algorithm



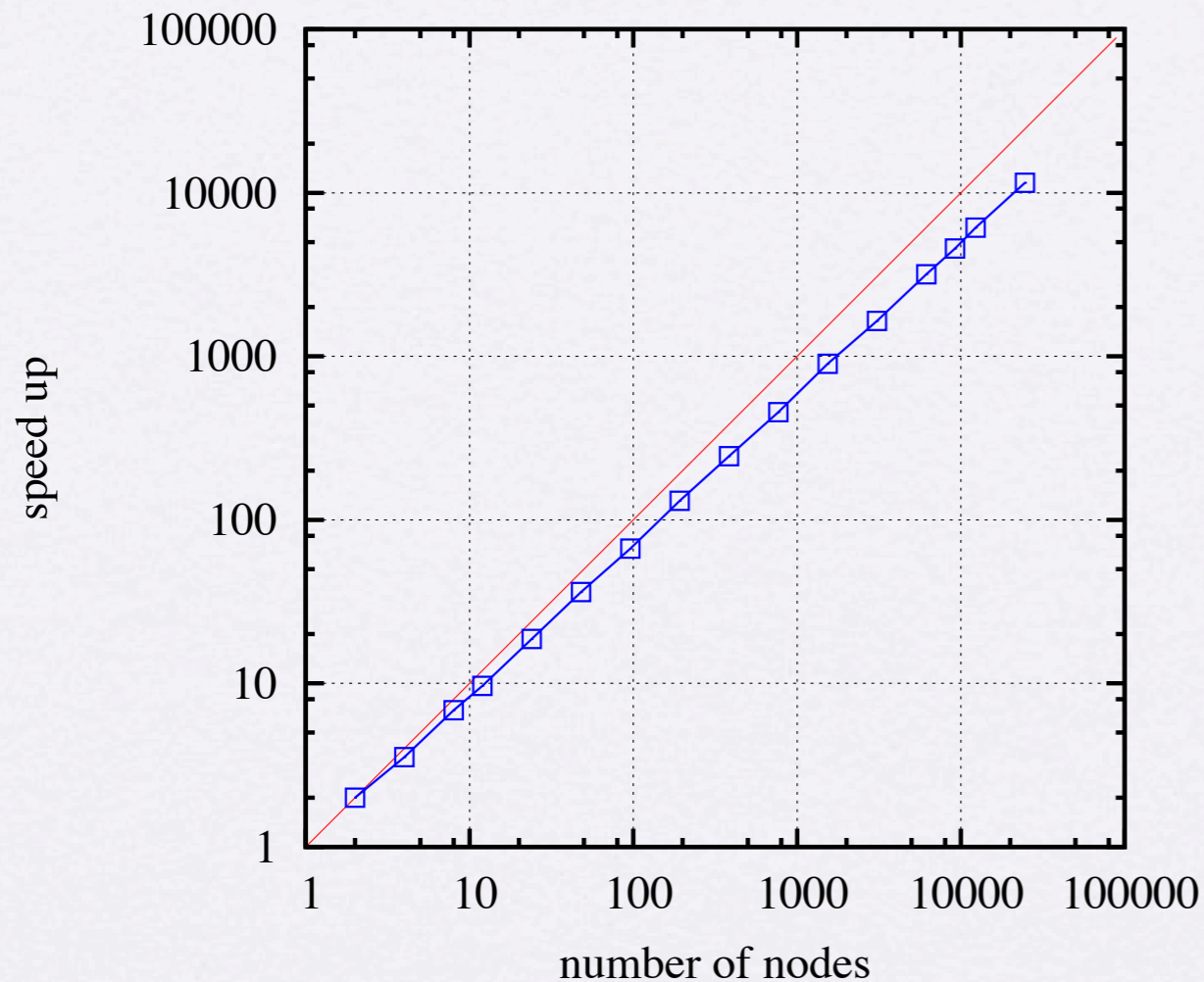
1. find root of each cluster/tree
 2. unify two clusters
 3. compress path to the new root
- locking whole clusters (e.g. by using “omp critical”) is **too expensive**
 - finding root and path compression are “**thread-safe**”
 - **wait-free unification by using CAS (compare-and-swap) atomic operation**



