

平成 30 年 6 月 8 日現在

機関番号：82110

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K00178

研究課題名(和文)量子多体問題に対するアクセラレータを用いた高速化・並列化手法の研究開発

研究課題名(英文)High performance computing for quantum many-body problem using accelerators

研究代表者

山田 進 (Yamada, Susumu)

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・研究主幹

研究者番号：80360436

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、現在主流になっているGPUのようなアクセラレータを用いて構成された超大規模並列計算機を用いて量子多体問題に現れる固有値計算を高速に計算する手法を研究開発することを目的とした。この目的を達成するため、問題の物理的性質や計算機のアーキテクチャを考慮した高速計算手法や省通信化手法を提案し、その有効性を実際の数値計算で確認した。また、計算の大規模化による誤差の累積による精度低下を回避する演算ライブラリを開発し、実際に固有値計算に用いてその有効性を確認した。さらに、開発したコードを実際の量子問題に適用し、物理的性質についての議論を行った。

研究成果の概要(英文)：In this research, we have studied high performance eigenvalue solver for quantum many-body problem on parallel computers using accelerators. We have proposed the calculation strategy suitable for GPUs and the communication avoiding method in considering the physical property. And then, we discussed accumulation of round-off and truncation errors and a precision issue in large simulations requiring a great number of calculations, and we developed the high-performance quadruple precision library to avoid this issue. Moreover, we simulated the quantum many-body problems using our proposed solvers and discussed the property of the problem by using the simulation results.

研究分野：高性能計算

キーワード：高性能計算 アクセラレータ 固有値計算 大規模並列計算 量子計算

## 1. 研究開始当初の背景

(1) 高温超伝導体や強磁性体等の高性能機能材料群は、現在日本が目指している低炭素社会の実現の大きなカギとして大きな注目を集めている。しかし、これら物質群の機能発現機構は電子相関の効果によるものと考えられているが、その詳細はわかっていない。そのため、材料設計を行うためには、電子相関の効果を考慮した量子多体系モデルをシミュレーションする必要がある。しかし、この量子多体系問題は問題サイズの増加に伴って計算量やメモリ量が指数関数的に増加するため、大規模な並列計算機の利用が強く望まれていた。

(2) 一方、京スパコンのような数十万個のコアを持つ超並列計算機も出現し、膨大な計算量のシミュレーションも現実的になり、よりも大きいサイズの量子多体系問題の計算も可能になってきた。しかしながら、これまでの計算機の多くは、複雑な演算処理が実行可能なコアの数を増やすことで計算機の大規模化を行ってきたが、最近では(コアに比べると)単純な演算を高速に実行可能な GPU のようなアクセラレータを利用した超大規模並列計算機が主流になりつつある。さらに、計算機の大規模化に伴いネットワーク構造も複雑になってきている。そのため、これまでに開発された計算方法の多くはそのままでは最新の超大規模並列計算機の性能を有効に利用することが困難である。そのため、アクセラレータを利用した大規模な並列計算機の性能を有効に利用できる並列アプリケーションの開発が望まれていた。

## 2. 研究の目的

(1) 量子多体系問題に対する解法の1つに厳密対角化法がある。この方法は、量子モデルのエネルギーを表現する行列であるハミルトニアンをモデルから厳密に構成し、その固有値および固有ベクトルを計算することで、モデルの物性を評価する方法である。このハミルトニアンの次元はモデルサイズの拡大に伴って指数関数的に増加する。そこで、並列化や高速化につながる有効な対称性や規則性を計算科学のおよび物理的視点から見出し、アクセラレータの1つである GPU での高速計算を実現するためのアルゴリズムの開発を目指す。さらに、大規模並列計算を行う際に問題になる計算精度の劣化や通信コストの増大といった問題の回避の実現を目指す。

(2) 開発したコードを実際の量子多体系問題に適用し、開発したコードの高速性、安定性、頑強性を評価することで、コードのアルゴリズムの改良を行うとともに、理論物理学者と協力して量子多体系の量子状態を評価し新しい物理的知見を得ることを目的とする。

