

令和 5 年 6 月 19 日現在

機関番号：82110

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2018～2022

課題番号：18K11345

研究課題名（和文）エクサスケール計算機を想定した量子モデルシミュレーションに対する並列化・高速化

研究課題名（英文）High Performance Computing for Quantum Model Simulations on Exascale Computers

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） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では電子間に強い相関のある量子多体モデルであるハバード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固有値を計算する方法の一つであるLOBPCG法の並列化・高速化を実施した。LOBPCG法は線型計算の組み合わせであり、すでに開発されている線型計算用のルーチンを用いることである程度高速に計算できるが、このルーチンは汎用的であるため、問題の性質を利用した高速化を実現できない。そこで、問題の物理的性質やLOBPCG法のアルゴリズムを考慮して計算コードを再構築することで高速化や並列化を実施し、実際に並列計算機を利用した計算から開発したコードにより更なる高速化が実現できることを確認した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

計算機の大規模化に伴ってこれまでよりも大規模な問題が計算できるようになってきたが、計算機の構造が複雑化しているため、これまでの方法では高速に計算することが難しくなってきた。そこで、固有値計算ルーチンの一つであるLOBPCG法を対象にしてはいるが、最新の計算機の構造を考慮した高速化や効果的な並列化の方法を提案し、これまで以上に大きい物理モデルの計算を可能にするとともに、実際にこれまで以上に高速計算できることを確認した。この高速化や並列化の技術は他の計算に利用できる可能性があり、今回の研究成果は最新の計算機の有効利用に資する成果でもありと考えている。

研究成果の概要（英文）： In this study, we have studied parallelization and acceleration techniques for the LOBPCG method, which is one of the eigenvalue solvers for a quantum many-body model with strong correlation between electrons. The LOBPCG method is composed of a combination of linear operations. Therefore, we have developed routines for the linear operations in consideration of the algorithm of the LOBPCG method and the characters of the models. The simulation results show that the LOBPCG method using our routines can achieve higher performance.

研究分野：高性能計算

キーワード：高性能計算 固有値計算 LOBPCG法 GPU

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 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の研究開発は、天然資源が少なく科学立国である日本にとって重要な課題の一つである。しかし、これら物質群の機能が発現する機構はわかっていないため、材料設計を行うためには、電子相関のある量子モデルに対する計算機シミュレーションを行う必要がある。しかし、この量子多体系問題を計算機シミュレーションする際の計算量やメモリの使用量は問題サイズの増加に伴って指数関数的に増加するため、より大規模な計算機の性能を有効に利用することが強く望まれていた。

(2) 一方、計算機の進歩は目覚ましく、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の利用が可能になるとともに、エクサスケールの計算機の実現も近いと考えられていた。そのため、これらの計算機を有効に利用することで、これまで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ると考えられていた。しかしながら、計算機の大規模化に伴ってその構造は複雑化し、それまでに開発されたアルゴリズムをそのまま利用したのでは計算機の性能が有効に引き出せないことが多くなってきた。そのため、最新の計算機の性能を有効に利用するために、細心の計算機の構造を考慮した計算アルゴリズムを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シミュレーションの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。厳密対角化法のために導かれたハミルトニアンの次元はサイズの拡大に伴って指数関数的に増加することが知られている。そこで、モデルの物理的性質から並列化や高速化につながる有効な対称性や規則性を見出し、これらを考慮した計算アルゴリズムを研究開発するとともに、計算機の構造の特徴も考慮することで最新の大規模並列計算機向きのアルゴリズムの開発を目指す。

(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。さらに、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) 本研究の固有値計算に用いる LOBPCG 法は、行列とベクトルの掛け算、および、ベクトルの線型計算の組み合わせで固有値の計算ができることに着目し、GPU 向きのアルゴリズムを提案する。ハバードモデルから導かれるハミルトニアンの非零成分がその物理的性質から規則的に分布することを利用して、ハミルトニアンとベクトルの掛け算の高速化・並列化を実施する。また、ベクトルの線型計算の組み合わせ順序を考慮して GPU 向きのアルゴリズムを提案する。