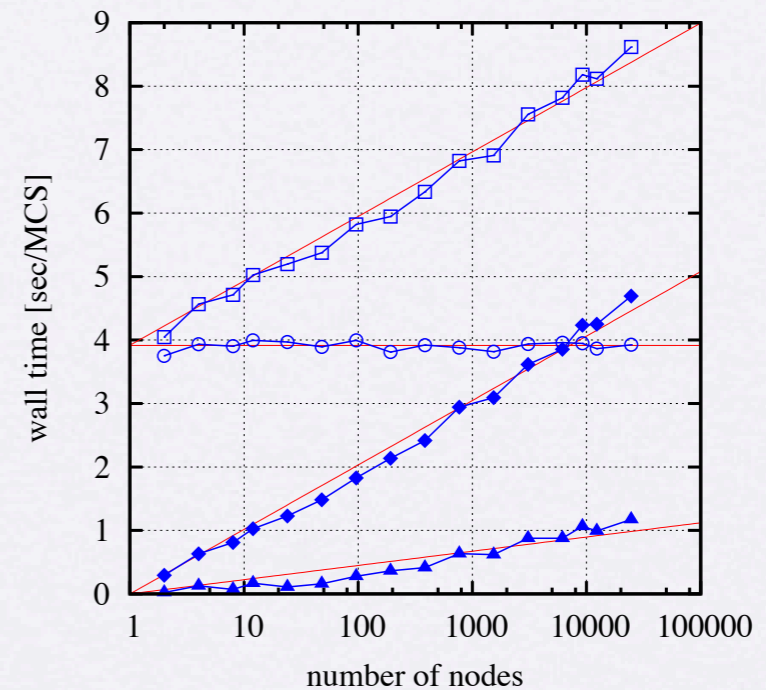
並列化チューニング状況

- 京におけるチューニング状況

京フルシステムでの並列性能推定



ノード数	24576	82944
通信時間	13.7%	15%
並列化オーバーヘッド	54.4%	58%



- ウィークスケールリング：24576ノード:12288ノード = 98.66%
- MIPS値：0.164 PIPS (理論ピーク性能の10.4%)
- FLOPS値：7.63 TFLOPS (理論ピーク性能の 0.243%)

