

LOBPCG法を用いたハバードモデルの厳密対角化：複数固有値に対する省通信ノイマン展開前処理の有効性

山田 進^{1,a)} 今村 俊幸² 町田 昌彦¹

概要：厳密対角化法とは、相関の強い電子の振る舞いを表現するハバードモデル等の量子状態を高精度で計算するため、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行列を厳密に定義し、その固有値とそれに対応する固有ベクトルを計算する方法である。ハミルトニアンは大規模な対称疎行列であるため、反復固有値ソルバであるLOBPCG法に適切な前処理を用いることで高速に計算できることが期待され、実際に基底状態（最小固有値とそれに対応する固有ベクトル）を求める際には有効であった。本研究では、LOBPCG法で複数の固有値及び固有ベクトルを計算する際の前処理行列として、近似固有値の情報を利用するとともに、ノイマン展開による前処理行列を用いる。この際、ハバードモデルの物理的性質を利用した省通信化も実施する。実際に、大規模並列計算によるシミュレーションから、提案した前処理によって高速化することを確認した。

1. はじめに

現在注目を集めている高温超伝導体や強磁性体等の高性能機能材料群の発現機構は未だ十分に理解されていない。この機構を解明する方法の1つとして、強い電子相関を持つ量子モデルの性質をシミュレーションにより計算する方法がある。代表的な物理モデルとしては、強い相関を持つ電子の振る舞いをモデル化したハバードモデルがある[1], [2]。ハバードモデルは図1に示すように、格子状に構成されたサイトにアップおよびダウンスピンの電子が存在し、接続しているサイト間を相互作用しながら電子が移動する様子を記述するモデルである。このモデルのエネルギーが低い状態（すなわち低温で現れる状態）での物性を知ることが重要であり、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の小さい固有値と固有ベクトルを求めることで、その低温での物性を理解することができる。特に重要なものは最もエネルギーの低い状態（絶対零度で出現する状態）に対応している基底状態（最小固有値とそれに対応する固有ベクトル）から得ることができる。このハバードモデルから導かれるハミルトニアンは対称な疎行列であることから、Lanczos法[3]やLOBPCG法[4], [5]などの反復法を用いて基底状態を計算する研究が多く行われており、様々な前処理を用いたLOBPCG法による収束性能や並列計算性能が評価されている[6], [7], [8]。

一方、基底状態だけでなく、小さい方から数個の固有値とそれに対応した固有ベクトルを求めることで、絶対零度よりも高い温度での物性を知ることができる。LOBPCG法では反復ベクトルをブロック化することで、複数固有値を計算することが可能になり、実際のシミュレーションにも用いられている。これに伴って、複数固有値用の前処理が提案され、実際に収束性が向上することが報告されているが、前処理行列の近似方法や行列のパラメータによっては有効ではないことも報告されている[7]。そこで、本研究ではLOBPCG法を用いて複数の固有値（およびそれらに対応する固有ベクトル）を求める際にノイマン展開を用いた前処理法を適用し、その有効性を確認するとともに、モデルの物理的性質を利用した前処理の省通信化も適用し、その有効性も確認する。

2. これまでの研究

2.1 ハミルトニアンとベクトルの掛け算

LOBPCG法は対称疎行列の固有値およびそれに対応した固有ベクトルを求めるための反復計算ソルバであり、行列とベクトルの掛け算の計算量が非常に多い。そのため、高性能な並列計算を行うためには、この掛け算を適切に並列化することが必須である。山田らにより、ハバードモデルの物理的性質を利用した以下に示す並列計算手法が提案されている[6]。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

