

量子多体問題における自由度の壁とそれを越える 並列対角化アルゴリズムの開発 :地球シミュレータ上での超並列量子計算の現状

日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター 山田 進*
電気通信大学 情報工学科 今村俊幸*
日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター 町田昌彦*

1 はじめに

1986 年, 従来の物性物理の常識を超えた銅酸化物高温超伝導体が発見され, さらに, 2004 年にフェルミ原子ガスで, 想像を遙かに越えた超強結合の超流動が実現していることが確認され, 量子多体問題を解くことの重要性が再認識されている. しかしながら, 2 次元以上の高次元空間で量子多体問題を解析的に解くことは極めて困難であり, 代わって数値シミュレーションが有力な手法として注目されている.

本論文では, 量子多体問題を数値シミュレーションする方法として, 全自由度を考慮して基底状態 (および数個の励起状態) を計算する厳密対角化法, 全ての状態を計算する全対角化, 重要な自由度のみを考慮して基底状態を計算する密度行列繰り込み群の 3 つの手法に注目する. また, 実際に地球シミュレータを用いて得られた数値シミュレーションの結果を紹介する.

2 厳密対角化法

厳密対角化法は量子多体問題をシミュレーションする方法の 1 つであり, モデルの全自由度を”厳密に”考慮したハミルトニアンを”対角化 (固有状態を計算)”する方法である. 実際はエネルギーの低い固有状態が低温で支配的であるため, 全ての固有状態を必要とすることは稀であり, 現実的には基底状態あるいはその近傍の数個の励起状態を求めれば良く, 計算量の点から解法には反復法が利用される. 以下では厳密対角化法に伝統的に利用されてきた Lanczos 法 [1] に基づく固有値計算法, および Knyazev の提案した共役勾配法による固有値計算法 (LOBPCG) [2, 3] の 2 つの解法を説明し, 後者の手法により計算時間が格段に短縮されることを示す. また, 実際に地球シミュレータを利用して 1000 億次元を超えるハミルトニアンの基底状態を計算した際の計算性能および, 実際に得られた物理結果を紹介する.

2.1 Lanczos 法

格子上の量子多体問題の典型的なモデルとしてハバードモデルがある. このハバードモデルのエネルギーを表現するハミルトニアンは大規模な対称疎行列であるため, 基底状態の計算にはメモリ量が少ない Lanczos 法に基づく固有値計算法が伝統的に用いられてきた (図 1(a) 参照). しかし, Lanczos 法は反復の途中で, 固有値・固有ベクトルの精度を評価することが難しく, あらかじめ余裕を持った反復回数を決めて計算することになる. また, 反復計算では固有ベクトルを直接計算しないため, 反復計算終了後に固有ベクトルを計算するための追加の演算を必要とするため, 計算量に関する欠点が指摘されている [4].

*CREST(JST)

2.2 共役勾配法

この Lanczos 法の欠点を克服するため、我々は量子問題の固有値計算に前処理付共役勾配法 (PCG 法) の理論に基づいた計算方法を採用した [2, 3, 4]. これは、PCG 法を利用して Rayleigh 商

$$\rho(x) = \frac{(x, Ax)}{(x, x)} \quad (1)$$

を最小にする x (固有ベクトル), および, その時の値 $\rho(x)$ (最小固有値) を求める方法である. ここで A は対称疎行列とする. 図 1(b) に Knyazev により提案された方法 (LOBPCG) を示す [2, 3]. ここで, T は前処理行列である. このアルゴリズムでは, 反復毎に残差 $(Ax - \mu x)$ を計算しており, また, 反復ベクトル x がそのまま固有ベクトルになるため, Lanczos 法で指摘された計算量に関する欠点を回避することができる. ただし, 並列計算を行なう場合, Lanczos 法より約 1.5 倍のメモリを必要とするため, 計算できるハミルトニアンのは大きさは Lanczos 法の約 3 分の 2 に制限される. この PCG 法は連立一次方程式の計算と同様に固有値計算においても適切な前処理を施すことで収束性は向上することが報告されている. 図 2 に前処理に

1. 前処理なし ($T = I$)
2. 点ヤコビ ($T = D^{-1}$)
3. 零シフト点ヤコビ ($T = (D - \mu_k I)^{-1}$)