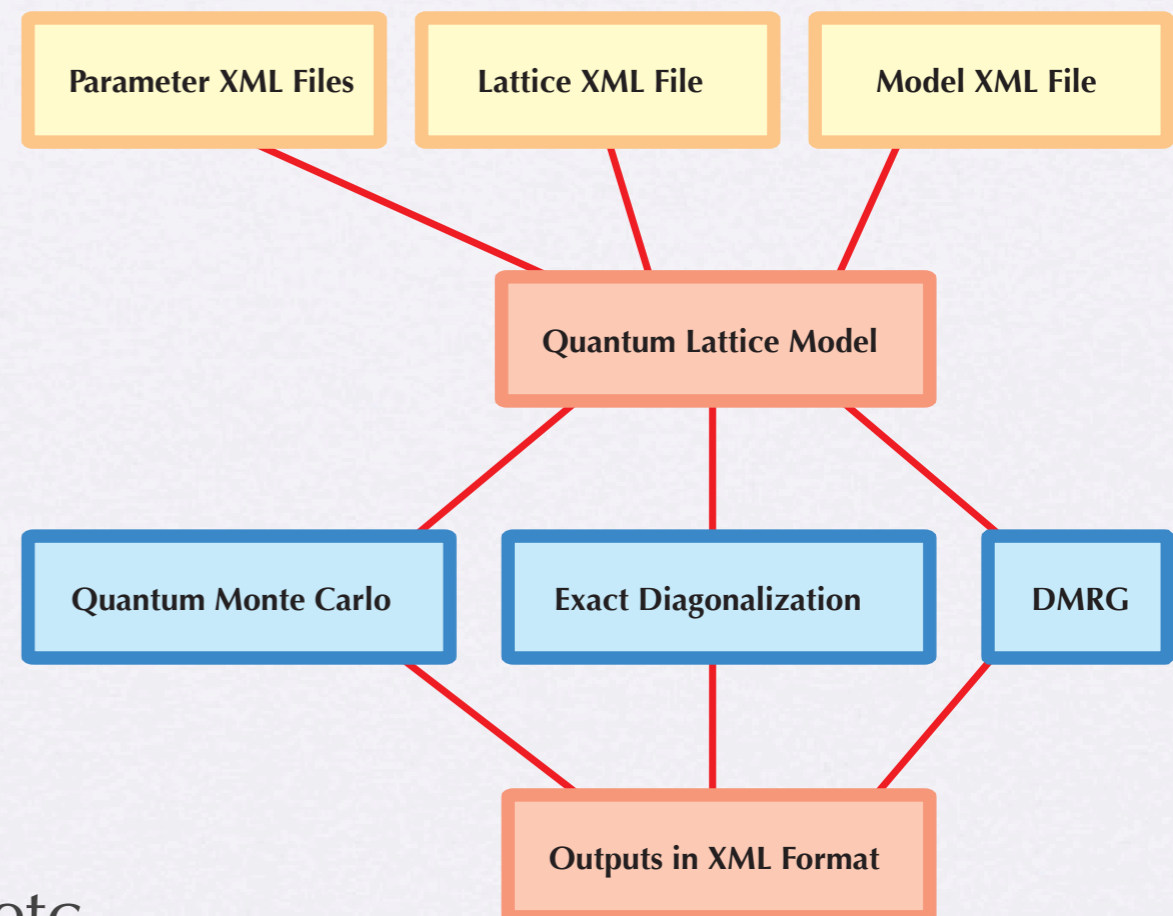
ALPS/looper による「京」全系計算

- マイルストーン：S=5 反強磁性ハイゼンベルグ鎖の量子モンテカルロ計算
 - 相関長 $\sim 2 \times 10^5$ 、エネルギーギャップ $\sim 5 \times 10^{-5}$
 - 膨大な数の頂点からなる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 $\sim 10^{12}$
- 線形演算ではなく、並列グラフ処理により量子統計物理の重要問題を解く
- Graph500 の “Large” \sim “Huge” 問題サイズ(メモリ 0.14 \sim 1.1PB)に匹敵
 - 2011/11の Graph500 では最大でも “Medium” サイズ(メモリ 17TB)
- TOP500の一位の「京」フルノードでしかできない非自明並列化
 - 単なるベンチマークだけでなく、フルノードを使ったプロダクションラン(平衡状態のシミュレーション)
- 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 $\sim L^2 \sim 10^{14} \Rightarrow$ 実質的には 10^{19} の高速化