¹ 日本原子力研究開発機構
² 理化学研究所
a) yamada.susumu@jaea.go.jp

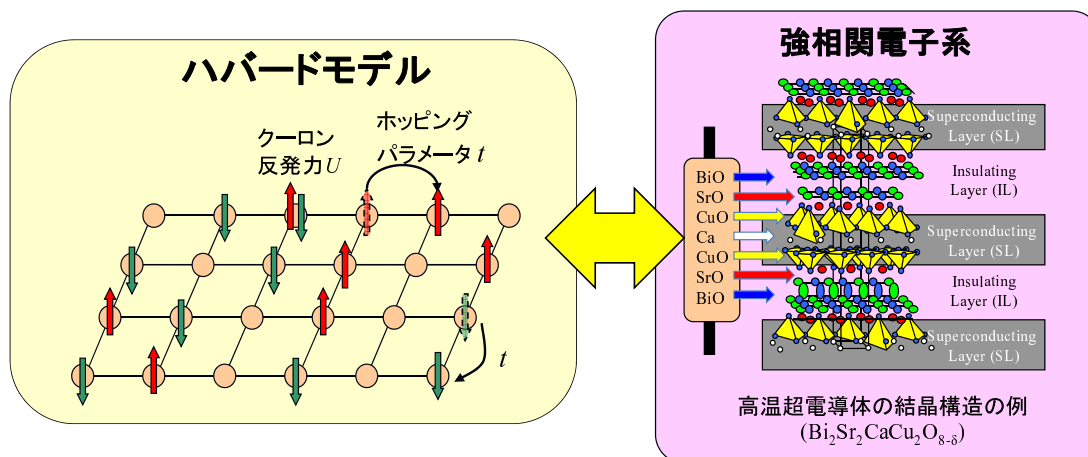


図1 ハバードモデルの模式図と高温超伝導物質の結晶構造の例．この例の結晶では高温超伝導体と絶縁体が層状になっているが，ハバードモデルは高温超伝導体層の電子を振る舞いを模擬している．

$$H = -t \sum_{i,j,\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_i U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

で定義される．ここで， t は電子があるサイトから他のサイトへ移動する際のホッピングパラメータ， U_i は i 番目のサイトにアップスピンとダウンスピンの2つの電子が存在する際のクーロン反発力である．また， $c_{i,\sigma}$ および $c_{i,\sigma}^\dagger$ は電子の消滅，生成演算子であり， $n_{i,\uparrow(\downarrow)}$ は i 番目のサイトに存在するアップスピン（ダウンスピン）の電子の個数を表している [1], [2]．ここで， $I_{\uparrow(\downarrow)}$ ， $A_{\uparrow(\downarrow)}$ および D を，それぞれ単位行列，アップスピン（ダウンスピン）の電子から導出されるハミルトニアン，および D を反発エネルギーによって構成される対角行列とする．このとき，モデルの物理的性質からハミルトニアン H とベクトル v の掛け算は

$$Hv = Dv + (I_{\downarrow} \otimes A_{\uparrow})v + (A_{\downarrow} \otimes I_{\uparrow})v, \quad (1)$$

と分解できるため，単位行列との直積の関係を利用すると行列ベクトル積は

$$V_{i,j}^{new} = \bar{D}_{i,j} V_{i,j} + \sum_k A_{\uparrow i,k} V_{k,j} + \sum_k V_{i,k} A_{\downarrow j,k}$$

と，行列同士の掛け算に変換できる．ここで，行列の下付きの添え字 i, j は (i, j) 成分を表しており，行列 V および \bar{D} はベクトル v の成分と対角行列 D の対角成分をハバードモデルの性質を考慮して適切に並べ替えたものである [6][10]．このとき，行列 V は密行列であることから，式 (1) は以下のアルゴリズムで並列化できる．

CAL 1: $Y^c = \bar{D}^c \odot V^c + A_{\uparrow} V^c$,

COM 1: 行列の分割を V^c から V^r に変換 (all-to-all 通信)，

CAL 2: $W^r = V^r A_{\downarrow}^T$,

COM 2: 行列の分割を W^r から W^c に変換 (all-to-all 通信)，

CAL 3: $Y^c = Y^c + W^c$.

ここで，上付き添字 c および r は列方向の分割，行方向の

```

x0 := an initial guess, p0 := 0
x0 := x0/|x0|, X0 := Ax0, P0 := 0, mu-1 := (x0, X0),
w0 := X0 - mu-1x0
do k=0, ... until convergence
  Wk := Awk
  SA := {wk, xk, pk}T {Wk, Xk, Pk}
  SB := {wk, xk, pk}T {wk, xk, pk}
  一般化固有値問題 SA v = mu SB v を計算し，最小固有値 mu と
  それに対応する固有ベクトル v = (alpha, beta, gamma)T を計算，
  muk := (mu + (xk, Xk))/2
  xk+1 := alpha wk + beta xk + gamma pk, xk+1 := xk+1/|xk+1|,
  pk+1 := alpha wk + gamma pk, pk+1 := pk+1/|pk+1|
  Xk+1 := alpha Wk + beta Xk + gamma Pk, Xk+1 := Xk+1/|Xk+1|,
  Pk+1 := alpha Wk + gamma Pk, Pk+1 := Pk+1/|Pk+1|
  wk+1 := T-1(Xk+1 - muk xk+1), wk+1 := wk+1/|wk+1|
enddo