## 3. 研究の方法

(1) GPU の向きの計算方法の研究開発では、固有値問題を反復法で計算する際に最も計算量の多いハミルトニアン行列とベクトルの掛け算を中心に高速化・並列化を実施した。量子問題の特性からハミルトニアンの非零成分の分布は規則性があるため、この規則性を利用することで GPU 向きの行列ベクトル積のアルゴリズムを提案する。

(2) コンピュータでの演算では、無限桁の実数を有限桁で表現して演算を行うため、演算ごとに非常に小さいが計算誤差が混入する。そのため、大規模並列計算で大量の演算を行うと、この誤差が累積し得られた結果の精度がほとんどないケースがある。そのため、2つの倍精度変数を組み合わせて4倍精度変数を表現する方法(Baileyのアルゴリズム)を用いた基本演算ルーチン群を作成し、実際の固有値問題に適用しその有効性を確認する。

(3) 大規模並列計算機では、計算ノードをネットワークで結合しているが、ノードの数が多くなるとネットワークの構成が複雑化し、通信性能が低下する。そこで、演算は若干増えるが通信回数を削減する省通信手法に着目し、大規模並列計算における固有値計算に対する有効性を評価する。

(4) 開発した量子計算コードを実際の量子問題に適用し、物理的知見を見出すとともに、コードの安定性等を評価する。さらに、計算対象の物理問題の特性に合わせた適切な解法を計算科学の視点から採用することで、高速計算を目指す。

## 4. 研究成果

(1) 量子多体系問題に対する解法の1つである厳密対角化法では、固有値問題を計算する必要がある。この固有値問題を反復法で計算する際に最も計算時間を必要とする演算は、ハミルトニアン行列とベクトルの掛け算であるため、この掛け算部分を中心に GPU 向きの演算方法を提案した。その際、量子問題特有の対称性を考慮してハミルトニアンを分割することで、非ゼロ要素の分布を規則的にできることに注目し、アクセラレータ向きの演算方法およびデータの格納方法を提案した。また、GPU での演算ではデータの分割方法により計算性能が変化することが知られていることから、パラメータサーベイにより最適な分割数を見出した。実際に提案した掛け算方法を GPU 上で実行したところ、GPU の計算で一般的に利用されている掛け算ルーチン(cuSPARSE)よりも2倍程度高速に計算できることを確認した(図1参照)。さらに、実際に GPU を用いて量子計算(固有値計算)を行ったところ、6コアの CPU をもちいた並

列計算よりも約2倍高速に固有値を求めることができた(図2参照)。

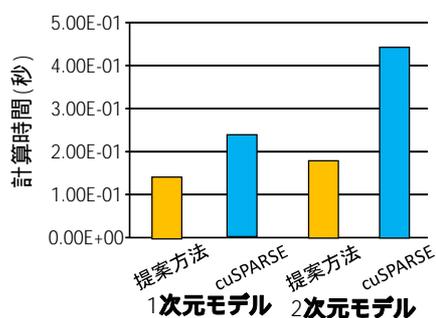


図1 GPU (NVIDIA Tesla M2075) 上での提案方法および cuSPARSE ルーチンによるハミルトニアンとベクトルの掛け算1回あたりの計算時間の比較。ハミルトニアンは1次元及び2次元の20サイトハバードモデル(粒子数はアップおよびダウンとも6個)から導かれる約15億次元の行列である。

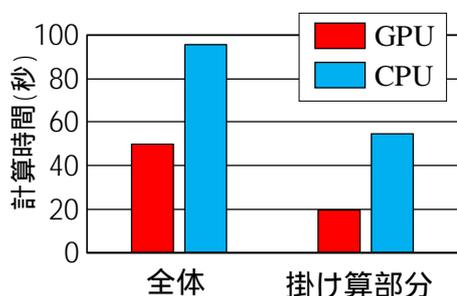


図2 2次元の20サイトハバードモデル(粒子数はアップおよびダウンとも6個)をGPUおよびCPU (Intel Xeon X5650) で計算した際の計算時間の比較。