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



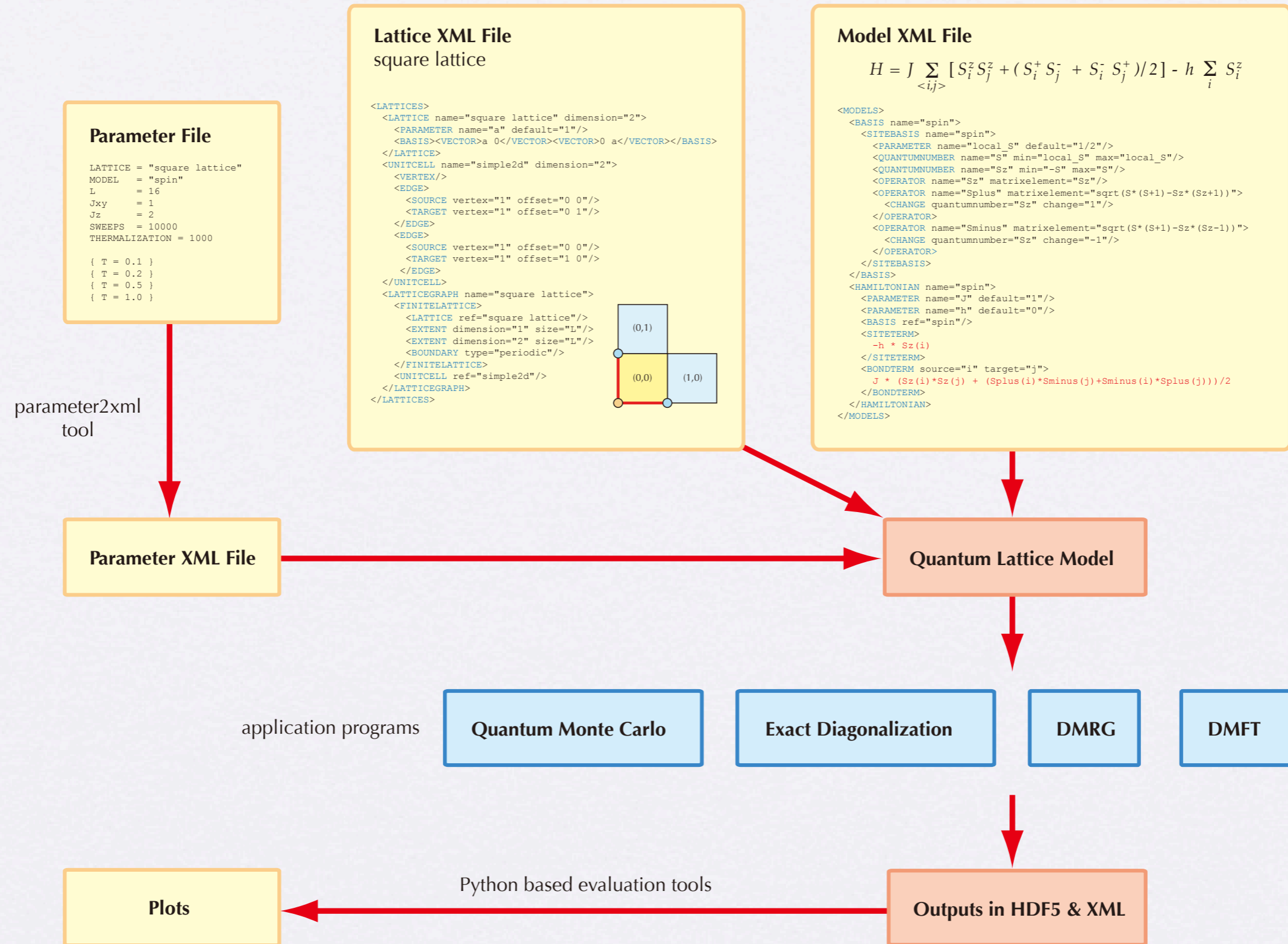
<http://alps.comp-phys.org/>



ALPSプロジェクトの目標

- 計算物性物理の現状
 - 研究グループ毎にそれぞれ異ったコード
 - シミュレーションを行なう模型毎に異ったコード
 - アルゴリズムはますます複雑に
 - 互換性のない入出力形式
- ALPSプロジェクトの目標
 - 最新のアルゴリズムを用いた "community code" の開発
 - 大規模並列計算などのためのC++ライブラリ・フレームワーク開発