```

図2 行列 A の最小固有値を計算するための LOBPCG 法のアルゴリズム．行列 T は前処理行列である．

分割を， \odot は要素単位の掛け算を表している．

このアルゴリズムを利用すると，演算はほぼ均等に分割できる．しかし，掛け算1回ごとに2回の all-to-all 通信が必要になるため，大規模並列計算機を用いた場合，この all-to-all 通信が計算性能のボトルネックになる可能性がある．

2.2 LOBPCG 法を用いてハバードモデルの基底状態を計算する際の前処理

適切な前処理により LOBPCG 法の収束性は向上することが知られている．これまでに，ハバードモデルに対する前処理も提案されており，収束性が向上することが報告されている [4], [5], [6], [7], [8]．その中に，反復で計算している近似固有値の情報を利用して行列の対角成分をシフト

させ、その対角成分を前処理行列に用いる zero-shift point Jacobi 前処理があり、ホッピングパラメータに対してクーロン反発力 U/t が大きい問題に対しては有効であることが確認されている [6], [7], [8], [9] .

2.3 ノイマン展開による前処理

山田らにより、最小固有値とその固有ベクトルを計算する際の LOBPCG 法に対するノイマン展開前処理が提案されている [8] . ノイマン展開は

$$(I - M)^{-1} = I + M + M^2 + M^3 + \dots \quad (2)$$

で表現される級数であり、行列 M の作用素ノルム $\|M\|$ が 1 未満であれば収束する [11], [12] .

そのため、対称行列 H の最大固有値を λ_{\max} , 最小固有値を λ_{\min} としたときに、行列 M を

$$M = I - \frac{2}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}} (H - \lambda_{\min} I),$$

とすることで、作用素ノルムを 1 にできる . この時、 λ_{\min} を LOBPCG 法の反復過程で得られる近似固有値の情報から適切に設定するとともに、 λ_{\max} として Gershgorin の定理によって求められる最大固有値の上限値を用いることで、行列 M のノルムを 1 未満にでき、式 (2) は $\frac{2}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}} (H - \lambda_{\min} I)^{-1}$ に収束する . そのため、このノイマン展開は最小固有値 λ_{\min} を計算する際の前処理になる . 一般に、Gershgorin の定理は固有値の分布区間を過大評価するため、計算に得られた上限値に減衰パラメータ $\alpha (< 1)$ を掛けたものを λ_{\max} として用いる方法が提案されており、 $\alpha = 0.8 \sim 0.9$ 程度に設定することで、Lanczos 法を用いて最大固有値を計算したものとほぼ同等の収束性を示すことが確認されている [8] .

この前処理を用いることで、zero-shift point Jacobi 前処理が有効に作用しなかったクーロン反発力 U/t が小さい場合に対して高速化を実現している . また、展開の次数 s を増加させると収束性は向上 (反復回数は減少) するが、反復 1 回あたりの計算時間が増加するため、トータルでは遅くなることが報告されている [8] (付録 A.1 参照) .

2.4 ノイマン展開前処理を利用した際の省通信化

LOBPCG 法を用いてハバードモデルの基底状態を計算する際に、 s 次のノイマン展開を利用した前処理を利用する場合、 $s+1$ 回のハミルトニアンとベクトルの掛け算 Hv , H^2v , ..., $H^{s+1}v$ を計算する必要がある . この時、 H^2 は

$$\begin{aligned} H^2 = & (I_{\downarrow} \otimes A_{\uparrow})(D + (I_{\downarrow} \otimes A_{\uparrow})) + (A_{\downarrow} \otimes I_{\uparrow})(D + (A_{\downarrow} \otimes I_{\uparrow})) \\ & + D(D + (I_{\downarrow} \otimes A_{\uparrow}) + (A_{\downarrow} \otimes I_{\uparrow})) \\ & + (I_{\downarrow} \otimes A_{\uparrow})(A_{\downarrow} \otimes I_{\uparrow}) + (A_{\downarrow} \otimes I_{\uparrow})(I_{\downarrow} \otimes A_{\uparrow}). \end{aligned}$$