を利用して実際に 20 サイトのハバードモデルから導かれる約 15 億次元のハミルトニアンを地球シミュレータの 10 ノード (80 プロセッサ) で計算した際の収束性を示す. この結果から, 零シフト点ヤコビが最も収束性が優れていることが確認できる.

```

x0 := an initial guess.
β0 := 1, v-1 := 0, v0 := x0/||x0||
do i=0,1,... m-1, or until βi < ε
  ui := Hv_i - β_i v_{i-1}
  α_i := (u_i, v_i)
  w_{i+1} := u_i - α_i v_i
  β_{i+1} := ||w_{i+1}||
  v_{i+1} := w_{i+1}/β_{i+1}
enddo

```

(a) Lanczos 法

```

x0 := an initial guess, p0 := 0
x0 := x0/||x0||, X0 := Hx0, P0 = 0, μ-1 := (x0, X0)
w0 := X0 - μ-1 x0
do k=0, ... until convergence
  Wk := Hwk
  SA := {wk, xk, pk}^T {Wk, Xk, Pk}
  SB := {wk, xk, pk}^T {wk, xk, pk}
  Solve the smallest eigenvalue μ
  and the corresponding vector v,
  SA v = μ SB v, v = (α, β, γ)^T.
  μk := (μ + (xk, Xk))/2
  x_{k+1} := α wk + β xk + γ pk, x_{k+1} := x_{k+1}/||x_{k+1}||
  p_{k+1} := α wk + γ pk, p_{k+1} := p_{k+1}/||p_{k+1}||
  X_{k+1} := α Wk + β Xk + γ Pk, X_{k+1} := X_{k+1}/||X_{k+1}||
  P_{k+1} := α Wk + γ Pk, P_{k+1} := P_{k+1}/||P_{k+1}||
  w_{k+1} := T(X_{k+1} - μk x_{k+1}), w_{k+1} := w_{k+1}/||w_{k+1}||
enddo

```

(b) 前処理付共役勾配法による固有値計算 (LOBPCG)

図 1: 反復解法による固有値計算のアルゴリズム

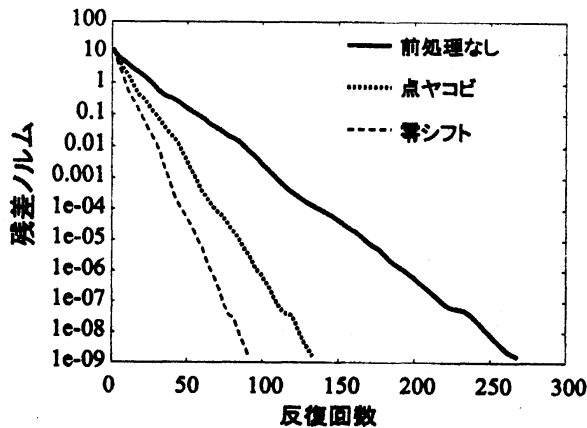


図 2: 前処理による収束性の比較

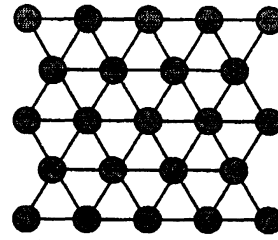


図 3: 23 サイトの三角格子

2.3 地球シミュレータを利用した大規模計算

ここでは、表 1 に示されたサイズのハミルトニアン基底状態を Lanczos 法および前処理付共役勾配法 (PCG 法) を用いて地球シミュレータで計算する。その際の反復回数、誤差、および計算時間 (全ての計算時間 (Total), 固有値計算部分のみの計算時間 (Solver)) を表 2 (a) に、計算速度 (Flops 値) を表 2 (b) に示す。この時 PCG 法の前処理には零シフトヤコビを利用している。結果から、PCG 法は Lanczos 法よりも短時間で基底状態を計算できる上、1000 億次元以上のハミルトニアン基底状態を約 1 分で計算できることが確認できる。また、計算性能にしても PCG 法は 512 ノードを利用した計算で 16.447TFlop というピーク性能の 50% を越える性能を達成している。一方、Lanczos 法は PCG 法よりもメモリの使用量が少ないため PCG 法では計算不可能な約 1600 億次元になる model 4 の基底状態を約 6 分かかるが計算できる。この行列サイズは我々の知る限りハバードハミルトニアン基底状態の厳密対角化において最大の次元である。