 - 統一入出力形式の提案とそれにもとづくデータ解析ツールの作成
 - 計算物理の専門家だけでなく、理論家・実験家にも使えるシミュレーションソフトウェア

A Simulation using ALPS

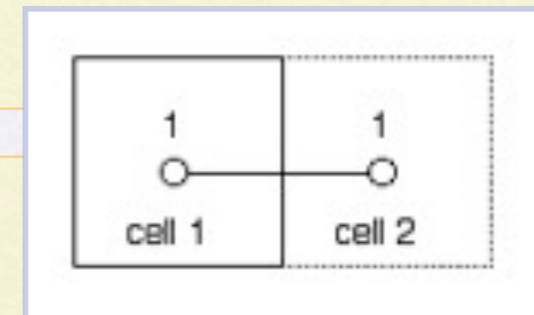


ALPS Lattice XML

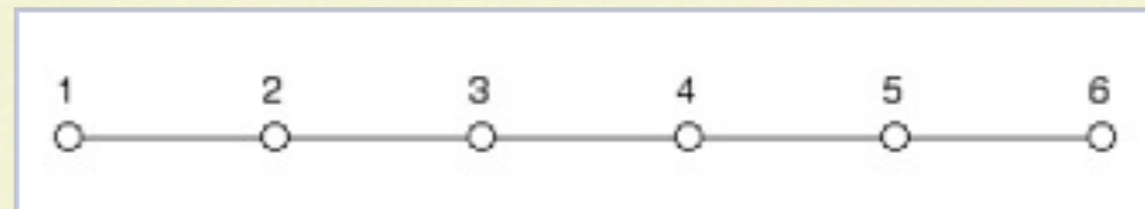
periodic chain with length L

```
<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)

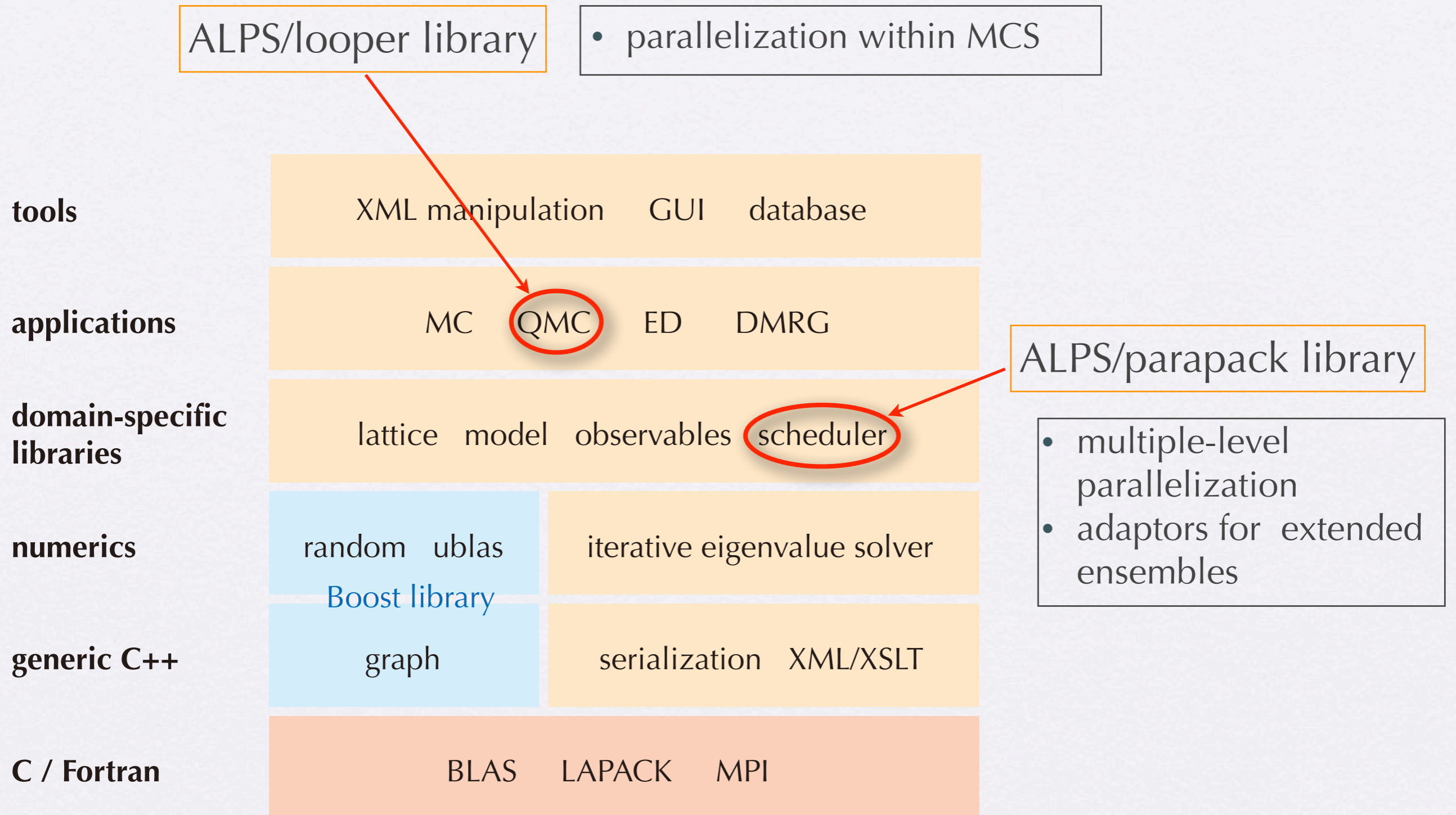
```

