

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 11 日現在

機関番号：82110

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23500056

研究課題名(和文) 2次元量子モデルに対するメニーコア並列計算機向き並列化・高速化手法の研究開発

研究課題名(英文) Development of parallelization strategy and speedup technique for 2D quantum system on many-core parallel machines

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・研究主幹

研究者番号：80360436

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円、(間接経費) 1,170,000円

研究成果の概要(和文)：本研究ではメニーコア計算機用を対象に、量子多体モデルのシミュレーション手法である密度行列繰り込み群法と厳密対角化法の並列化・高速化を実施した。特に、モデルの物理的性質と計算機のネットワークアーキテクチャを考慮して、高速な通信手法を提案しその有効性を確認した。また、開発したコードを実際の物理問題に適用し、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 have developed the parallelization strategy and the speedup technique for the simulation code of the many-body quantum system. Especially, we propose the communication algorithm in consideration of the network architecture of the many-core machines and the property of the quantum system, and then, we demonstrated that the algorithm can realize the high performance communications. Moreover, we simulate the real quantum problems using our developing codes and discussed the property of the problem by using the simulation results.

研究分野：総合領域

科研費の分科・細目：情報学・ソフトウェア

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

## 1. 研究開始当初の背景

(1) 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、現在のところ、これら物質群の機能発現機構はわかっていないため、材料設計を行うためには、計算機を利用して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、量子多体系モデル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、逐次計算機や小規模の並列計算機では現実的なモデルサイズのシミュレーションは困難であり、大規模な並列計算機の利用が強く望まれていた。

(2) 計算機の進歩は目覚ましく、その規模は現在では数万個のコアを持つ並列計算機も出現し、2012年には理化学研究所が中心になり開発を進めてきた数十万個のコアを有する京スパコンが稼働した。しかし、これまでの並列計算機はプロセッサ内のコアが数個のマルチコアプロセッサであったが、京スパコンを超える超大規模並列計算機では数十個～数十個のコアで構成されるメニーコアプロセッサになると考えられている。そのため、研究開発当時までに開発された並列計算方法の多くはそのままでは超大規模並列計算機の性能を有効に利用することができなかった。そのため、計算機の大規模化に伴い、計算量をこれまで以上に均等に分割することや、通信を適切に行うなど、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、超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) これまでに、電子相関のある量子モデル用のアプリケーションとして厳密対角化法および並列密度行列繰り込み群(DMRG法)を開発し、実際に並列計算機の性能を有効に利用したシミュレーションを可能にしてきている。しかしながら、これまでに開発した並列計算コードは一代前の並列計算機で利用しているシングルコアのプロセッサで構成された並列計算機を想定しているため、そのままでは今後主流になると考えられているメニーコアプロセッサの並列計算機では効率的な並列計算は困難であると考えられる。そこで、これまで開発してきた並列化コードを基にメニーコアのプロセッサ用のアルゴリズムを研究開発することを目的とした。

(2) より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。しかし、大規模な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、本研究での成果を利用して開発した並列計算アルゴリズムを利用して大規模な2次元モデルの動的な振舞い等をシミュレーションする。これにより、高精度での大規模2次元モデルシミュレーションが可能になり、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した。

## 3. 研究の方法

(1) 一般に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。厳密対角化法およびDMRG法では、量子多体モデルのエネルギーを表現する疎行列(ハミルトニアン)の固有値を反復法で計算する演算部分の計算量が多く、特にハミルトニアンとベクトルの掛け算部分が最も演算量の多い。そこで、この掛け算部分を中心に並列化・高速化を実施する。

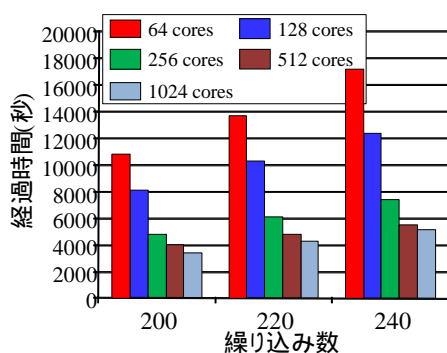
(2) 並列計算機ではネットワークを經由して通信を行うが、ネットワークの性能はコア数の増加に比例して向上おらず、コア数が増加するにつれて、コアあたりの帯域が小さくなる。そのため、メニーコアプロセッサで構成された並列計算機では、これまでの並列計算機と比較し、通信が性能低下の原因になると考えられる。そのため、モデルの物理的性質および計算機のネットワークの構造を考慮して、高速通信手法を提案する。

(3) 開発した並列厳密対角化法および並列DMRG法を利用して、より詳細な量子物性を調査する。この際、(2)で開発した通信手法を組み込み、実際の問題に対して、提案した通信方法の有効性および頑強性を調査する。

