

令和 元 年 6 月 19 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2018

課題番号：26730062

研究課題名（和文）高並列なオープンソース量子格子模型シミュレーションソフトウェアの開発

研究課題名（英文）Development of open-source quantum lattice model simulation software

研究代表者

五十嵐 亮（Igarashi, Ryo）

東京大学・情報基盤センター・特任講師

研究者番号：10548895

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,000,000 円

研究成果の概要（和文）：Matrix Product State(MPS)法のシミュレーションプログラムの開発に際し、多数の行列演算が必要となるが、ただ単に並列化するだけでなく、行列の性質を利用し、行列に対する近似を行う Randomized SVDの評価を行い、速度が2倍になり、さらに近似の導入に伴う計算精度の問題はないことを学会で発表し、テンソルくりこみ群法にこのRandomized SVDを適用した論文を出版した。また、厳密対角化法やMPSのシミュレーションプログラムも含まれており、共同開発を行っているALPSプロジェクトのライブラリに関する論文も出版された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

近年の高並列なスーパーコンピュータ上では、並列計算を効率よく行うために計算方法に近似を入れることがある。その近似が量子格子模型のシミュレーションの場合に精度の問題がないことを確認し、計算速度もこれまでの手法の2倍以上になることがわかった。これは、量子格子模型のシミュレーション手法であるテンソルネットワーク法に広くつかうことのできる手法である。

研究成果の概要（英文）：When developing a simulation program for the Matrix Product State (MPS) method, very large number of matrix operations are required. We need not only mere parallelization, but using the property of the matrix to evaluate. We evaluated Randomized SVD, which approximates the matrix, and presented at the conference that there was no problem with the calculation accuracy due to the introduction of the approximation, and the paper that applied this Randomized SVD to the tensor renormalization group method was published. In addition, the paper of ALPS project, which we co-develop worldwide which contains diagonalization method and MPS programs, was also published.

研究分野：計算物性物理学

キーワード：高性能計算 量子格子模型 テンソルネットワーク 数値線形代数

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

研究開始当初、数万ノードかつ数十万計算ユニットをもつ超並列スーパーコンピュータ上で効率よく計算するためには、計算機科学としてのアルゴリズムや実装の工夫が必要であることが明白であった。ところで、本研究でターゲットとする量子格子模型のシミュレーションプログラムは、大規模かつ大量の行列演算が必要となるが、基本的なアルゴリズムが日進月歩のため、並列化の考慮がされていないことが多いだけでなく、利用する行列の演算が微分方程式の解法の際に利用される行列解法とは性質が少し異なり、近年の計算機科学の発展の結果を直接適用することが難しいケースが見受けられた。そのため、超並列スーパーコンピュータで効率のよいアルゴリズムとその実装の両方が必要であるという背景で、研究を開始した。

2. 研究の目的

本研究の目的は、第一に、今後さらに並列度が上がると予測されている、数万ノードかつ数十万計算ユニットをもつ超並列スーパーコンピュータ上で性能を発揮できる、汎用かつ高速に実行可能な量子格子模型のシミュレーションプログラムを開発し、オープンソースプログラムとして広く一般に公開することである。高速に実行するためには、単に並列化を実装するだけでなく、計算内容を見直して、超並列スーパーコンピュータに適した数値計算アルゴリズムへの考慮も当然必要となる。

本研究の成果となるプログラムは、計算物性物理の専門家や当該分野を志望する学部学生や大学院生だけでなく、異分野の研究者のリファレンスとなりうる高品質なソフトウェアの開発を主眼とする。第二に、当該ソフトウェアを利用し、多彩な物性を示すフラストレート系のシミュレーションを行うことで、フラストレーション系の物性の解明につなげることを目的とする。