^{*1} ユークリッドノルムを考えた場合、対称行列に対する作用素ノルムは、その固有値のうち絶対値最大の固有値と一致する . つまり、固有値が $\lambda_i, i = 1, \dots, m$ の場合、 $\max_{i=1}^m |\lambda_i|$ で与えられる .

である . 一般に、行列の積に関しては交換則が成り立たないが、 $(I_{\downarrow} \otimes A_{\uparrow})$ と $(A_{\downarrow} \otimes I_{\uparrow})$ は可換であるため、 H^2 は

$$\begin{aligned} H^2 = & (I_{\downarrow} \otimes A_{\uparrow})(D + (I_{\downarrow} \otimes A_{\uparrow}) + 2(A_{\downarrow} \otimes I_{\uparrow})) \\ & + (A_{\downarrow} \otimes I_{\uparrow})(D + (A_{\downarrow} \otimes I_{\uparrow})) + D(D + (I_{\downarrow} \otimes A_{\uparrow}) + (A_{\downarrow} \otimes I_{\uparrow})). \end{aligned}$$

と表せる . このことから、 $Y_1 = Hv$ および $Y_2 = H^2v$ は

CAL 1: $Y^c = \bar{D}^c \odot V^c + A_{\uparrow} V^c,$

COM 1: 行列の分割を V^c から V^r へ変換 (all-to-all 通信),

CAL 2: $W^r = V^r A_{\downarrow}^T,$

COM 2: 行列の分割を W^r から W^c へ変換 (all-to-all 通信),

CAL 3: $Y_1^c = Y^c + W^c,$

CAL 4: $Y^c = Y_1^c + W^c,$

CAL 5: $Y^c = \bar{D}^c \odot Y_1^c + A_{\uparrow} Y^c,$

CAL 6: $W^r = \bar{D}^r \odot V^r + W^r,$

CAL 7: $W^r = W^r A_{\downarrow}^T,$

COM 3: 行列の分割を W^r から W^c へ変換 (all-to-all 通信),

CAL 8: $Y_2^c = Y^c + W^c.$

で計算できる . このアルゴリズムを用いることで Hv および H^2v を 3 回の all-to-all 通信で実現することができる . ただし、CAL 4 および CAL 6 が追加の演算になるため実際に高速化するかはこの計算時間が all-to-all の通信時間よりも少ない必要がある . この方法は Hv と H^2v を計算する $s = 1$ の場合にしか直接適用できないため、 $s \geq 2$ の際には掛け算を適切に Hv と H^2v の組み合わせに分解して計算する必要がある .

3. ハバードモデルの複数固有値計算に対するノイマン展開前処理

3.1 LOBPCG 法による複数固有値の計算方法

LOBPCG 法を用いて小さい方から m 個の固有値とそれに対応する固有ベクトルを計算することは、図 3 に示すアルゴリズムのように反復ベクトルをブロック化することで実現できる . しかし、ブロック化するとアルゴリズム中の S_B が正定値対称行列にならないことが頻繁に発生し、その際には LAPACK 等の汎用的な一般化固有値問題ルーチンを用いて計算することができない . そのため、ベクトル $x_k^{(j)}, w_k^{(j)}, p_k^{(j)}, j = 1, 2, \dots, m$ を直交化し、 S_B を単位行列にして標準固有値問題に変換して計算するのが一般的である . そのため、以下に示す本論文での数値実験では、TSQR 法 [13], [14] を用いて直交化する .