(2) 計算の大規模化に伴って計算ごとに発生する誤差の影響が大きくなり計算結果の精度低下が指摘されている。この問題は、通常よりも高精度の変数 (real\*16 変数) を用いて計算することで回避できるが、非常に多くの計算時間がかかってしまう。そこで、通常精度の変数 (real\*8 変数) を2つ組み合わせて高精度の変数を表現する Bailey のアルゴリズムに基づいた4倍精度基本演算ルーチン群を開発するとともに、実際に4倍精度固有値計算ルーチン(QPEigenK)に利用した。その結果、通常の精度による計算よりも十数桁高精度で計算できるとともに、real\*16 変数を利用した場合よりも数倍高速に計算できることを確認した。さらに、最近のCPUがサポートしている高精度で積和演算ができる命令である FMA 命令を用いてルーチン群を再構成することで、高精度の固有値計算を数十パーセントの高速化が実現できることを確認した(図3参照)。

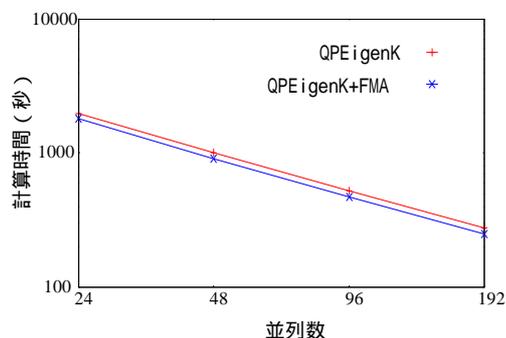


図3 原子力機構のSGI ICEX上で、4倍精度固有値計算ルーチン(QPEigenK)を用いて16000次元の対称行列の全固有値固有ベクトルを計算した際の計算時間。FMA命令を用いた高精度演算を用いることで高速に計算できることが確認できる。

(3) 本研究で固有値計算の反復法として利用しているLOBPCG法は、適切な前処理を用いることで収束性が向上することが知られている。そこで、Neumann展開を利用した前処理方法を提案した。この前処理方法は、行列ベクトル積の演算で実現できるため、この演算はこれまでに研究開発してきたハミルトニアンとベクトルの掛け算のアルゴリズムを利用することで、高速計算が実現できる利点がある。また、前処理を用いたところ、問題のパラメータによっては既存の前処理方法よりも高速に計算できることを確認した(図4参照)。さらに、量子問題の物理的性質から、計算量は若干増加するが、大規模並列計算で問題になる通信を減らすこと(省通信化)ができることを見出し、実際の並列計算から高速化が実現できることを確認した(図4参照)。

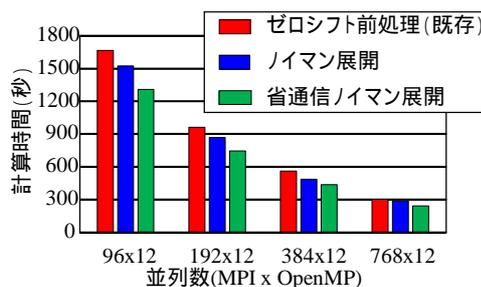


図4 24サイトハバードモデルの固有値をSGI ICEXで計算した際の計算時間。提案したノイマン展開前処理を使うことで既存の前処理よりも高速に計算できるとともに、省通信化することにより、さらなる高速化を実現していることが確認できる。

(4) 量子多体系を取り扱う手法の一つに、動的平均場理論がある。この理論では、有効不純物模型と呼ばれる量子模型を高精度に

繰り返し解く必要がある(図5参照)。その際、値の小さい固有値と固有ベクトルが必要であり、ハミルトニアン行列の逆行列で表現されるグリーン関数が必要である。そこで、固有値問題の解法には本研究で開発したLOBPCG法を、グリーン関数の計算にはShifted CG法を用いた。Shifted CG法では、逆行列をベクトルで挟み込んだ内積のみを計算する縮約shifted CG法(RSCG法)を開発し、計算の高速化を達成した。

