

機関番号：82110

研究種目：基盤研究 (C)

研究期間：2008～2010

課題番号：20500044

研究課題名 (和文) 量子多体問題に対する並列シミュレーション手法の研究開発

研究課題名 (英文) Development of Parallelization Method of Simulation Method for Quantum Many-body Problem

研究代表者

山田 進 (YAMADA SUSUMU)

独立行政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・研究副主幹

研究者番号：80360436

研究成果の概要 (和文)：本研究では、量子多体問題のシミュレーション手法である密度行列繰り込み群 (DMRG) 法の並列化・高速化手法の研究開発を行った。量子多体問題の隠れた対称性を利用した並列化手法およびマルチコア並列計算機のネットワーク構造を考慮した通信手法を提案し、1000 を超えるコア数の並列計算で優れた並列性能を達成できることを確認した。また、この提案した並列 DMRG 法を利用して、実際に 2 次元の量子多体問題のシミュレーションを実施し、それらの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 developed the parallelization strategy and speedup technique of the density matrix renormalization group (DMRG) method which is one of the numerical simulation methods for the quantum many-body problem. We proposed the parallelization strategy derived from the symmetry of the problem. And then, we developed the communication strategy which is suitable for the network architecture of multi-core cluster systems. As a result, we confirmed that our method can achieve the good scalability on 1024 cores. Moreover, we simulated the 2-dimensional quantum many-body problems and discussed the property of the problem by using the simulation results.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2009年度	1,400,000	420,000	1,820,000
2010年度	1,000,000	300,000	1,300,000
年度			
年度			
総計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

研究分野：並列計算

科研費の分科・細目：情報学・ソフトウェア

キーワード：並列アルゴリズム、ハイパフォーマンスコンピューティング、量子計算

1. 研究開始当初の背景

(1) 量子多体問題に対する数値的な手法による研究は、歴史的には量子力学の発展と共にあったが、1986年に発見された高温超伝導体の機構解明に数値シミュレーション手法が盛んに用いられて以来、数値計算手法の発展と完全に不可分な関係であった。特に、2004年にフェルミ原子ガスの超流動性が確

認されて従来の理解を遥かに超えた超強結合の超流動が実現可能であることが示され (超流動と超伝導が理論的には同等であることから、室温レベルで超伝導が原理的に実現可能であることを意味している)、互いに極めて強く相互作用する量子多体問題を解くことの重要性が注目され、数値シミュレーション手法の開発が世界的レベルで叫ばれ

ていた。しかしながら、量子多体系問題はその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、並列計算機の利用が強く望まれていた。

(2) 2002年に超並列計算機「地球シミュレータ」が開発されて以降、数千を超えるプロセッサを高速なネットワークで接続した超大規模な並列計算機が多数出現し、2000年代後半には一般ユーザーでも大規模な並列計算機を容易に利用できる環境になってきた。しかし、それまでに開発・提案されてきた並列化手法のすべてがこのような大規模な並列計算機を想定しているわけではなく、そのような並列化手法を大規模な並列計算機でそのまま利用しても、その性能を常に引き出せるわけではなかった。そのため、並列計算機の大規模化に伴い、計算量をこれまで以上に均一に分割することや、通信量を少なくすることなど、大規模並列計算機の構成を考慮した並列化を実施することが必要になってきた。しかし、このような並列化は一般の計算機ユーザーには困難である。そのため、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) 大規模な1次元の量子多体系問題向きの解法として密度行列繰り込み群 (DMRG 法) が提案されている。この方法を直接2次元モデルに拡張すると計算サイズが指数関数的に増加するため、2次元系を特殊な1次元系とみなして計算する方法等が提案されていたが、精度に関して問題があることが指摘されていた。そこで、DMRG法のアルゴリズムを計算科学の立場から見直し、有効な並列化に繋がる物理モデルの隠れた対称性の洗い出しやアルゴリズムの再構築の可能性について研究する。その後、それらを考慮した2次元モデル用の高速並列版のプログラムを構築し、理論物理学者と協力して量子多体系の量子状態を調べることを目的とする。

