

研究会

数理構造保存を中心とした 数学とシミュレーションの接点

日時 2015年4月28日(火) 15:00-16:20

場所 東京大学工学部6号館3階セミナー室AD

15:00 星健夫(鳥取大学)

数理構造保存を中心とした数学とシミュレーションの接点(主旨説明)

根源的ミクロ方程式が与えられても、マクロ現象が扱えるとは限らない。1つの数理戦略は、ミクロ方程式の数理構造に基づいて時空間をアップスケーリングし、計算可能(computable)な大自由度モデルを構築することである。本研究会では応用例として、シュレーディンガー型偏微分方程式($i\partial_t u = Hu$)から出発し、有機材料などでのデバイスシミュレーター構築を想定する。キーコンセプトの講演として、(i) 偏微分方程式の構造保存型離散化(松尾)、(ii) ポスト「京」などの超並列計算(山本(電通大))、(iii) 開放系(非ハミルトン系)としてのデバイスシミュレーション(山本(理科大))、を取り上げる。数理戦略は汎用であり、他応用との接点もあわせて模索する。

15:20 松尾宇泰(東京大学)

物理諸問題の数理構造を反映した数値シミュレーション

最先端物理諸問題の解決には、計算機による解析、すなわち計算科学の観点が必要である。このための計算機技術的研究、および数値解析学的研究は、半世紀以上に渡り多大な労力を投じて続けられ、今なお盛んである。

このうち数値解析学的な観点からは、当初は対象を特定しない、いわゆる汎用解法の整備に力が注がれたが、20年ほど前から、物理諸問題が持つ特徴的な構造、数学的には幾何学的構造などの数理構造を尊重して数値計算法を構成する試み、「構造保存数値解法」が次世代の中心的技法として脚光を集めてきている。

本講演では、時間依存シュレーディンガー方程式を例題にこの試みについて概観し、今後の展開を展望する。

(裏面に続く)

15:40 山本有作 (電気通信大学)

エクサスケール時代における線形計算アルゴリズムの課題

2020年前後に登場が予想されるエクサスケール計算機では、コア数が 10^9 規模になるとともに、メモリ階層が深くなり、データ移動のコストが非常に大きくなると予想される。これに伴い、数値アルゴリズムの設計指針にも大きなパラダイムチェンジが起きつつある。すなわち、演算量は大きくても超並列性を持つアルゴリズム、データ移動を大きく削減できるアルゴリズムが求められている。また、特定分野に特化した効率的なアルゴリズムの開発も重要な課題である。本講演では、このような観点から、エクサスケール時代における線形計算アルゴリズムの課題と展望を述べる。特に、当研究室で開発している強スケーリング指向の超並列固有値ソルバと直交化アルゴリズムについて紹介し、計算物理への応用を議論したい。

16:00 山本貴博 (東京理科大学)

計算物質工学 / デバイスシミュレーションが数理モデリングに期待すること

今日の高度情報化社会はシリコン電界効果トランジスタの微細化と集積化によって発展してきた。近い将来、トランジスタのチャンネル長は10nmを切ると予想されているが、そのようなナノスケール領域では、電子の波動的性質が支配的になるため、波動型(時間依存シュレーディンガー型)方程式を直接解く必要がある。デバイスシミュレーションでは、実際のデバイスの一部を切り出した系(開放系)の電子輸送をシミュレートするため、開放系のシュレーディンガー方程式を解くことになる。数理モデルとしては、境界領域で外部との流入出をともなう開放系となるため、粒子数の保存則が破れるなど、数理と物理の連携が必要となっている。講演前半では、デバイスシミュレーションの必要性を説明し、後半では、我々が開発を進めている「開放系シュレーディンガー方程式」の数理構造について説明する。

本研究会は、ポスト「京」プロジェクト重点課題7サブグループ G-(iii) 班のインフォーマルセミナーを兼ねる。

世話人：星健夫 (鳥取大学)・松尾宇泰 (東京大学)

連絡先：hoshi@damp.tottori-u.ac.jp

最新情報：<http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~hoshi/info/>