また、図 3 に示した 23 サイトの三角格子ハバードモデルから導かれる約 1200 億次元のハミルトニアン基底状態を PCG 法を利用して地球シミュレータの 624 ノード (4992 プロセッサ) 上で計算したところ、約 45 秒で基底状態を得ることができた。この時の計算速度は 24.5TFlops であり、これはピーク性能の 61% である [5]。

2.4 厳密対角化を用いたシミュレーション

ここでは、2 次元 5×5 サイトに調和ポテンシャル $V/t = 1$ を加えた引力ハバードモデル ($U/t = -10$) の粒子密度分布を図 4 および図 5 に示す。粒子数はそれぞれ $(4\downarrow, 4\uparrow)$ および $(6\downarrow, 6\uparrow)$ である。この結果から密度分布がチェッカーボード状になることが確認できるが、このような密度分布は実際に高温超伝導体の磁束コア内などで頻繁に観測されている [6]。

3 全対角化

時間発展などのよりリアルな量子状態を調査するためにはハミルトニアンの全固有値と固有ベクトルを計算する必要がある。このような場合は、反復法を利用しても減次などの直接的な操作が必要になるため、疎行列であっても最初から密行列とみなし直接的な方法で計算するのがコスト的にも優れている。その

表 1: モデル 1~4 のサイト数, 粒子数, ハミルトニアン次元, 計算に利用する地球シミュレータのノード数, 必要なメモリ量. PCG 法でモデル 4 を計算するには 10.7 TB のメモリ量を必要とするが, 地球シミュレータのメモリ量を越えているため計算できない.

Model	No. of Sites	No. of Fermions		Dimension of H	No. of Nodes	Memory (TB)	
		$\uparrow$ -spin	$\downarrow$ -spin			Lanczos	PCG
1	24	6	6	18,116,083,216	128	0.8	1.3
2	21	8	8	41,408,180,100	256	1.9	2.9
3	22	8	8	102,252,852,900	512	4.6	6.9
4	22	9	8	159,059,993,400	512	7.1	(10.7)

表 2: 地球シミュレータを利用して表 1 のモデルを Lanczos 法および PCG 法で計算した際の計算性能.

(a) The number of iterations, residual error, and elapsed time.

Model	Lanczos Method				PCG Method			
	Itr.	Residual Error	Elapsed Time(sec)		itr.	Residual Error	Elapsed Time(sec)	
			Total	Solver			Total	Solver
1	200	1.1×10^{-7}	106.905	101.666	105	1.4×10^{-9}	39.325	34.285
2	200	7.7×10^{-7}	154.159	148.453	107	2.3×10^{-9}	55.888	48.669
3	300	3.6×10^{-11}	288.270	279.775	109	2.4×10^{-9}	66.819	59.510
4	300	4.2×10^{-8}	362.635	352.944	—			

itr. ... the number of iterations

(b) Flops rate.

Model	TFlops (Peak Ratio)			
	Lanczos Method		PCG Method	
	Total	Solver	Total	Solver
1	3.062(37.4%)	3.208(39.2%)	4.045(49.4%)	4.607(56.2%)
2	5.245(32.0%)	5.426(33.1%)	6.928(42.3%)	7.893(48.2%)
3	10.613(32.3%)	10.906(33.3%)	14.763(45.1%)	16.447(50.2%)
4	13.363(40.8%)	13.694(41.8%)	—	—

ため, 本研究では以下の 3 つの手順

1. Householder 変換で 3 重対角行列に変換 (Red),
2. 三重対角行列の固有値・固有ベクトルを計算 (Eig),
3. 得られた固有ベクトルを Householder 逆変換 (Backtrafo).

を経る演算を行なう (図 6 参照)[5]. これらの演算のうち, 順変換および逆変換は自作し, 固有値・固有ベクトルの計算部分は ScaLAPACK の分割統治法を利用するが, 地球シミュレータは ScaLAPACK を正式サポートしていないため, ScaLAPACK のルーチン (pcstedc) を移植した.