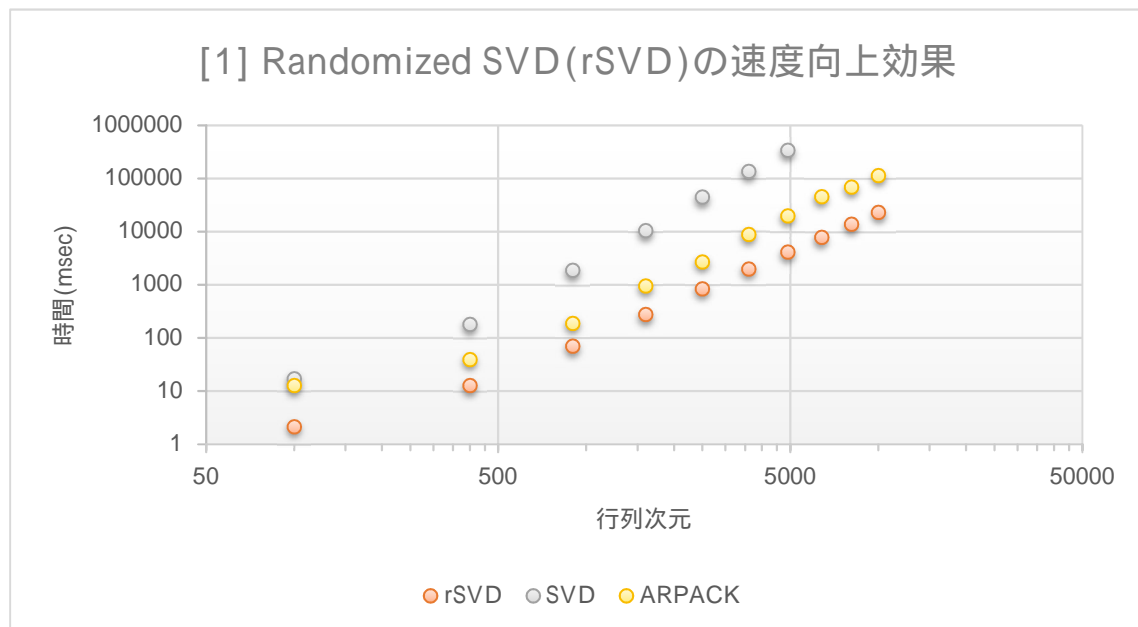
3. 研究の方法

本研究では、厳密対角化法および Matrix Product State(MPS) 法のシミュレーションプログラムを開発し、そのプログラムを MPI/OpenMP ハイブリッド並列化を行い、GPU への最適化を行う。その後、複数 GPU システムのスーパーコンピュータへの発展させていく予定であった。しかしながら、現状のアルゴリズムは並列化にボトルネックがあることがわかり、超並列で効率よく計算を行うにはアルゴリズムの変更が必要となり、そちらの検討を先行させた。その結果、残念ながら計算量のオーダーの削減にはつながらないが、並列性能の向上につながる Randomized SVD のテンソルネットワークへの導入の検討・評価を行うこととなった。

上記開発に並行して、ソフトウェアの公開だけでなく、実際に他の理論家や実験家、学生等による開発ソフトウェアの利用を促進することも同程度に重要であるため、少人数のチュートリアル等も並行して開催し、開発へのフィードバックを受けつつ開発を進めた。

4. 研究成果

Matrix Product State(MPS)法のシミュレーションプログラムの開発に際し、多数の行列演算が必要となるが、ただ単に並列化するだけでなく、行列の性質を利用し、行列に対する近似を行うことで計算量自体の削減をはかる可能性のある手法があることがわかり、そちらを先に行うこととなった。例えばテンソルネットワークの計算においては大規模な次元削減を行うために特異値分解(SVD)の計算が多用されるが、計算量は削減されないが、並列化効率の上昇につながる Randomized SVD の評価を行い、MPS 法の計算に出てくる行列の範囲内では近似の導入に伴う計



算精度の問題はなく、既存のクリロフ部分空間法による実装(ARPACK)よりも速度も 2 倍以上になることを確認し、本成果を学会で発表した[1]。

また、MPS とは類似する手法であるテンソルくりこみ群法にこの Randomized SVD を適用した論文を出版した。また、厳密対角化法や MPS のシミュレーションプログラムも含まれており、共同

開発を行っている ALPS プロジェクトのライブラリに関する論文も出版された。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 2 件)

1. Updated core libraries of the ALPS project,
A.Gaenko, A.E.Antipov, G.Carcassi, T.Chen, X.Chen, Q.Dong, L.Gamper, J.Gukelberger,
R. Igarashi, S. Iskakov, M. Könz, J. P. F. LeBlanc, R. Levy, P. N. Ma, J. E. Paki, H. Shinaoka,
S. Todo, M. Troyer, E. Gull

Comp. Phys. Comm., 213, 235-251 (2017)

2. Tensor renormalization group with randomized singular value decomposition,

Satoshi Morita, Ryo Igarashi, Hui-Hai Zhao, and Naoki Kawashima,

Phys. Rev. E 97, 033310 (2018)

〔学会発表〕(計 3 件)

1. 第 5 回 CMSI 研究会, MPS における特異値分解へのランダムネスの効果, 五十嵐 亮, 2014.12.8-10, 東北大学金属材料研究所, 宮城, ポスター発表

日本物理学会第 70 回年次大会, MPS アルゴリズムにおけるランダムネスの効果, 五十嵐 亮, 2015.3.22, 早稲田大学, 東京, ポスター発表

2. 日本物理学会 2015 年秋季大会, 乱択特異値分解を用いたテンソルネットワーク法の性能評価, 森田 悟史, 五十嵐 亮, 2015.9.16-19, 関西大学, 大阪, ポスター発表

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0 件)

名称:

発明者:

権利者:

種類:

番号:

出願年:

国内外の別:

取得状況 (計 0 件)

名称:

発明者:

権利者:

種類:

番号:

取得年:

国内外の別:

〔その他〕

ホームページ等

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名:

ローマ字氏名:

所属研究機関名:

部局名:

職名:

研究者番号 (8 桁):

(2) 研究協力者

研究協力者氏名:

ローマ字氏名:

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。