<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>

```

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

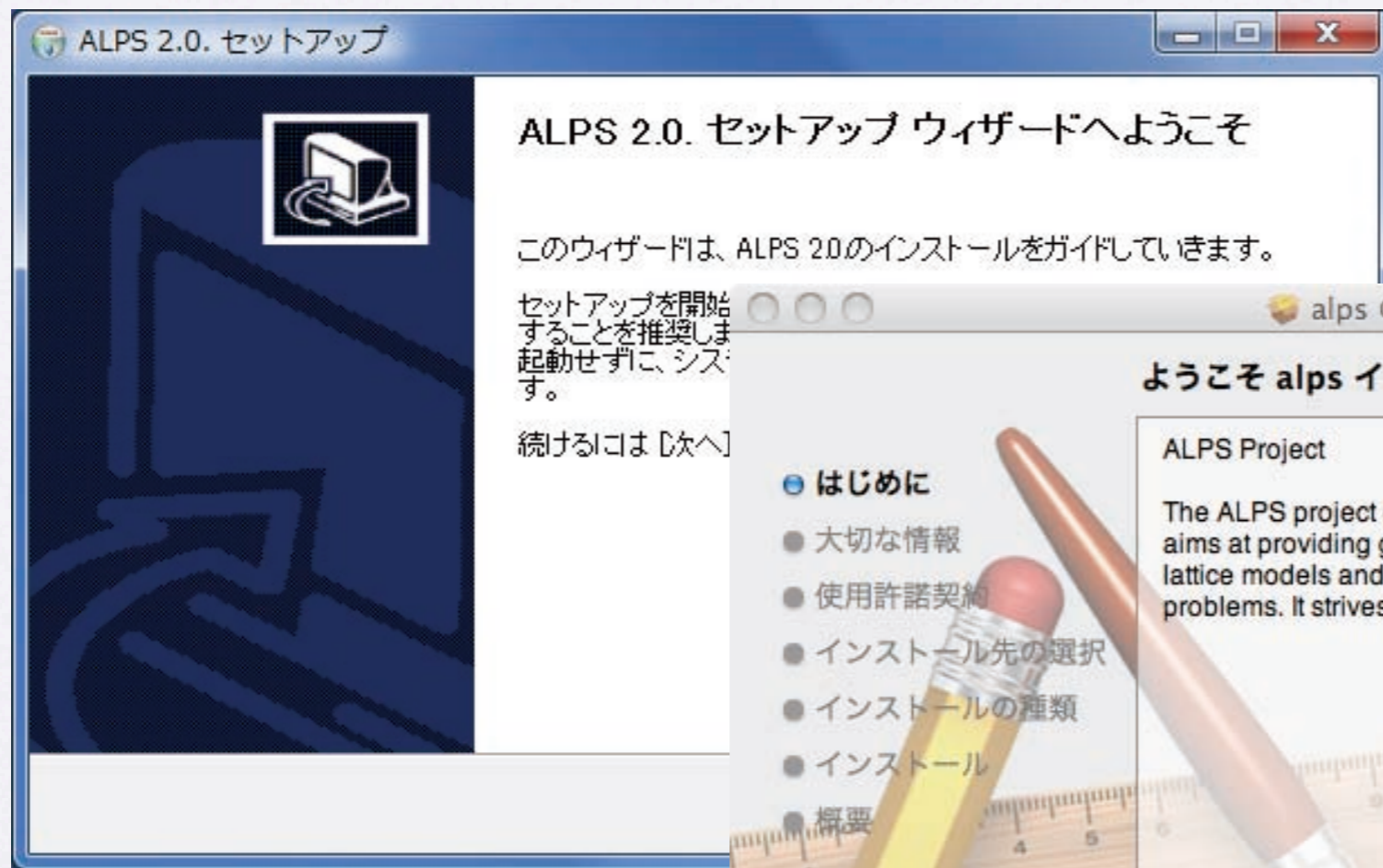
ALPS framework and “K Computer”



ALPSの展開

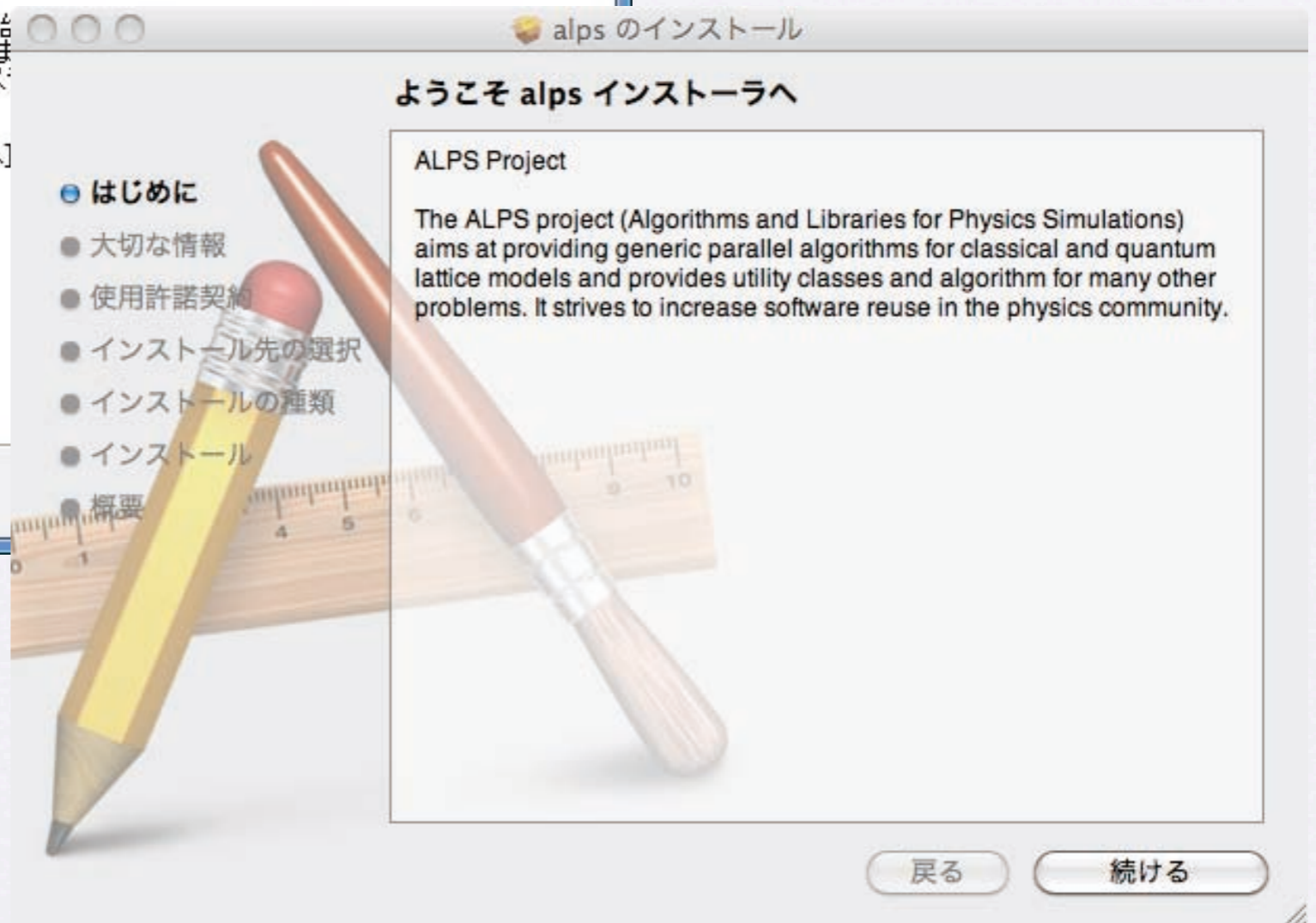
- 上方展開 (大規模化・高性能化・並列化)
 - 中核アプリ「大規模並列量子モンテカルロ法」(ALPS/looper)の高度化
 - 高並列スケジューラ(ALPS/parapack)のハイブリッド多重並列化
 - Fortran, C プログラムのための API 作成
- 下方展開
 - 実験家・理論家による幅広い利用を視野に
 - Windows/Macintosh 用バイナリインストーラの開発
 - ワークフロー・履歴管理システムとの統合
 - GUI (グラフィカルユーザインターフェース)の開発
 - マニュアル・チュートリアル日本語化

Windows, Mac OS X 用バイナリインストーラ



for Windows

for Mac OS X

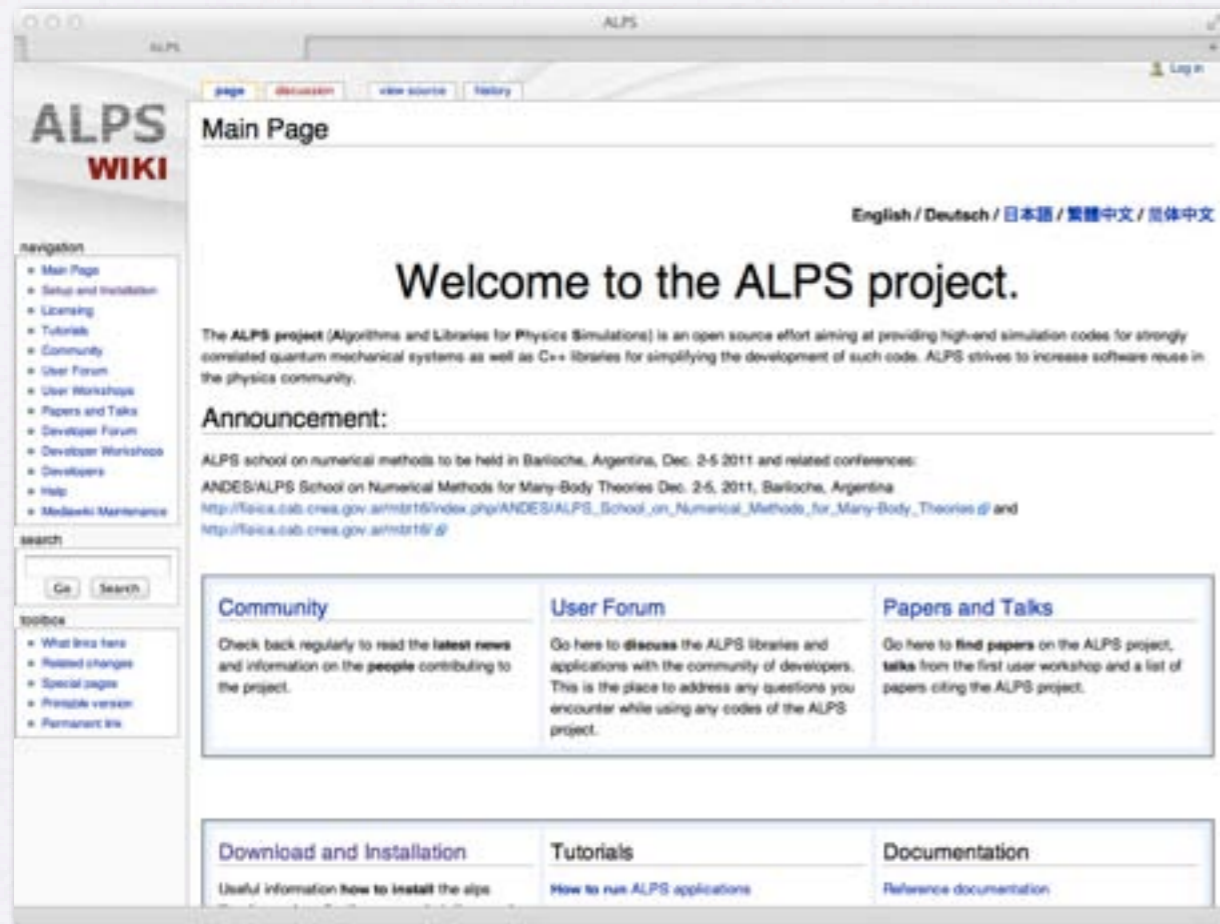


ワークフロー・履歴管理システムとの統合

The screenshot displays the VisTrails Builder interface for a workflow named 'dmft-05-osmt.vt*'. The main workspace shows a workflow diagram with several modules connected by arrows. The modules include 'eCarloSolverParameters', 'PrepareDMFT', 'RunDMFT', 'PersistentDirectory', 'GetResultFiles', 'LoadAlpsMeasurements', 'TransformEachDataSet', 'Axis', and 'PreparePlot'. A 'Methods' panel on the right shows the signature for the 'SheetReference' method, with parameters: MinColumnCount (Integer), MinRowCount (Integer), and SheetName (String). Below this, the 'Set Methods' section shows the values for these parameters: MinColumnCount is 2, MinRowCount is 2, and SheetName is 'dmft-05'. A plot window at the bottom right shows a graph with a blue curve. The