(2) 量子多体系問題の詳細な物性を調べるためには、量子状態の動的な振舞いや時間発展をシミュレーションする必要がある。1次元モデルに対しては DMRG 法を用いて動的な振舞い等のシミュレーションが実施されているが、2次元モデルに対しては、精度や計算時間の問題から、ほとんど実施されていない。そのため、(1)の成果である直接2次元モデルに拡張した並列 DMRG 法を基に、動的な振舞い等をシミュレーションするための並列計算アルゴリズムを開発することを目的とした。また、実際に2次元モデルのシミュレーションを実施し、その結果を理論物理学

者と考察することで、強相関量子問題の物性の解明に寄与することを目指した。

3. 研究の方法

(1) アプリケーションの並列化では、計算量の最も多い演算を重点的に並列化することが重要である。DMRG法で最も計算量の多い演算が量子多体系モデルのエネルギーを表現するハミルトニアン行列の固有値を反復法で計算する際のハミルトニアン (疎行列) とベクトルの掛け算であることに注目し、この掛け算部分を中心に並列化・高速化を実施する。また、利用する計算機のネットワークの構造を考慮した高速化アルゴリズムを提案する。

(2) より詳細な量子物性を調査するための2次元モデル用の動的 DMRG 法を(1)で開発した並列 DMRG 法を基に研究開発する。この際、最新の数値アルゴリズムの有効性を考察し、問題の性質に合わせて適切なアルゴリズムを採用する。

(3) 開発する並列 DMRG 法を用いて、高精度かつ大規模な数値シミュレーションを実行し、量子多体系問題の物性についての検討を行う。この際、開発した計算手法の妥当性を確認するため、共同研究者らによる理論的解析を参考にし、シミュレーションと理論の両面から現象の解明を行う。

4. 研究成果

(1) DMRG法において最も計算量が多い演算であるハミルトニアン行列の固有値計算を並列化・高速化するため、この固有値計算において最も重要な演算であるハミルトニアン (疎行列) とベクトルの掛け算を中心に並列化・高速化を実施した。通常、疎行列とベクトルの掛け算の並列化では疎行列を分割して並列計算するが、疎行列の非零要素の分布が不均一だと効率的な並列計算が困難である。そこで、対象とする量子多体系特有の対称性を利用してハミルトニアンを分割すると、非零要素の分布が規則的になることに着目した。この性質を利用することで、疎行列であるハミルトニアンとベクトルの掛け算を3つの疎行列と密行列の掛け算の和に変換することができ、密行列を均等に分割することで均等な計算量に分解することができることを見出した。ただし、3つの掛け算の密行列の要素の配置は異なるため、全プロセス間で同時に通信を行う all-to-all 通信が必要になる。実際、この並列化法を用いて、量子多体系問題の代表であるハバードモデルの電子状態を計算したところ、図1のように128プロセッサまで並列化の効果が得られることを確認した。

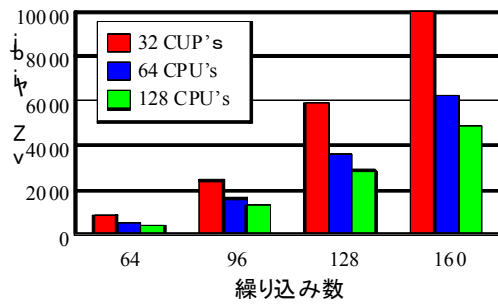


図 1 日本原子力研究開発機構所有の SGI Altix 3700Bx2 を用いて 4×10 格子のハバードモデルを並列計算した際の計算時間。繰り込み数は DMRG 法を計算する際に考慮する状態数で、多くすれば精度は向上するが、計算量は増加する。

(2) 開発した並列 DMRG 法を利用し、2次元のハバードモデルの粒子密度分布を高精度で計算することに成功した(図2参照)。また、直接2次元モデル用に拡張しているため、フラストレーションが強く、これまでの方法では高精度のシミュレーションが困難であった三角格子モデルも高精度に計算することを可能にした(図3参照)。