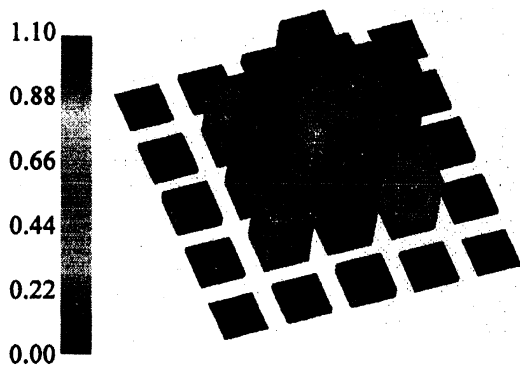


図 4: 5×5 サイトモデルでの 8 粒子 ($4\downarrow, 4\uparrow$) の粒子密度分布. ただし $U/t = -10$, $V/t = 1$ である.

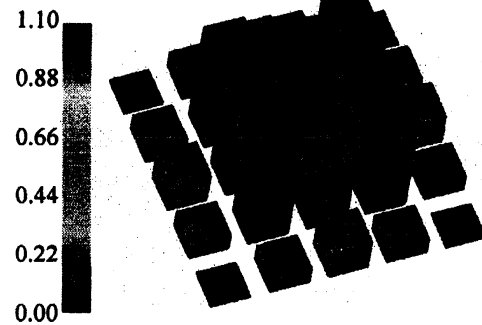


図 5: 5×5 サイトモデルでの 12 粒子 ($6\downarrow, 6\uparrow$) の粒子密度分布. ただし $U/t = -10$, $V/t = 1$ である.

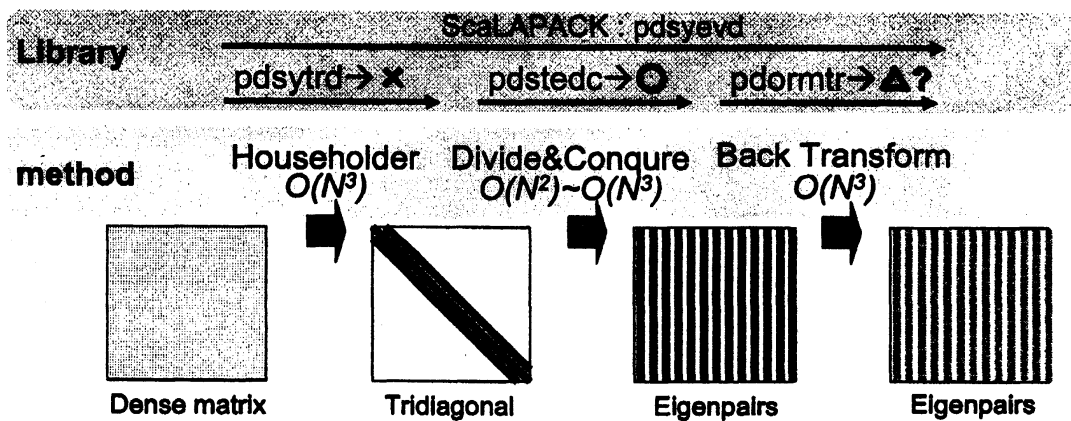


図 6: 全対角化のアルゴリズム

3.1 地球シミュレータを利用した大規模計算

実際に地球シミュレータを利用してテスト行列を計算した際の結果を図 7, 8 に示す. 図 7 より, 数千のプロセッサ数でも優れたスケーラビリティを達成していることがわかる. また, 図 8 から 624 ノード (4992 プロセッサ) を利用し, 400,000 次元の行列の全固有値・固有ベクトルを約 12,000 秒で計算することに成功したことが確認できる [5]. このときの計算性能は

1. Householder 変換で 3 重対角行列に変換 (Red) : 12.0Tflops (29% of the peak)
2. 得られた固有ベクトルを Householder 逆変換 (Backtrafo) : 30.7Tflops (75% of the peak)

であった [5]. この結果から開発した固有値計算ルーチンが地球シミュレータの性能を十分に引き出していることが確認できる.

