



導電性高分子材料の電子状態計算に現れる連立一次方程式に対する並列直接解法の高性能化

概要

導電性高分子材料の電子状態計算に現れる連立一次方程式をone-way dissection orderingを用いた行列分解により解くことを考える。本研究課題では、先行研究(山本, 横川 ほか)で開発されたプロトタイプ実装をベースに、マルチコア(メニーコア)CPU上での性能評価とその結果を踏まえたプログラムの高性能化を主に実施する。

メンバー構成: 深谷 猛(北海道大学), 横川 三津夫, 熊沢 賢一郎, 松崎 継生(神戸大学), 山本 有作, 工藤 周平(電気通信大学)

1 導電性高分子材料の電子状態計算に現れる連立一次方程式

◆ 導電性高分子材料(π 共役ポリマー)

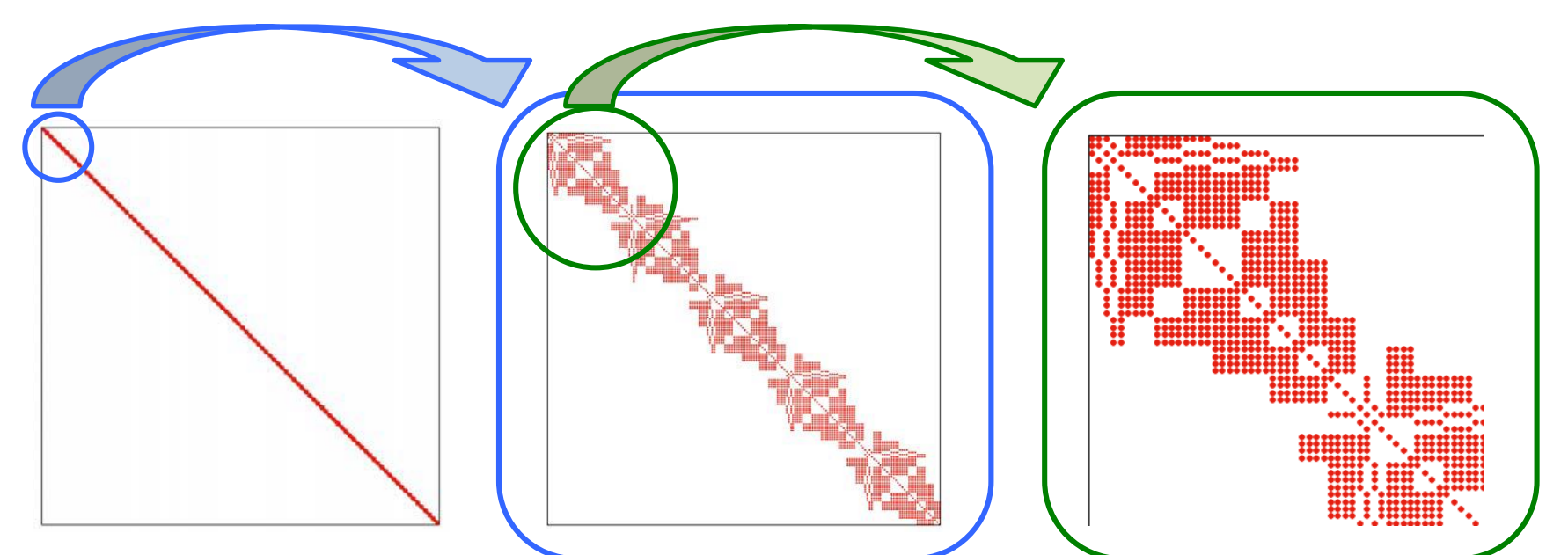
- 電気伝導性を持つ高分子化合物
→ ウェアラブルデバイス等への工学的応用
- ベンゼン環などに存在する π 電子の移動に由来
→ シミュレーションによる電子状態の把握が必要

時間発展シュレーディンガー方程式をCrank-Nicolson法で離散化

同じ行列を係数とする連立一次方程式を繰り返し求解

高速化の
必要性

電子状態計算で現れる係数行列の例



(行列サイズ: 3,594 x 3,594 非ゼロ要素数: 41,781 帯幅: 29)

高分子の一次元的構造に由来する特徴的な非ゼロ構造

(参考文献: 星健夫 ほか, 「高分子上を走る電子の波 ~京スーパーコンピュータで目指す、21 世紀のものづくり~, http://main.spsj.or.jp/koho/24p/24p_9.pdf)

2 One-way dissection orderingを用いた行列分解に基づくアプローチ

◆ 基本方針(山本, 横川 ほか)