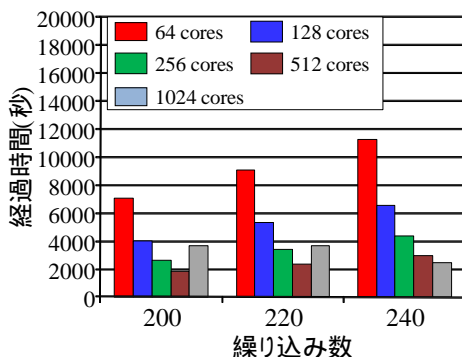
## 4. 研究成果

(1) DMRG法において計算量が最も大きい演算はハミルトニアンの固有値計算であり、この固有値計算において最も重要な演算ではハミルトニアン(疎行列)とベクトルの掛け算である。そこで、この掛け算を中心に並列化・高速化を実施した。この際に、対象とする量子多体問題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。このことから、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。この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。しかし、この all-to-all通信はマルチコアやメニーコアで構成された並列計算機には向いておらず、非常に多くの通信時間がかかることが指摘されている

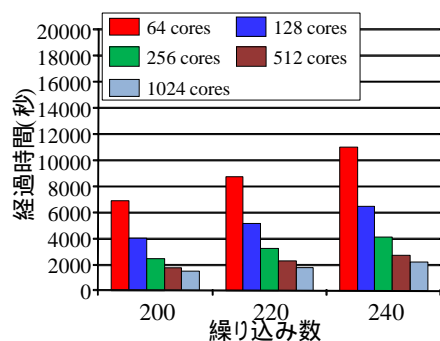
(図1(a))。そこで、問題の物理的性質を考慮してデータを分割することにより、全プロセス間での all-to-all 通信を必要としない通信方法を見出し、実際に並列数を増加させると高速化するが、逆に遅くなるケースもあった(図1(b))。そこで、この通信方法では、プロセスをいくつかのグループに分けて、グループごとに通信を行っていることに着目し、通信を行っていないグループでは、演算を行うことができることから、通信と演算を同時に実行することができることを見出した。実際、この方法により、図1のように1024コアまで並列化の効果が見られることを確認した(図1(c))。



(a) 通常の all-to-all 通信を利用



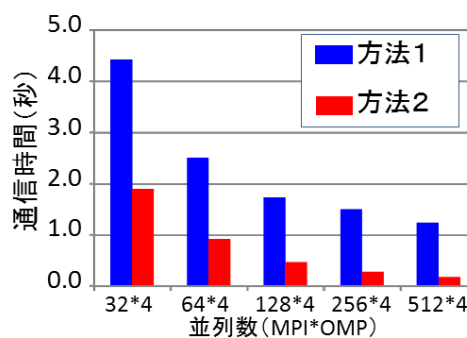
(b) 全プロセス間での all-to-all 通信を利用しない方法



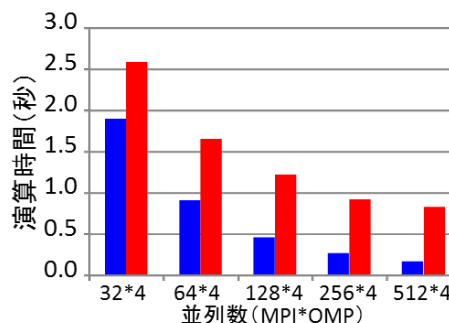
(c) 通信と演算を同時に実行する方法

図1 東京大学 T2K マシンを用いて2次元量子モデルをDMRG法でシミュレーションした際の経過時間

(2) 代表的な量子多体モデルの1つであるハバードモデルに対する厳密対角化法の並列化はすでに提案されている。しかしハバードモデルを拡張した多軌道のハバードクラスタモデルに対してはこれまでの並列化手法は適用できない。そこで、ストレートフォワードに並列化を拡張した方法(方法1)と、モデルの物理的性質を考慮してハミルトニアンを適切に分割することで、(1)で提案した通信手法を適用する方法(方法2)を開発した。各方法の掛け算部分の通信時間と演算時間を図2に示す。その結果、方法2の演算時間は短い通信時間が長い、方法2では通信時間が非常に短いことを確認した。