3.2 複数固有値を計算する際のノイマン展開前処理

複数の固有値・固有ベクトルを LOBPCG 法で計算する際に、前処理はそれぞれの固有値に対応したベクトルに対して独立に施すことができる . そのため、小さい方から i 番目の固有値 λ_i に対する前処理として、

```

 $\mathbf{x}_0^{(i)} := \text{an initial guess}, \mathbf{p}_0^{(i)} := 0, i = 1, \dots, m$ 
 $\mathbf{x}_0^{(i)} = \mathbf{x}_0^{(i)} / \|\mathbf{x}_0^{(i)}\|, i = 1, \dots, m$ 
 $\mathbf{X}_0^{(i)} := A\mathbf{x}_0^{(i)}, \mathbf{P}_0^{(i)} := 0, i = 1, \dots, m$ 
 $\mu_{-1}^{(i)} := (\mathbf{x}_0^{(i)}, \mathbf{X}_0^{(i)}, \mathbf{w}_0^{(i)} := \mathbf{X}_0^{(i)} - \mu_{-1}^{(i)}\mathbf{x}_0^{(i)}, i = 1, \dots, m$ 
do  $k=0, \dots$  until convergence
 $\mathbf{W}_k^{(i)} := A\mathbf{w}_k^{(i)}, i = 1, \dots, m$ 
 $S_A := \{\mathbf{w}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{w}_k^{(m)}, \mathbf{x}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_k^{(m)}, \mathbf{p}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{p}_k^{(m)}\}^T$ 
 $\{\mathbf{W}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{W}_k^{(m)}, \mathbf{X}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{X}_k^{(m)}, \mathbf{P}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{P}_k^{(m)}\}$ 
 $S_B := \{\mathbf{w}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{w}_k^{(m)}, \mathbf{x}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_k^{(m)}, \mathbf{p}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{p}_k^{(m)}\}^T$ 
 $\{\mathbf{w}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{w}_k^{(m)}, \mathbf{x}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{x}_k^{(m)}, \mathbf{p}_k^{(1)}, \dots, \mathbf{p}_k^{(m)}\}$ 
一般化固有値問題  $S_A \mathbf{v} = \mu S_B \mathbf{v}$  を計算し, 小さい方から  $m$  個の固有値及びそれに対応する固有ベクトル  $\mu^{(i)}, \mathbf{v}^{(i)} = (\alpha^{(i)}, \beta^{(i)}, \gamma^{(i)})^T (i = 1, \dots, m)$  を求める
 $\mathbf{x}_{k+1}^{(i)} := \sum_{j=1}^m \{\alpha^{(j)} \mathbf{w}_k^{(j)} + \beta^{(j)} \mathbf{x}_k^{(j)} + \gamma^{(j)} \mathbf{p}_k^{(j)}\}, i = 1, \dots, m$ 
 $\mathbf{p}_{k+1}^{(i)} := \sum_{j=1}^m \{\alpha^{(j)} \mathbf{w}_k^{(j)} + \gamma^{(j)} \mathbf{p}_k^{(j)}\}, i = 1, \dots, m$ 
 $\mathbf{X}_{k+1}^{(i)} := \sum_{j=1}^m \{\alpha^{(j)} \mathbf{W}_k^{(j)} + \beta^{(j)} \mathbf{X}_k^{(j)} + \gamma^{(j)} \mathbf{P}_k^{(j)}\}, i = 1, \dots, m$ 
 $\mathbf{P}_{k+1}^{(i)} := \sum_{j=1}^m \{\alpha^{(j)} \mathbf{W}_k^{(j)} + \gamma^{(j)} \mathbf{P}_k^{(j)}\}, i = 1, \dots, m$ 
 $\mu_k^{(i)} := (\mathbf{x}_{k+1}^{(i)}, \mathbf{X}_{k+1}^{(i)}) / (\mathbf{x}_k^{(i)}, \mathbf{X}_k^{(i)}), i = 1, \dots, m$ 
 $\mathbf{w}_{k+1}^{(i)} := T^{(i)-1}(\mathbf{X}_{k+1}^{(i)} - \mu_k^{(i)} \mathbf{x}_{k+1}^{(i)}), i = 1, \dots, m$ 
enddo