3.2 全対角化を利用したシミュレーション

全対角化ルーチンを利用して、粒子密度分布の時間発展を計算する。対象とするモデルは16サイトハバードモデルで粒子数は6個 ($3\downarrow, 3\uparrow$) であり、ポテンシャルを図9のように $\text{time}=0$ で急激に変化させる。こうした操作は光学格子上でフェルミ原子ガスを使って容易に実現可能である。このとき、計算すべきハミルトニアン次元は313,600である。粒子分布のスナップショットを図10に示す。手前から $U/t = -10, -5, -2, -1, 1, 2, 5, 10$ である。この結果から、粒子間の相互作用が強い (U/t の絶対値が大きい) と左側にトラップされた状態は崩壊せず、相互作用が弱い (U/t の絶対値が小さい) と崩壊してしまうことが確認できる。

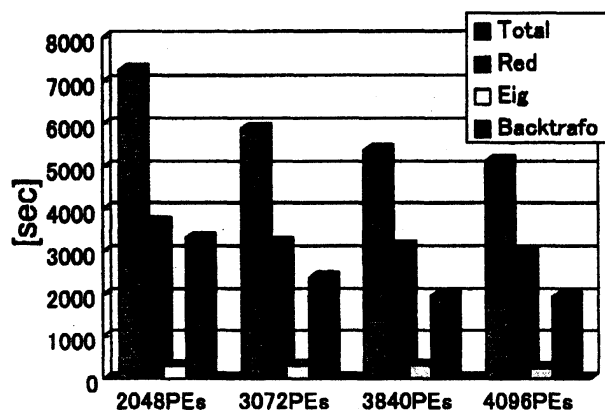


図7: 行列の次元を280,000に固定し、プロセッサ数を増加させた時の経過時間。

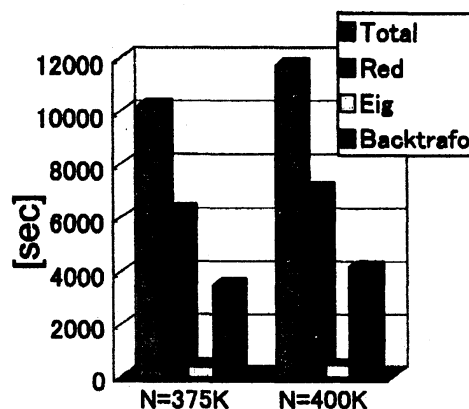


図8: 624ノード(4992プロセッサ)を利用して計算した結果。

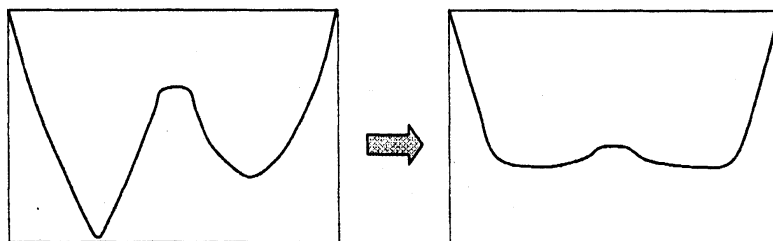


図9: ポテンシャルの変化。 $\text{time}=0$ で左図から右図へ変化させる。

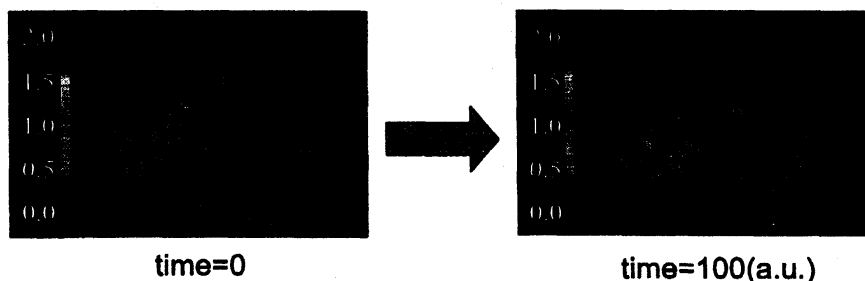


図10: 粒子密度分布の時間変化。手前から $U/t = -10, -5, -2, -1, 1, 2, 5, 10$ 。

4 密度行列繰り込み群

ここまで示してきた方法は、全ての自由度を扱うために、モデルを少し大きくしただけでも行列が巨大になり、計算が困難(不可能)になってしまう。そこで、全ての自由度ではなく、図 11 のように重要な自由度のみを考慮して基底状態を計算する方法として密度行列繰り込み群 (DMRG) がある [7, 8]。この方法は、図 12 のように、4 サイトのモデルからはじめ、あらかじめ決めておいた数の状態のみを考慮しながら必要なサイズまでモデルを大きくし、その後、図 13 のように system と environment の境界を左右に動かすことで精度を向上させる (この手続きは sweep と呼ばれている) 計算手法である。