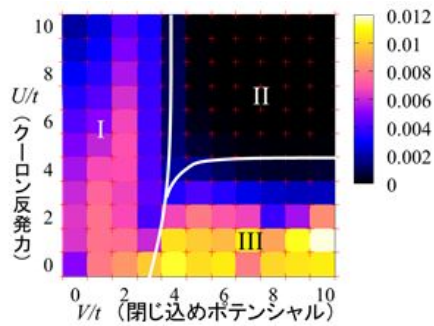
(a) 通信時間



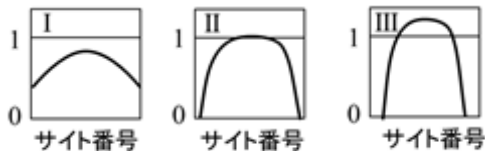
(b) 演算時間

図2 ハミルトニアンとベクトルの掛け算1回あたりの通信時間と演算時間

(3) DMRG法を並列化することで、準2次元(梯子型)の量子多体モデルを直接計算することが可能になった。この並列計算コードを利用し、2-leg(2x20サイト)ハバードモデルの超流動相関を計算し、結果を図3に示す。この結果から、超流動相関を強くするためには2パターンの閉じ込めポテンシャルの強さとクーロン反発力の強さの兼ね合い(図3の状態IとIII)があり、両者を同時にチューニングする必要があることを示した。この結果は、固体では量子相関の発達に対しクーロン反発力等の物質の本質的パラメータが主要な役割を果たすが、フェルミ原子ガスのような閉じ込めが必要な系では閉じ込めの影響も物性に重要な役割を果たすことを示唆している。



(a) 超流動相関



(b) 粒子分布

図 3: (a)は閉じ込めポテンシャル  $V$  とクーロン反発力  $U$  を変化させた際の 7 番目と 14 番目のサイトの超流動相関を示している。(b)は(a)の I, II, III 内の粒子分布の傾向を示している。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 7 件)

Susumu Yamada, Masahiko Okumura, Toshiyuki Imamura and Masahiko Machida, Direct extension of the density-matrix renormalization group method toward two-dimensional large quantum lattices and related high-performance computing, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 査読有, Vol. 28, No. 1, pp. 141-151, 2011.

DOI: 10.1007/s13160-011-0027-z

Keita Kobayashi, Masahiko Okumura, Yukihiro Ota, Susumu Yamada, and Masahiko Machida, Nontrivial Haldane Phase of an Atomic Two-Component Fermi Gas Trapped in a 1D Optical Lattice, Phys. Rev. Lett., 査読有, 109, 235302 (2012)

DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.235302

H. Matsumoto, T. Koyama, M. Machida, Y. Ota, and S. Yamada, Revisit to terahertz wave emission with motions of Josephson vortices, 査読有, Physica C: Superconductivity, Vol. 491, pp. 40-43, 2013.

DOI: 10.1016/j.physc.2012.12.010

Keita Kobayashi, Yukihiro Ota, Masahiko Okumura, Susumu Yamada, Masahiko Machida, Quantum phases in

p-orbital degenerated attractive one-dimensional fermionic optical lattices, Phys. Rev. A, 査読有, 89, 023625, 2014.

DOI: 10.1103/PhysRevA.89.023625

Susumu Yamada, Toshiyuki Imamura, Masahiko Machida, Parallel Computing Design for Exact Diagonalization Scheme on Multi-band Hubbard Cluster Models, Parallel Computing: Accelerating Computational Science and Engineering, 査読有, Vol. 25, 427-436, 2014.

DOI: 10.3233/978-1-61499-381-0-427

〔学会発表〕(計 13 件)

S. Yamada, T. Imamura, M. Machida, Parallelization design on multi-core platforms in density matrix renormalization group toward 2-D quantum strongly-correlated systems, SC11, Seattle (USA).

S. Yamada, T. Imamura, M. Machida, Dynamical Variation of Eigenvalue Problems in Density-Matrix Renormalization-Group Code, 15th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Savannah (USA).

山田進, 佐々成正, 今村俊幸, 町田昌彦, 4倍精度基本線形代数ルーチン群 QPBLAS の紹介とアプリケーションへの応用第 194 回計算機アーキテクチャ・第 137 回ハイパフォーマンスコンピューティング合同研究発表会 (HOKKE-20)、北海道大学学術交流会館 (札幌市)

山田進, 小林恵太, 奥村雅彦, 町田昌彦, SU(n)ハバードモデルに対する並列 DMRG 法の開発、日本物理学会 第 68 回年次大会 (広島大学)

S. Yamada, T. Imamura, and M. Machida, Parallel Computing Design for Exact Diagonalization Scheme on Multi-band Hubbard Cluster Models, Parco2013, Technische Universität München, Germany.

## 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・研究主席  
研究者番号: 60360434

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

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

(3) 連携研究者

今村 俊幸 (IMAMURA, Toshiyuki)  
独立行政法人理化学研究所・計算科学研究  
機構・チームリーダー  
研究者番号：60361838