```

図3 行列Aの小さい方から m 個の固有値および固有ベクトルを計算するLOBPCG法。 $T^{(i)}$ は小さい方から i 番目の固有値に対応する前処理行列。反復1回あたり m 回の行列ベクトル積と m 回の前処理演算が必要である。

$$M_i = I - \frac{2}{\lambda_{\max} - \lambda_i} (H - \lambda_i I),$$

に対するノイマン展開を考える。この行列は $i = 1$ 以外では絶対値が1以上になる固有値を持つことがある。つまり、行列のノルムが1より大きくなるため、そのままではノイマン展開は収束しない。しかし、 M_i の絶対値が1より大きい固有値に対応する固有ベクトルは、 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{i-1}$ に対応する固有ベクトル $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(i-1)}$ であり、LOBPCG法の反復計算と一緒に計算している。そこで、反復ごとの直交化を実施する際に、前処理を施して得られた行列 $\mathbf{w}_k^{(j)}$ から、反復により得られた近似固有ベクトル $\mathbf{x}_k^{(1)}, \mathbf{x}_k^{(2)}, \dots, \mathbf{x}_k^{(i-1)}$ の成分を除く順序で直交化する。つまり

$$\mathbf{w}_k^{(j)} := \mathbf{w}_k^{(j)} - \sum_{i=1}^{j-1} (\mathbf{w}_k^{(j)}, \mathbf{x}_k^{(i)}) \mathbf{x}_k^{(i)} \quad (3)$$

で示す順序の演算を含む直交化を行う。これにより、前処理で計算されたベクトルから、絶対値が1より大きい M_i の固有値に対応する固有ベクトル成分を(近似的に)除くことができるため、 M_i をノイマン展開したものを前処理に使用しても問題ないと考えられる。

次章の性能評価では、最大固有値はGershgorinの定理により求めた最大固有値の上限値に減衰パラメータ $\alpha = 0.9$ を掛けたものを利用する。

表1 SGI ICE Xの構成

Processor	Intel Xeon E5-2680v3 (2.5GHz, 30MB L2 cache)
FLOPS per processor	480 GFLOPS
Number of cores per CPU	12
Number of processors per node	2
Memory of node	64GB
Memory bandwidth	68GB/s
Network	Infini Band 6.8GB/s
Compiler	Intel compiler

4. 性能評価

4.1 複数固有値に対するノイマン展開前処理の収束性評価

ここでは、提案した前処理の有効性を確認するため、実際に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 の複数の固有値を計算する。対象とするモデルは2次元 4×5 -サイトモデルであり、電子数はアップスピンおよびダウンスピンともに5個とし、小さい方から10個の固有値およびそれに対応する固有ベクトルを原子力機構のSGI ICEX(図1)を用いて64 MPI プロセス \times 12 OpenMP スレッドのハイブリッド並列で計算する。この時のハミルトニアン の次元は240,374,016であり、非対角成分の非零成分数は1,587,870,464個である。また、クーロン反発力 U/t の収束性に対する影響を確認するため、 $U/t = 1$ および10の2ケースを計算し、その結果を表2に示す。

この結果から、点ヤコビおよびzero-shift point Jacobi (ZSPJ)の各前処理を用いた場合、反発力 U/t が大きいと、収束性が向上し高速化を実現しているが、反発力が小さいと、前処理なしの場合よりも収束性が悪くなっていることが確認できる。これは、前処理に用いる対角成分の大きさはモデル反発力の大きさに比例しているため、反発力がある程度大きくないと、対角成分がハミルトニアン の良い近似にならず、適切な前処理行列にならないためだと考えられる。この結果は、基底状態のみを計算する際に得られた結果と同様の傾向を示している[8]。

また、ノイマン展開を用いた前処理では、反発力の強さにかかわらず、収束性が向上していることが確認できる。これは、行列全部の成分を利用しているため、反発力が小さくても、前処理行列がハミルトニアン の良い近似になるためであると考えられる。また、展開の次数 s を上げることで収束までの反復回数は減少するが、 s の増加に伴って反復1回あたりの計算量が増加するため、常に計算時間が短くなるとは限らないが、多くの場合で計算時間が短くなっている。また、省通信化を行うことで、さらなる高速化を実現しており、その有効性が確認できる。一方で、基底状態のみを計算した際の結果では、反発力が大きいモデルに対してノイマン展開を用いても、ZSPJよりも計算時間が大きいこと、および、反発力が小さいモデルはノイマン展

表2 LOBPCG 法による 4×5 サイトハバードモデルの 10 個の固有値を計算した際の収束性の比較．電子数は，アップスピン，ダウンスピンとも 5 個である．ZSPJ は zero-shift point Jacobi 前処理を， s はノイマン展開の次数を表している．