1 次元モデルであれば厳密対角化よりも大きいモデルを扱うことができるが、図 14 のようにそのまま 2 次元モデルに適用した場合、繰り込む方向に対し垂直な方向の拡大にともなって、計算するハミルトニアンが大きさが指数関数的に大きくなるため、実際は図 15 のように 2 次元モデルを 1 次元として扱うことで実現してきた。実際、この方法を利用して計算した 2 次元モデルのシミュレーション結果がいくつも報告されているが、精度や収束性に問題があることが指摘されている [9]。そこで、我々は図 14 の方法を並列化することで、直接 2 次元モデルを計算する。

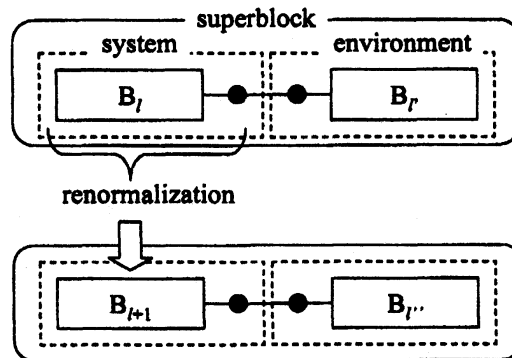


図 11: DMRG の繰り込み方法. 全体 (superblock) は system と environment から構成されている. system を繰り込み新たなシングルサイト (●) を追加し、それに合わせて適切な environment 配置し、新しい superblock を構成する。

4.1 2 次元モデルに対する密度行列繰り込み群

ここでは図 14 の方法で 2 次元モデルを DMRG 法を用いて計算した場合の 5×10 サイトの 2 次元ハイゼンベルグモデルおよび 3×10 サイトの 2 次元ハバードモデル ($U/t = 10$, 境界条件: open) の DMRG 法で計算した際の反復回数 (sweep 回数) と最小固有値の関係を図 16 に、ハバードモデルに対する繰り込み数と最小固有値の関係を図 17 に示す。この結果から、今回の計算条件ではどちらのモデルに対しても反復回数は 2, 3 回で収束していることが確認できる。また、精度が要求される場合、ハイゼンベルグモデルは 100 個程度の成分を繰り込めば十分であるが、ハバードモデルは数百個の成分を繰り込む必要があることが確認できた。図 15 の方法で 2 次元ハバードモデルを計算する際には数千個の成分を繰り込む必要があり、また反復回数も数十回必要という報告 [10] があることから、本手法の精度および収束性は格段に優れていることがわかる。

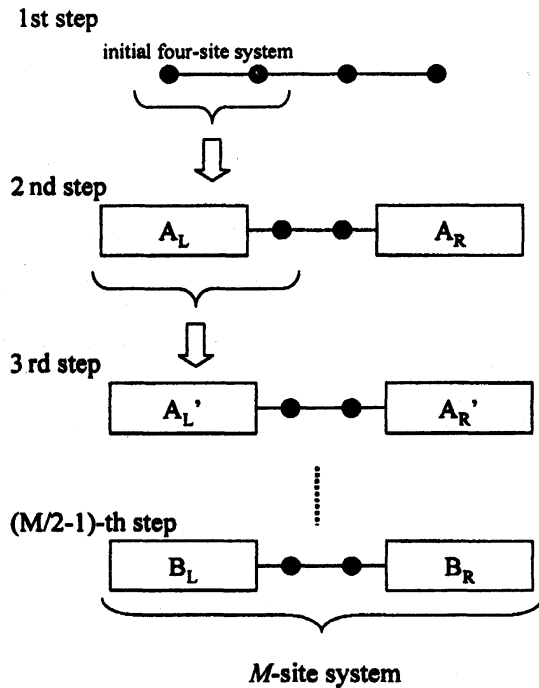


図 12: 無限系の計算方法. 1 ステップ毎に 2 サイトずつ増加するため, この方法を利用して, モデルサイズを必要な大きさ (この図では M サイト) まで拡大させる.