(2) 通常、GPU 側のメモリ量は CPU 側のメモリ量の数分の 1 であるため、データの一部を CPU 側のメモリに格納し、計算に必要なデータを GPU 側のメモリに転送して計算を行い、その結果を CPU 側にメモリに転送することで、GPU 側のメモリのみを利用した場合よりも、大規模な問題を計算することが可能になる。しかし、GPU 用に適切にチューニングされたプログラムは GPU 上で高速に実行できるが、CPU-GPU 間のデータ転送の通信時間は非常に長いので、データの転送量が多いと GPU による高速化の効果が得られなくなる。そのため、LOBPCG 法のアルゴリズムを適切に変更し、CPU-GPU 間の転送量をできるだけ少なくできるアルゴリズムを開発し、その有効性を確認する。また、LOBPCG 法は反復に用いるベクトルを複数個用いることで、複数の固有値・固有ベクトルを計算することができるが、安定に計算するためには、反復に用いるベクトルが直交化している必要がある。一般に用いられている修正 Gram-Schmidt 法を用いてベクトルの直交化を行うと、求める固有値・固有ベクトルの組数が増えると通信回数が組数の 2 乗で増加し、並列計算を行う際の高速化を阻害する原因の 1 つになる。そこで、通信回数を減らせる直交化方法を LOBPCG 法の性質を利用して提案し、その有効性を調査する。

(3) 求める固有値・固有ベクトルの個数が増えると収束性が遅くなる。そこで、反復に用いるベクトルを適切に修正することで、収束性を向上させる方法を提案する。

(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) 量子多体問題の厳密対角化法で用いる LOBPCG 法は反復法であり、行列(ハミルトニアン)とベクトルの掛け算と、ベクトルの線型計算の組み合わせで計算することができる。そのため、GPU で実行するためには、GPU 用に開発された計算ルーチン( cuSPARSE および cuBLAS )を用いて計算することで、GPU の性能をある程度有効に利用した計算が可能であるが、これらの計算ルーチンは汎用的であるため、計算対象の問題に合わせて構築したコードのほうが高速に計算できる場合がある。これまでに、ハミルトニアンとベクトルの掛け算に関しては、ハミルトニアンの非零要素が規則性に分布していることに着目し、GPU 向きの計算方法やデータの格納方法を提案して、高速計算コードを開発し、実際、2015 年頃の cuSPARSE に含まれる疎行列とベクトルの掛け算ルーチンよりも高速に計算できることが確認できた[1]。しかし、本科研費研究の開始時期(2018 年頃)の cuSPARSE のルーチンではバージョンアップによって高速化されており、2015 年頃に我々が開発したコードよりも高速に計算できるようになっていた。そこで、この掛け算において、データのアクセス順序や GPU のメモリ構造を考慮して計算コードの更なる最適化等を行い、実際に(2018 年当時の) cuSPARSE よりも 1.3 倍程度高速に計算できることを確認した(図 1 参照)。また、線型計算に関しては、キャッシュメモリが有効に利用できるように複数の同様の演算をまとめて計算するアルゴリズムを提案し、cuBLAS を組み合わせるよりも高速に計算できることを確認した(図 2 参照)。

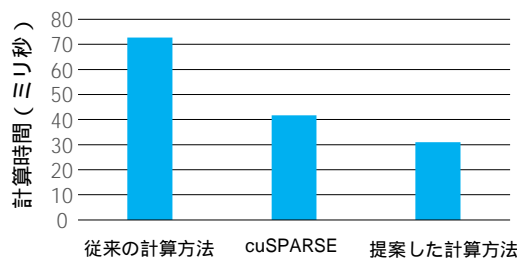


図 1 GPU 計算機を用いたハミルトニアンとベクトルの掛け算の計算時間。ハミルトニアンの次元は約 1.3 億次元である。

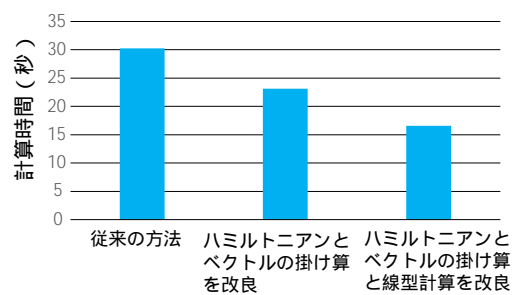
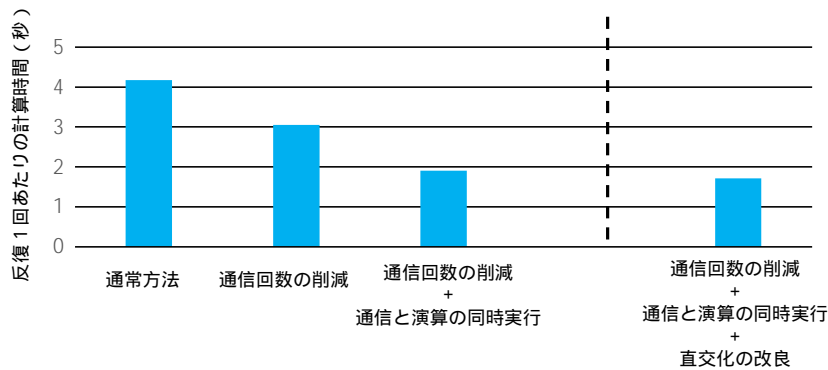