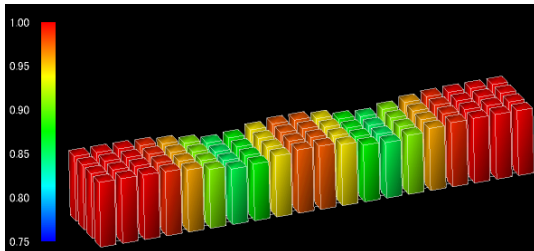


図 2 4×20 サイトハバードモデルの粒子密度分布。(U/t=5、粒子数：76 個)

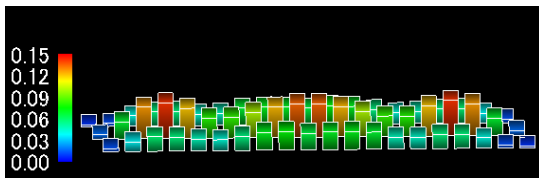
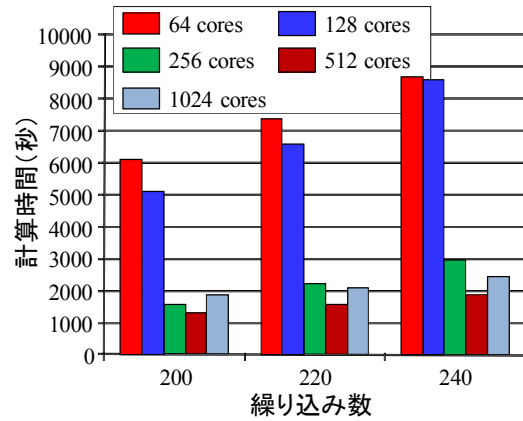


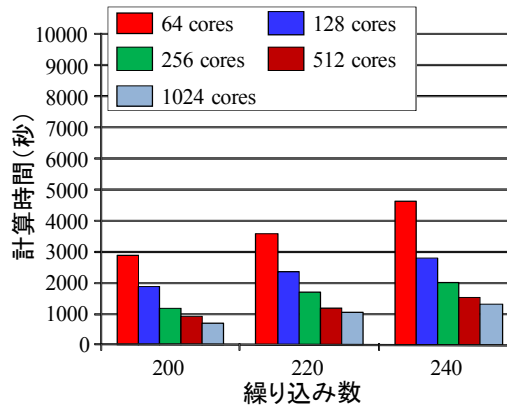
図 3 三角格子 (3×20 サイト)ハバードモデルのホール分布。(U/t=10、粒子数：56 個)

(3) 1つのプロセッサの中に複数の演算器(コア)を有するマルチコアプロセッサをネットワークで接続したマルチコア並列計算機が主流になってきた。このマルチコア並列計算機のネットワーク性能の向上はコア数の増加に伴っておらず、1つのコアあたりの

ネットワーク性能は低下する傾向にある。そのため(1)で提案した並列化方法で利用している全プロセス間での同時に通信を行う all-to-all 通信はマルチコア並列計算機での大規模並列計算に向いていない(図4(a)参照)。そこで、ベクトルを密行列に変換する際の要素の配置を考慮することで、全プロセス間での all-to-all 通信を必要としない通信方法を提案し、実際にマルチコア計算機による計算でその有効性を確認した(図4(b)参照)。



(a) all-to-all 通信を利用



(b) 提案した通信方法を利用

図 4 日本原子力研究開発機構所有の FUJITSU BX900 を用いて 4×10 格子のハバードモデルを並列計算した際の計算時間。

(4) 開発した並列 DMRG 法を基に 2次元モデル用の動的 DMRG 法を開発した。また動的 DMRG 法に現れる複素対称(エルミートではない)行列を係数に持つ連立一次方程式の計算方法に CG 法を利用するのが一般的であったが、係数行列の性質を考慮し COCG 法を採用した。これにより、約 2 倍の高速化を実現した。これらの成果を用いることで、2-leg ハ