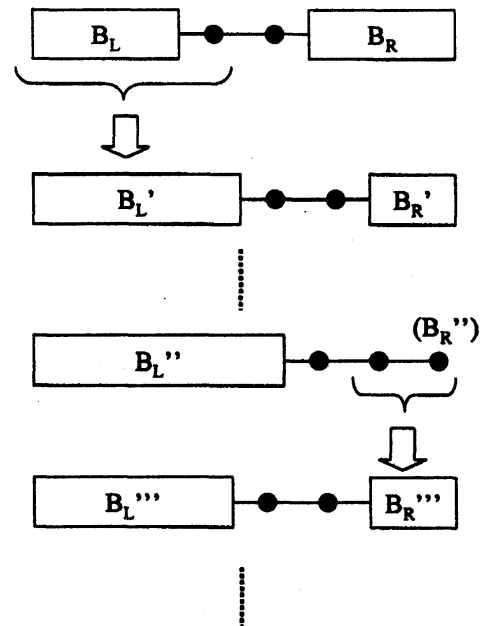


図 13: 有限系の計算方法. system と environment の境界を左右に動かすこと (sweep) で, 精度を向上させる.

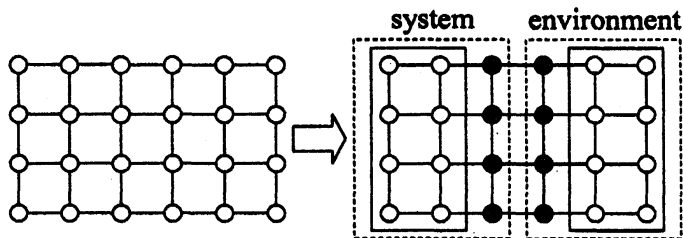


図 14: 2次元モデルを直接 DMRG で扱う方法.

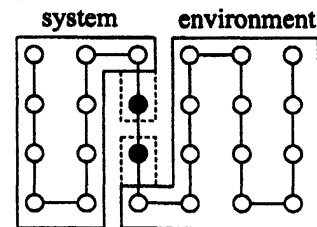


図 15: 2次元モデルを 1次元モデルとして扱う方法.

5 まとめ

量子多体問題を計算する方法として, 厳密対角化法, 全対角化, 密度行列繰り込み群 (DMRG) の 3 つの方法を紹介し, 厳密対角化と全対角化については地球シミュレータを利用した際の性能評価とシミュレーション結果を紹介した. 性能評価に関しては 4000 を越えるプロセッサでも良好な並列性能が得られ, その性能を有効に引き出せていることが確認できた. またシミュレーション結果は地球シミュレータを利用することで初めて得られた結果であり, この点からもその性能を有効活用していることがわかる.

DMRG に関しては現在開発中であるため地球シミュレータを利用した並列計算性能等を紹介することができないが, テスト計算により 2次元モデルを直接 DMRG で計算することで精度や収束性が格段に向上す