図 2 GPU 計算機を用いて約 1.3 億次元のハミルトニアンの最小固有値とそれに対応する固有ベクトルを求めた際の計算時間

(2) GPU を用いて計算する際には、計算に用いるデータが GPU のメモリ上にある必要がある。また、CPU のメモリサイズは GPU のメモリサイズよりも大きい場合、ある時点で GPU での計算に利用しないデータは CPU のメモリに格納し、計算を行う際に CPU から GPU に転送することや、GPU で計算した結果をすぐに GPU の計算で利用しない場合は CPU 側に移動させ CPU のメモリに格納することで、GPU のメモリのみを利用したケースよりも大きい問題を計算することが可能になる。ただし、CPU-GPU 間の通信には時間がかかることが指摘されている。そこで、LOBPCG 法のアルゴリズムを調査し、できるだけ CPU-GPU 間の通信を少なくなるようなアルゴリズムに修正することで、実際に CPU のメモリを有効に利用して計算することを可能にした。また、CPU-GPU 間の通信は演算と同時に実行できることから、通信と演算を同時に実行するためのアルゴリズムを提案し、GPU 計算機を利用したシミュレーションから同時実行していることを確認するとともに、実際に高速化が実現することを確認した(図 3 参照)。

さらに、LOBPCG 法は複数のベクトルを用いて反復計算を行うことで複数の固有値・固有ベクトルを求めることができる。しかし、安定に計算するためには、反復に用いるベクトルが直交化している必要がある。通常、ベクトルの直交化には修正 Gram-Schmidt 法を用いるのが一般的であるが、並列計算時の通信回数がベクトルの本数の 2 乗に比例する。そのため、求める固有値・固有ベクトルの組数が増えると通信のオーバーヘッドが増えるため、高速化が阻害される。ところが、LOBPCG 法のアルゴリズムの特徴を利用することで、一部のベクトルは通信を行わずに修正 Gram-Schmidt 法を用いた直交化よりも少ない計算量で直交化することができる。また、残りのベクトルも古典的 Gram-Schmidt 法と Cholesky QR 分解を組み合わせることで直交化でき、修正 Gram-Schmidt 法よりも少ない通信回数で直交化できることを見出した。この方法を実際に GPU に実装し、並列計算したところ、修正 Gram-Schmidt 法を用いて直交化する方法と比較し、より高速に計算できることを確認した(図 3 参照)。



**図3 約2億4千万次元のハミルトニアン $\mathcal{H}$ の10個の固有値をLOBPCG法で反復計算する際の反復1回あたりの計算時間**

(3) LOBPCG法を用いて複数の固有値・固有ベクトルの組を計算する際に用いるベクトルは、計算途中の固有値・固有ベクトルの組の情報を用いて生成される。通常、複数の固有値・固有ベクトルを計算する際には固有値・固有ベクトルの組ごとに収束速度が異なるため、一部の組が先に収束することがある。そして、収束した組の情報から生成されるベクトルのノルムは小さくなり、そのまま計算に用いると、反復計算が不安定になる。安定に計算するためには、そのようなベクトルを反復計算に用いないようにすればよいが、計算に用いるベクトルの数が減るため、まだ収束していない固有値・固有ベクトルの組の収束速度が遅くなることが実際の計算から示されている。そこで、収束した固有値・固有ベクトルから生成されるベクトルを適切に修正して反復計算に用いることで安定性および収束性を向上させる方法を提案し、実際の計算から安定に計算でき、また、少ない反復回数で収束することを確認した。

(4) LOBPCG法は固有値問題を解く際に有用なソルバーであるため、様々な物理現象の解析に使うことができる。本研究課題においては、格子量子色力学におけるクォーク・グルーオン系のモンテカルロシミュレーションにおいて使用した。機械学習を用いた自己学習モンテカルロシミュレーションにおいては、フェルミオンの自由度を積分する必要があり、その際に現れる行列式の計算において使用を試みた。行列式の計算においてはすべての固有値の情報が必要であるが、ゼロエネルギー近傍の物理的に重要な固有値を計算する際にLOBPCG法が使えるのではないかと考えた。直接対角化する場合と比べてLOBPCG法の効率は系のサイズに依存した。一方、モンテカルロシミュレーションにおけるフェルミオンに由来する行列式の評価においては、様々な数値的手法が開発されており、それらの手法と比べてLOBPCG法がどのような時に最適になるかは調査中である。

### 参考文献

- [1] S. Yamada, T. Imamura, and M. Machida, High Performance Eigenvalue Solver in Exact-diagonalization Method for Hubbard Model on CUDA GPU, *Parallel Computing: On the road to Exascale* (G. R. Joubert, et. al, Ed.), IOS Press, 361-369 (2016).