バードモデルのスペクトルを系統的に計算することが可能になった (図5参照)。

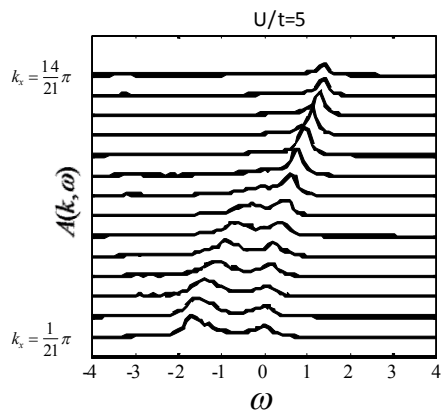


図5 2×20 格子のハバードモデルの一粒子励起スペクトル。

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 14 件)

- ① M. Machida, M. Okumura, S. Yamada, Stripe formation in fermionic atoms on a two-dimensional optical lattice inside a box trap: Density-matrix renormalization-group studies for the repulsive Hubbard model with open boundary conditions, Phys. Rev. A 77, 033619 (2008)
- ② S. Yamada, M. Okumura, M. Machida, High Performance Computing for Eigenvalue Solver in Density-Matrix Renormalization Group Method: Parallelization of the Hamiltonian Matrix-Vector Multiplication, J. M. L. M. Palma et al. (Eds.), VECPAR 2008. LNCS, Vol. 5336, pp. 39-45, Springer, Berlin, 2008.
- ③ M. Machida, S. Yamada, M. Okumura, Y. Ohashi, H. Matsumoto, Correlation effects on atom-density profiles of one- and two-dimensional polarized atomic Fermi gases loaded on an optical lattice, Phys. Rev. A 77, 053614 (2008)
- ④ S. Yamada, M. Okumura, M. Machida, Direct Extension of Density-Matrix Renormalization Group to Two-Dimensional Quantum Lattice Systems: Studies of Parallel Algorithm, Accuracy, and Performance, J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2009) 094004.
- ⑤ 山田進, 今村俊幸, 町田昌彦, マルチコアクラスタのネットワーク構造を考慮した並列密度行列繰り込み群法の通信

手法、日本計算工学会論文集 Vol. 2009、論文番号 20090015、(2009)。

[学会発表] (計 18 件)

- ① S. Yamada, M. Okumura, M. Machida, High Performance Computing for Eigenvalue Solver in Density-Matrix Renormalization Group Method: Parallelization of the Hamiltonian Matrix-Vector Multiplication, VECPAR'08 - 8th International Meeting High Performance Computing for Computational Science, Toulouse (France), 24-27 June 2008.
- ② 山田進, 今村俊幸, 奥村雅彦, 町田昌彦, 超並列固有値計算手法の開発: 大規模量子計算への応用, 先駆的科学計算に関するフォーラム 2008 ~線形計算を中心に~, 福岡市, 2008年9月.
- ③ 山田進, 今村俊幸, 奥村雅彦, 町田昌彦, マルチコアクラスタ向け通信手法を用いた密度行列繰り込み群法の並列化, 2009年並列/分散/協調処理に関する『仙台』サマー・ワークショップ (SWoPP 仙台 2009), フォレスト仙台(仙台市), 2009年8月6日.
- ④ S. Yamada, H. Onishi, R. Igarashi, M. Okumura, M. Machida, Parallel DMRG with Multi-site Clustering toward More Than 10-leg Ladders, International Workshop on Density Matrix Renormalization Group and Other Advances in Numerical Renormalization Group Method, Beijing (China), 30 Aug. 2010.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山田 進 (YAMADA SUSUMU)

独立行政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・研究副主幹

研究者番号: 80360436

(2) 研究分担者

町田 昌彦 (MACHIDA MASAHIKO)

独立行政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: 60360434

大橋 洋士 (OHASHI YOJI)

慶應大学・理工学部・准教授

研究者番号: 60272134

今村 俊幸 (IMAMURA TOSHIYUKI)

電気通信大学・電気通信学部・准教授

研究者番号: 60361838

松本 秀樹 (MATSUMOTO HIDEKI)

東北大学大学院・理学研究科・研究支援者

研究者番号: 40209648