x-axis is labeled with values from 0 to 30, and the y-axis has a value of -0.6. The plot shows a curve that starts at approximately (0, -0.6) and rises to about (30, 0.5). The current cursor position is at x=29.6649 and y=-0.401384. The Windows taskbar at the bottom shows the Start button, a search bar, and several open applications: '新しいタブ - Googl...', 'ALPS', 'crest.edo.jaea.go.j...', and '3 python.exe'. The system clock shows 16:49.

<http://www.vistrails.org/>

ALPS version 2.1 & ALPS/looper version 4.0



- JSTAT, P05001 (2011)

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

B. Bauer¹ L. D. Carr² H.G. Evertz³ A. Feiguin⁴ J. Freire⁵
S. Fuchs⁶ L. Gamper¹ J. Gukelberger¹ E. Gull⁷ S. Guertler⁸
A. Hehn¹ R. Igarashi^{9,10} S. Isakov¹ D. Koop⁵ P.N. Ma¹
P. Mates^{1,5} H. Matsuo¹⁷ O. Parcollet¹² G. Pawłowski¹³
J.D. Picon¹⁴ L. Pollet^{11,1} T. Pruschke⁶ E. Santos⁵
V.W. Scarola¹⁵ U. Schollwöck¹⁶ C. Silva⁵ B. Surer¹ S. Todo^{17,10}
S. Trebst¹⁸ M. Troyer^{1†} M. L. Wall² P. Werner¹ S. Wessel^{19,20}

¹Theoretische Physik, ETH Zurich, 8093 Zurich, Switzerland
²Department of Physics, Colorado School of Mines, Golden, CO 80401, USA
³Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Graz, A-8010 Graz, Austria
⁴Department of Physics and Astronomy, University of Wyoming, Laramie, Wyoming

- <http://alps.comp-phys.org/>



- <http://wistaria.comp-phys.org/alps-looper/>

