

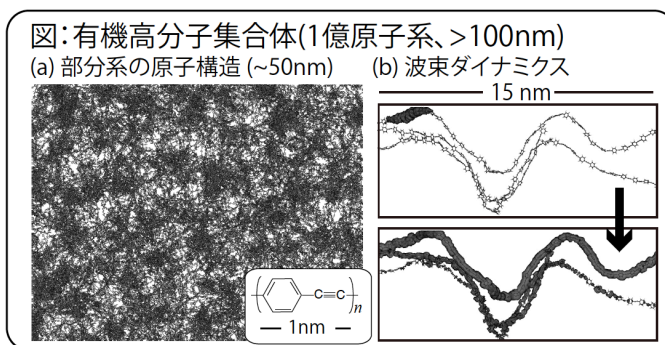
## 基盤的超並列計算アルゴリズムの開発

鳥取大学 星健夫、井町宏人

当該研究の俯瞰と筆者らの個別研究を取り上げる。超並列アルゴリズムやそれに基づくコデザインは、ポスト京時代の計算科学の基盤となる。応用(物質科学)系研究者と数理・情報系研究者の融合が必須であり、俯瞰的研究会を企画している[1]。筆者らは大規模電子状態計算を中心として研究をしているが、そこに現れる数理的課題は汎用なものが多く、計算の核(simulation kernel)として共有していくようにしている。近年の例として、最適複合型密行列固有値ソルバー'Eigen Kernel'を公開した[2]。また、シフト型クリロフ理論(大規模疎行列むけ反復解法の一つ)を、小野倫也(筑波大)らと連携し、NEGF型第一原理伝導計算(コード名 RSPACE)へと適用した[3]。同理論については、山地洋平(東大)らと連携し、汎用コード開発と多体量子計算(コード名 HΦ)への適用も行っている[4]。他に、効率的複素数値積分[5](杉原正顯(青学大)らと)、並列型構造保存解法[6](宮武勇登(名大)らと)、中間固有値問題[7](D. Lee(名大)らと)、FMO法を基盤とした励起子計算[8](望月祐志(立教大)・藤田貴敏(分子研)らと)、などがある。

以降は、現在注力している有機デバイス材料の100ナノスケール電子状態・電気伝導研究を述べる[9]。主な共同研究者は、多田朋史(東工大)・石田雅也(住友化学)である。有機デバイス材料はフレキシブル(ウェアラブル)デバイスの基礎であり、100ナノスケールの非理想構造計算が必要となる。一方近年筆者らは、シフト型クリロフ理論を数理基盤としてオーダー $N$ 型電子状態計算を構築した。最大1億原子(100ナノスケール)系に対し、京コンピュータ全体にいたる強スケーリング性が達成された。第一原理に基づくモデル化(汎用TB型)電子状態計算理論を用いている。

理論拡張として、量子波束ダイナミクス計算法を構築した。波束に対するシュレーディンガー型有効方程式( $\partial_t \Psi = -iH\Psi$ )を解く。予備的結果として、有機高分子系(poly-(phenylene-ethynylene);PPE)の寺尾潤(京大)らの実験[10]を再現した。図はPPE集合体1億原子系および、量子伝導計算である。展望として、計算結果からものづくりへの知見を取り出す、超並列型データ解析がある。



文献

- [1] 研究会「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」, 2016年11月28-29日, 電通大; <https://sites.google.com/site/upscaling2016/>; 世話人: 山本有作(電通大), 星健夫, 松尾宇泰(東大); 主予算: 数学協働プログラム. [2] H. Imachi and T. Hoshi, J. Inf. Process. 24,164 (2016); <https://github.com/eigenkernel/>. [3] S. Iwase, *et al.*, PRE91, 063305 (2015). [4] 山地他, 応用数学会, 2016年9月(予定). [5] 小橋他, 応用数学会, 2015年9月. [6] 井町他, 応用数学会連合発表会, 2016年3月. [7] D. Lee, *et al.*, JJ. Indust. Appl. Math. 30, 625(2013); EASIAM, Macau, Jun. 2016. [8] 川田他, 応用物理学会, 2016年9月(予定). [9] H. Imachi *et al.*, <http://arxiv.org/abs/1603.09616/>; in prep. [10] J. Terao, *et al.*, Nat. Commun. 4, 1691 (2013).