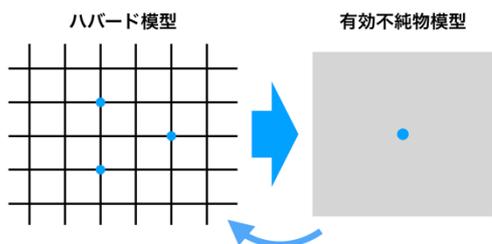


図5 動的平均場理論での計算手順。量子多体系を有効不純物模型にマップし、その模型のグリーン関数を高精度に求める。得られたグリーン関数を元の模型に戻し新しい有効不純物模型を作ることを繰り返す。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 8件)

Susumu Yamada, Toshiyuki Imamura, Masahiko Machida, Communication Avoiding Neumann Expansion Preconditioner for LOBPCG Method: Convergence Property of Exact Diagonalization Method for Hubbard Model, *Advance in Parallel Computing*, 査読有, 2017, Vol. 32, 27-36  
DOI: 10.3233/978-1-61499-843-3-27

Yuki Nagai, Yukihiro Ota, and K. Tanaka, Time-reversal symmetry breaking and gapped surface states due to spontaneous emergence of new order in d-wave nanoislands, *Physical Review B*, 査読有, 2017, Vol. 96, 060503(R)-1~6  
DOI: 10.1103/PhysRevB.96.060503

Keita Kobayashi, Masahiko Okumura, Susumu Yamada, Masahiko Machida, Superconductivity in repulsively interacting fermions on a diamond chain: Flat-band-induced pairing, *Physical Review B*, 査読有, 2016, Vol. 94, 214501-1~7  
DOI: 10.1103/PhysRevB.94.214501

Susumu Yamada, Toshiyuki Imamura, Machida Masahiko, High-performance

Eigenvalue Solver in Exact-diagonalization Method for Hubbard model on GPU, *Parallel Computing: On the Road to Exascale*, 査読有, Vol. 27, 2016, pp.361-369  
DOI: 10.3233/978-1-61499-621-7-361

[学会発表](計 14件)

Susumu Yamada, Toshiyuki Imamura, Masahiko Machida, High Performance LOBPCG Method for Solving Multiple Eigenvalues of Hubbard Model: Efficiency of Communication Avoiding Neumann Expansion Preconditioner, SC-ASIA 2018, 2018年.

Susumu Yamada, Toshiyuki Imamura, Takuya Ina, Narimasa Sasa, Yasuhiro Idomura, Masahiko Machida, Quadruple-precision BLAS using Bailey's arithmetic with FMA instruction; Its performance and applications, iWAPT17 (IPDPS17 Workshop), 2017年.

Y. Nagai, Y. Ota, K. Tanaka, Time-reversal symmetry breaking phase, gapped surface states, and vortex-antivortex pair in d-wave nanoislands, 16<sup>th</sup> International Workshop on Vortex Matter in superconductors, 2017年.

Susumu YAMADA, Toshiyuki IMAMURA, Masahiko MACHIDA, High performance eigenvalue solver for Hubbard model on CPU-GPU hybrid platform, SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP16), 2016年.

永井佑紀、藤原康、山田進、他3名、動的平均場理論に対するLOBPCG法とshifted COCG法を用いた厳密対角化ソルバー、日本物理学会2016年秋季大会、2016年.

## 6. 研究組織

(1)研究代表者

山田 進 (YAMADA, Susumu)  
国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・研究主幹  
研究者番号: 80360436

(2)研究分担者

町田 昌彦 (MACHIDA, Masahiko)  
国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・研究主席  
研究者番号: 60360434

大橋 洋士 (OHASHI, Yoji)  
慶應義塾大学・理工学部 (矢上)・教授  
研究者番号 : 60272134

永井 佑紀 (NAGAI, Yuki)  
国立研究開発法人日本原子力研究開発機  
構・システム計算科学センター・研究職  
研究者番号 : 20587026

太田 幸宏 (OTA, Yukihiro)  
国立研究開発法人日本原子力研究開発機  
構・システム計算科学センター・研究員  
研究者番号 : 60386597  
(平成 28 年 2 月 8 日削除)