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)

CMSIで開発中のアプリケーション (41本)

- 第1部会

- MACE, **DDMRG**, 2D-Extended-DMRG, **ALPS/looper**, GELLAN, MC-MOZ, GAMESS拡張

- 第2部会

- **RSDFT**, CONQUEST, RS-CPMD, RSPACE, Multi-probe electron transport simulator, hybridQMCL, PIQUANDY, CPVO, HiLAPW, **OpenMX**, **TC++**, **CASINO**, QMAS, xTAPP, FEMTECK

- 第3部会

- **modylas**, **GAMESS-FMO**, REM, PIMD, **ermod**, **DC**, Direct SAC-CI

- 第4部会

- STATE, TOMBO, **feram**, **CP2K**, MoIDS, **CPMD**, **BigDFT**, **3D-RISM**, Amber9拡張, Machikaneyama2002, HiRUNE

- 他

- **hnpack**, NANIWA

赤: ナノGC中核アプリ(6), **太字:** 京で試験利用中(29)

物質科学分野の代表的なアルゴリズム

- 密度汎関数法 (平面波基底、実空間基底)、第一原理分子動力学法、時間依存密度汎関数法、実空間・実時間電子電磁場ダイナミクス法、分子動力学 (短距離相互作用、長距離相互作用)、モンテカルロ法 (古典、量子)、量子化学計算、厳密対角化
- 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のネットワークを要求するものも多い

「サイエンス・モデル」と開発環境

- 計算物質科学では、少数のコミュニティコードではなく、むしろ研究グループ毎に多数のコードが存在 → 新しい手法・アルゴリズムがどんどん試されている
 - 「スモールサイエンス」的な要素も強い
 - 現象から「有効モデル」の抽出 ~ 様々なアイデアにもとづいたアルゴリズムの開発 ~ プログラミング ~ シミュレーションの実行 ~ 結果の解析 ~ 「有効モデル」へのフィードバックをごく少人数で
 - 「ギリギリのチューニングをしてxx%」ではなく「3ヶ月でyy%の実効効率」が出せるような開発環境が重要
 - PC ~ クラスタ ~ スパコン ~ 京 ~ 次世代へのシームレスな環境が必要
- 「京」のような大規模なスパコンを使いこなすためには、ソフトウェア開発においても個人を越えて組織的に進めることが今後不可欠に

Summary & Outlook

- HPCI戦略プログラム分野2 <新物質・エネルギー創成> CMSI
- 強相関量子多体系研究のフロンティア
 - 新量子相と量子臨界相の探求・解明
- 量子モンテカルロの概要・並列化・大規模化
 - 整数演算・グラフアルゴリズムの重要性
 - 計算機の性能向上 + アルゴリズムのブレークスルーによる相乗効果
 - ALPSプロジェクト
- 物質科学分野のアプリケーション