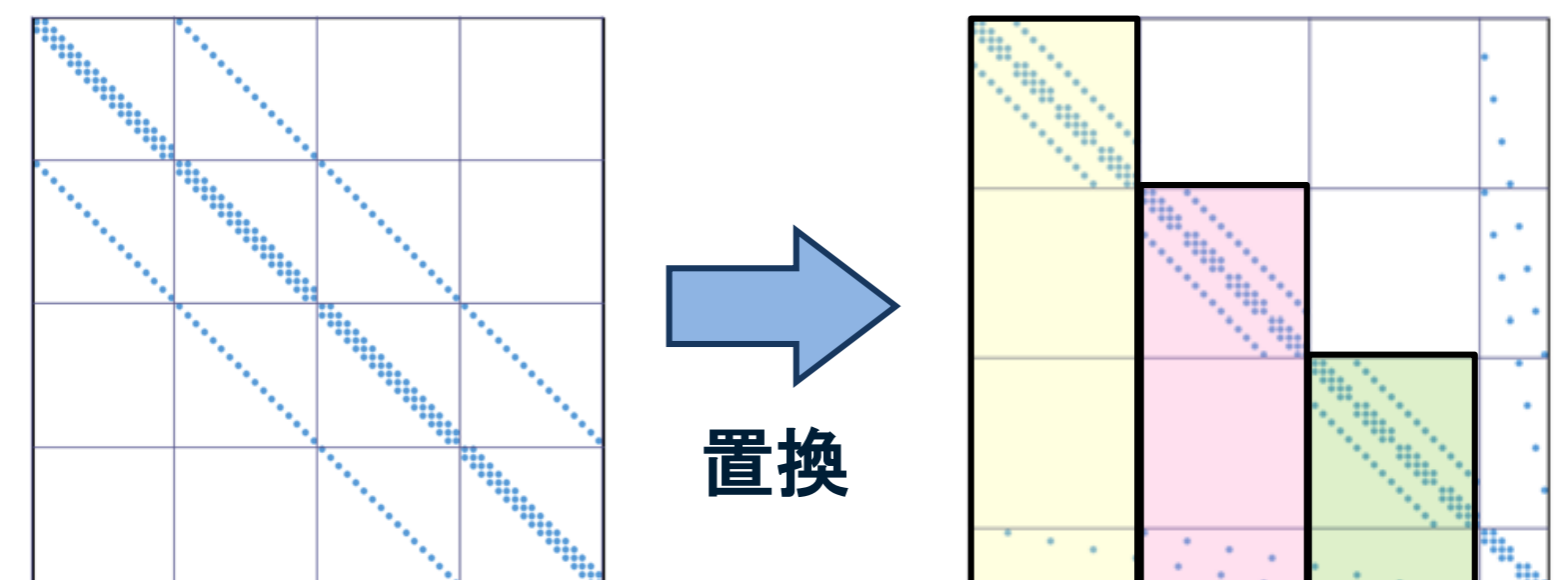
- 係数行列が変化しない → 直接法の活用の可能性
- CPUのマルチコア/メニーコア化 → 並列性の確保は必須

one-way dissection orderingを用いた行列分解に基づく手法

分解と求解(前進・後退代入)部分における並列計算が可能

並列行列分解の例(コレスキー分解)

※2次元ポアソン方程式を5点中心差分で離散化した場合に現れる行列の場合



並列に分解可能

(参考文献: 横川三津夫 ほか, 「 π 共役ポリマーの電子状態計算に現れる連立一次方程式の並列解法», 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」, 2016/11/28-29, 東京)

3 現状と今後の計画

先行研究の成果:

- プロトタイプ実装(スレッド並列化)の開発
- テスト問題を用いた簡単な性能評価

本研究課題の目的:

- マルチコアCPUを想定したプログラムの高性能化
- 実問題における効果の検証(マルチコアCPU上)

将来的な展望:

- プロセス並列化(分散並列計算機向け実装)
- 他のアプリケーションへの応用の検討

◆ H29年度の具体的な研究計画

- プロトタイプ実装に関する詳細な性能評価と課題の発見(深谷)
- マルチコア(メニーコア)CPU向けのチューニング(深谷)
- 実問題を考慮したアルゴリズム・実装方法の改良(横川, 山本)
- マルチコア(メニーコア)CPU向けの汎用的な高性能実装技術の調査・評価(山本, 工藤)
- 利用予定の計算機資源:
SR16000(北大), Xeon Broadwell(東大), Xeon Phi KNL(京大)

実際の時間発展計算における開発プログラムの性能を検証