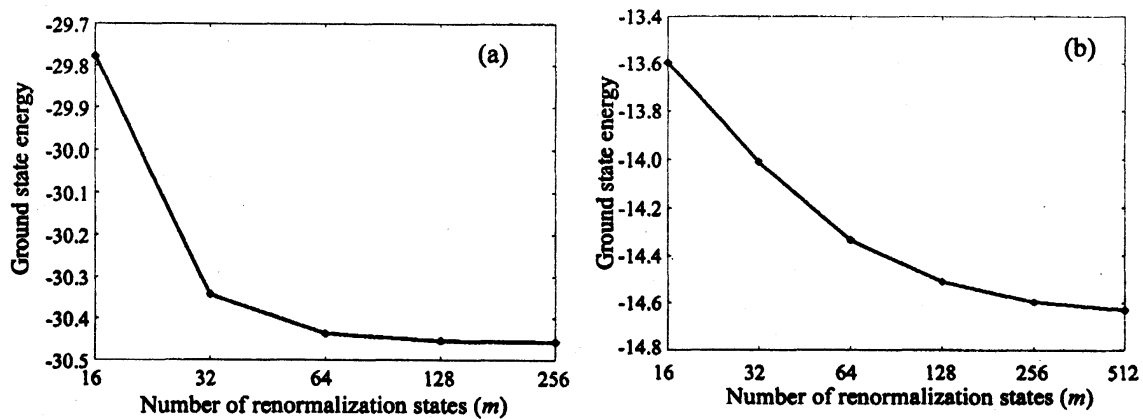


図 16: 繰り込み数 (m) と最小固有値の関係. (a) は 5×10 サイトハイゼンベルグモデル, (b) は 3×10 サイトハバードモデル.

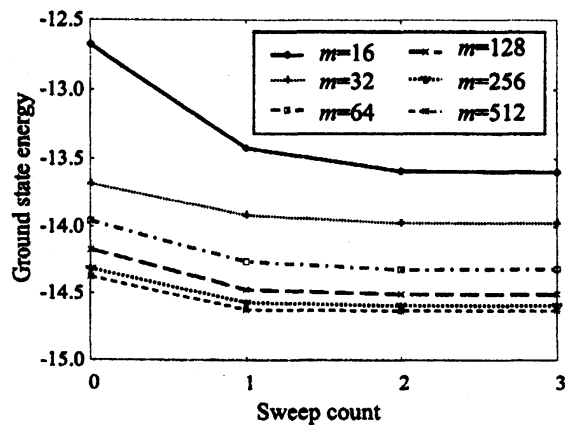


図 17: 3×10 サイトハバードモデルを DMRG で計算した際の反復回数 (sweep count) と最小固有値の関係. m は繰り込み数.

ることが確認できた. 今後は, 並列プログラムを改良し, 1000 を越えるプロセッサを利用した並列計算でこれまで以上のサイズの問題を計算することを予定している.

参考文献

- [1] J. K. Cullum and R. A. Willoughby, *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations, Vol.1: Theory*, SIAM, 2002.
- [2] A. V. Knyazev, "Preconditioned eigensolvers - An oxymoron?", *Electronic Transactions on Numerical analysis*, Vol. 7 (1998), 104-123.
- [3] A. V. Knyazev, Toward the optimal eigensolver: Locally optimal block preconditioned conjugate gradient method, *SIAM J. Sci. Comput.*, 23, pp.517-541, 2001.

- [4] S. Yamada, T. Imamura, and M. Machida, 16.447 TFlops and 159-Billion-dimensional Exact-diagonalization for Trapped Fermion-Hubbard Model on the Earth Simulator, *Proc. of SC05*, 2005. <http://sc05.supercomputing.org/schedule/pdf/pap188.pdf>.
- [5] S. Yamada, T. Imamura, T. Kano, and M. Machida, High-Performance Computing for Exact Numerical Approaches to Quantum Many-Body Problems on the Earth Simulator, *Proc. of SC06*, 2006. <http://sc06.supercomputing.org/schedule/pdf/gb113.pdf>.
- [6] J. E. Hoffman, E. W. Hudson, K. M. Lang, V. Madhavan, H. Eisaki, S. Uchida, and J.C. Davis, A four unit cell periodic pattern of Quasi-particle states surrounding vertex cores in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCuO}_{8+\delta}$, *SCIENCE*, Vol. 295, 2002
- [7] S. R. White, Density Matrix Formulation for Quantum Renormalization Groups, *Phys. Rev. Lett.* 69, 1992, pp. 2863–2866.
- [8] S. R. White, Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups, *Phys. Rev. B* 48, 1993, pp. 10345–10355.
- [9] R. M. Noack and S. R. Manmana. Diagonalization- and Numerical Renormalization-Group-Based Methods for Interacting Quantum Systems, *Proc. of AIP Conf.*, 789, 2005, pp. 91-163.
- [10] G. Hager, G. Wellein, E. Jackemann, and, H. Fehske, Stripe formation in dropped Hubbard ladders, *Phys. Rev. B*, 71, 075108, 2005.