

課題名 (タイトル) :

Parallelized density-matrix renormalization-group study of
strongly correlated quantum many-body systems

利用者氏名 : 奥村雅彦

所属 : 和光研究所 基幹研究所 柚木計算物性物理研究室

1. 課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

本研究は、強相関電子系において、従来の量子モンテカルロ法などでは計算不可能であった系の計算を可能にする新手法である密度量列繰り込み群法を、大型並列計算機用に並列化し、その適用範囲を拡張し、最終的には「京コンピュータ」での使用を目標としている。ただし、利用者は今年度から理研に所属したので、この簡易利用課題は一般利用課題 (G10022; Development and application of CPU and GPGPU codes for numerical simulation of strongly correlated lattice systems) 申請までの一時利用を目的としていた。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本アプリケーションにおける計算負荷が大きい部分は主に以下の3点である。1) ハミルトニアン行列の対角化、2)、3) 相関関数評価部分。1と2についてはすでに並列化済みだったので、本課題では主に3の相関関数評価サブルーチンについて開発を行った。本年度は2点相関関数の開発に注力した。具体的には、計算する全ての2点の組み合わせを各コアに割り当て、相関関数の行列を生成し、各コアが分散して持っている状態ベクトルを用いて物理量の期待値を計算する。

3. 結果

まずは、メモリを大量に使用するが、プログラム自体はシンプルなコードをフラット MPI で作成し、テスト計算を行った。その結果、相関関数の各点の組み合わせを並列に計算するため、並列化効率は良いことがわかった。しかし、以下の点について改良の余地があることがわかった。相関関数の行列は疎行列であるが、今回作成したプログラムでは0を含め、密行列として計算を行った。その結果、今回開発した相関関数評価サブルーチン

ンでは密行列・ベクトル積の計算を行うことになり、演算性能としては良い結果が得られていると予想されるが、実計算時間が長くなり、必要なメモリ量が大きくなってしまった。

4. まとめ

本研究では、並列化密度量列繰り込み群法における相関関数評価サブルーチンの作成と評価を行った。その結果、並列化効率は高いプログラムを作成することができたが、実行時間と使用メモリ量に改良の余地があることがわかった。

5. 今後の計画・展望

上記における問題点である、計算時間の長さ大きなメモリ使用量を改善するためには、密行列・ベクトル積部分に CRS 形式等を用いて、疎行列・ベクトル積に書き換える事が必要である。特に、RICC では、コアあたりのメモリ量が多い upc はなかなかジョブが流れないため、比較的ジョブが流れやすい mpc を利用するためにも少メモリバージョンを開発する事は重要である。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容

前述の通り、研究室全体で申請した一般利用課題 (G10022; Development and application of CPU and GPGPU codes for numerical simulation of strongly correlated lattice systems) に移行した。

7. 利用研究成果が無かった場合の理由

今回開発したプログラムは大量のメモリを必要としたため、upc でしかジョブを流すことができなかったが、なかなかジョブが流れなかった。そのため、プログラムを改良する必要があり、そちらに注力したため、RICC を用いて計算した結果は論文の形にするまで至らなかった。