

数値構造保存型解法の計算物質科学への展開

電通大¹ 鳥取大² 名古屋大³ 工藤周平¹, 井町宏人², 宮武勇登³, 山本有作¹, 星健夫²

次世代有機デバイス材料系の波束ダイナミクス計算を主応用として、宮武らの新しい数値構造保存型微分方程式解法(BM4法)[1]を大規模物質計算むけに展開させている。具体的には、時間依存シュレディンガー型方程式($i\dot{\mathbf{u}} = \mathbf{A}\mathbf{u}$, $\mathbf{u} = \mathbf{u}(t)$ は複素ベクトル, \mathbf{A} はエルミート行列で \mathbf{u} に依存)の実時間発展計算に着目している。微分方程式の数値解法は、古くから物理シミュレーションの基盤である。特に近年は応用からのニーズに基づく解法研究が盛んであり、なかでもエネルギー保存などの数値構造保存を指針とした数値計算解法が注目されている[2]。これらは高信頼性をもった陰解法になる。陰解法では時間ステップごとに連立非線形方程式を解く必要があり、一般に演算量が大きいが、現在・次世代の計算機に最適な数値アルゴリズムを用いることで、実应用到に資する汎用数値ルーチンを開発したい。BM4法[1]は、連立非線形方程式を簡易ニュートン法で解く際に生じる連立1次方程式が3つの小型の連立1次方程式の直和に分解されるという特徴を持ち、解法自体が並列性を有する。解法の適用範囲は広いが、本研究では例として、2次元非線形シュレディンガー方程式($i\partial_t\psi = -\Delta\psi + \epsilon|\psi|^2\psi$, $\psi = \psi(x, y, t)$)を正方格子で差分化した計算(離散)系を取り上げた。格子点を分子と考えると、有機分子集合体の波束ダイナミクスを模したトイモデル系とみなせる。最初の一步として、密行列ソルバー版のFortranコードを開発した[3]。しかし行列 \mathbf{A} は疎行列であり、疎行列性を使った解法が望まれていた。

本研究では上記数値計算コードを高速化するため、疎行列直接解法を用いたコードの開発と性能評価を行った。簡易ニュートン法で現れる行列をすべて疎行列形式で格納・演算し、疎行列直接解法 PARDISO を接続することで、東大物性研スパコン(SGI社 ICE XA/UV, CPUノード)1ノード上で、最大65倍の高速化を達成した。320×320の格子を用いた場合、1ステップの時間発展を1.8秒で計算可能である。

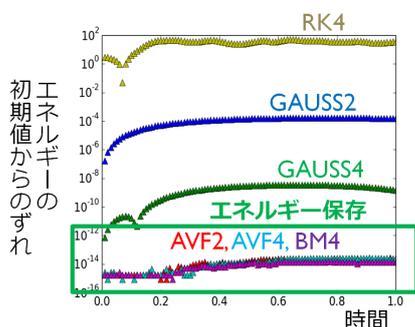


図1 BM4法のエネルギー保存性

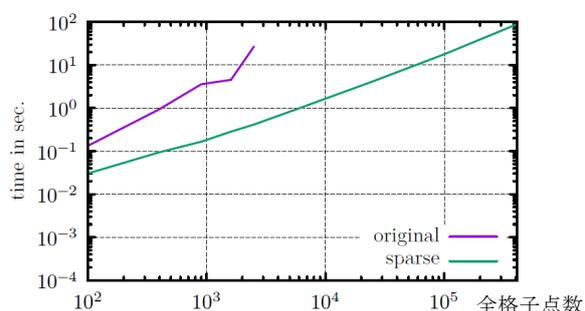


図2 疎行列性の利用による高速化

[1] Y. Miyatake, J. C. Butcher, 'A characterization of energy-preserving methods and the construction of parallel integrators for Hamiltonian systems', SIAM J. Numer. Anal., 54 1993-2013 (2016). [2] レビューとして; 松尾宇泰, 宮武勇登, 「微分方程式に対する構造保存数値解法」, 日本応用数学会論文誌 22, 213-251 (2012). [3] 井町宏人, 宮武勇登, 星健夫, 「エネルギー保存数値解法の大規模物質計算への展開」, 日本応用数学会, 2016年3月4-5日; <https://github.com/nls-solver/nls-2d-bm4/>