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 11件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki, Machida Masahiko	4. 巻 13214
2. 論文標題 High Performance Parallel LOBPCG Method for Large Hamiltonian Derived from Hubbard Model on Multi-GPU Systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 SCFA 2022: Supercomputing Frontiers, Lecture Notes in Computer Science	6. 最初と最後の頁 1~19
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-031-10419-0_1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Nagai Yuki, Tanaka Akinori, Tomiya Akio	4. 巻 107
2. 論文標題 Self-learning Monte Carlo for non-Abelian gauge theory with dynamical fermions	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review D	6. 最初と最後の頁 054501_1~16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevD.107.054501	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Kheirikhah Majid, Yan Zhongbo, Nagai Yuki, Marsiglio Frank	4. 巻 125
2. 論文標題 First- and Second-Order Topological Superconductivity and Temperature-Driven Topological Phase Transitions in the Extended Hubbard Model with Spin-Orbit Coupling	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 017001-1~8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.125.017001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Itou Etsuko, Nagai Yuki	4. 巻 2020
2. 論文標題 Sparse modeling approach to obtaining the shear viscosity from smeared correlation functions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of High Energy Physics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/JHEP07(2020)007	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Shinaoka Hiroshi, Nagai Yuki	4. 巻 103
2. 論文標題 Sparse modeling of large-scale quantum impurity models with low symmetries	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 045120-1 ~ 8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.045120	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nagai Yuki	4. 巻 89
2. 論文標題 N-independent Localized Krylov-Bogoliubov-de Gennes Method: Ultra-fast Numerical Approach to Large-scale Inhomogeneous Superconductors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 074703-1 ~ 6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.074703	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nagai Yuki, Shinaoka Hiroshi	4. 巻 88
2. 論文標題 Smooth Self-energy in the Exact-diagonalization-based Dynamical Mean-field Theory: Intermediate-representation Filtering Approach	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 064004-1 ~ 5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.064004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Susumu Yamada, Masahiko Machida, Toshiyuki Imamura	4. 巻 36
2. 論文標題 High Performance Eigenvalue Solver for Hubbard Model: Tuning Strategies for LOBPCG Method on CUDA GPU	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Parallel Computing: Technology Trends	6. 最初と最後の頁 105 ~ 113
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3233/APC200030	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nagai Yuki、Shinaoka Hiroshi	4. 巻 88
2. 論文標題 Smooth Self-energy in the Exact-diagonalization-based Dynamical Mean-field Theory: Intermediate-representation Filtering Approach	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 064004_1~5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.064004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yamada Susumu、Imamura Toshiyuki、Machida Masahiko	4. 巻 13214
2. 論文標題 High Performance Parallel LOBPCG Method for Large Hamiltonian Derived from Hubbard Model on Multi-GPU Systems	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 SCFA 2022: Supercomputing Frontiers, Lecture Notes in Computer Science	6. 最初と最後の頁 1~19
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/978-3-031-10419-0_1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Nagai Yuki、Tanaka Akinori、Tomiya Akio	4. 巻 107
2. 論文標題 Self-learning Monte Carlo for non-Abelian gauge theory with dynamical fermions	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review D	6. 最初と最後の頁 054501_1~16
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevD.107.054501	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計5件(うち招待講演 0件/うち国際学会 3件)

1. 発表者名 Susumu Yamada, Toshiyuki Imamura, Machida Masahiko
2. 発表標題 High performance parallel LOBPCG method for large Hamiltonian derived from Hubbard model on multi-GPU systems
3. 学会等名 Supercomputing Asia 2022 (SCA2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Susumu Yamada, Toshiyuki Imamura, Masahiko Machida
2. 発表標題 Tuning Strategy of Solving the Hubbard Model by LOBPCG Method on CUDA GPU
3. 学会等名 15th U.S. National Congress on Computational Mechanics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Susumu Yamada, Toshiyuki Imamura, Masahiko Machida
2. 発表標題 High performance eigenvalue solver for Hubbard model: Tuning strategies for LOBPCG method on CUDA GPU
3. 学会等名 Parallel Computing 2019 (ParCo 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山田進、今村俊幸、町田昌彦
2. 発表標題 複数固有値計算に対するLOBPCG法の収束性の改善方法
3. 学会等名 第188回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担 者	永井 佑紀  (Yuki Nagai)  (20587026)	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・副主任研究員    (82110)	



6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	大橋 洋士  (Ohashi Yoji)  (60272134)	慶應義塾大学・理工学部（矢上）・教授    (32612)	
研究分担者	町田 昌彦  (Machida Masahiko)  (60360434)	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    (82110)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関