	反復回数（上段）および計算時間（秒）（下段）								
	前処理なし	点ヤコビ	ZSPJ	ノイマン展開			省通信ノイマン展開		
				$s=1$	$s=2$	$s=3$	$s=1$	$s=2$	$s=3$
$U/t=1$	551 1221.552	777 1672.688	624 1369.914	319 911.563	257 897.794	184 759.402	340 863.571	302 936.351	198 680.482
$U/t=10$	398 996.189	298 740.979	313 763.422	232 720.225	184 704.137	161 705.028	201 579.979	177 607.458	137 515.602

表3 ハミルトニアン複数の固有値・固有ベクトルを LOBPCG 法で計算する際の主要演算の計算量の比較．ここで n はハミルトニアンの次元， m は求める固有値・固有ベクトルの数， s はノイマン展開の次数を表している．

演算	計算量
行列ベクトル積	$O((s+1)nm)$
TSQR	$O(nm^2)$
S_A	$O(nm^2)$
反復ベクトル ($x_{k+1}^{(i)}$ など)	$O(nm^2)$

開を利用すると ZSPJ より計算時間は短くなるが， s を大きくすると，収束までの反復回数は減少するが，トータルの計算時間が増加することが示されている（付録 A.1 参照）．これは，図 3 に示したように，求める固有値・固有ベクトルの個数を増やすと，行列ベクトル積の計算量は固有値の個数に比例して増加するが，反復ベクトルの直交化のための TSQR 法， S_A を計算するための内積，および，反復ベクトル $x_{k+1}^{(i)}$ などのベクトルの線形計算の計算量が 2 乗で増加するためである．ただし， s を求める固有値の個数よりも多く増加させると，行列ベクトル積の計算量が支配的になり，遅くなる可能性がある．

4.2 並列計算性能評価

提案した前処理を用いた LOBPCG 法の並列性能を確認するため，反発力が小さく ($U/t=1$)，アップスピン及びダウンスピンの電子がどちらも 6 個の 2 次元 4×5 サイトハバードモデルの小さい方から 10 個の固有値およびそれに対応した固有ベクトルを SGI ICX を用いて並列計算で求める．この時のハミルトニアン次元は 1,502,337,600 であり，非対角成分の非零成分数は 41,179,864,320 個である．ここでは，前処理として ZSPJ, 3 次のノイマン展開, 3 次の省通信ノイマン展開を用いて，並列数を 768 (64 MPI \times 12 OpenMP), 1536 (128 MPI \times 12 OpenMP), 3072 (256 MPI \times 12 OpenMP) と変化させて計算する．この結果から，どの前処理を用いても優れた並列化効率を達成していることがわかる．また，省通信化により，反復 1 回あたりの計算時間が約 15% 減少していることが確認できる．さらに，ZSPJ とノイマン展開前処理を比較すると反復 1 回あたりの行列ベクトル積の回数 4 倍になっているが，計算時間は 2 倍程度にしかなくて

表4 LOBPCG 法の並列性能．ZSPJ, NE, CANE はそれぞれ前処理として採用した zero-shift point Jacobi, ノイマン展開, 省通信ノイマン展開を表している．また，ノイマン展開の次数は 3 である．

並列数	反復回数（上段）計算時間（秒）（中段） 反復 1 回あたりの計算時間（秒）（下段）		
	ZSPJ	NE	CANE
64 MPI \times 12 OpenMP	591	226	225
	9501.694 16.077	5886.533 26.047	4921.302 21.872
128 MPI \times 12 OpenMP	605	246	229
	4611.478 7.622	3662.846 14.890	2909.048 12.703
256 MPI \times 12 OpenMP	601	244	226
	2259.070 3.759	2043.231 8.374	1603.456 7.095

いない．このことから，複数の固有値（および固有ベクトル）を計算する際には，行列ベクトル積よりも直交化や複数のベクトルを足しあわせて計算する反復ベクトル $x_{k+1}^{(i)}$ などの計算のコストが支配的であることが推測される．よって，LOBPCG 法を用いて複数の固有値および固有ベクトルを計算する際には，多少計算コストがかかっても，反復回数を減少させることが重要であると結論付けられる．

5. まとめ

本研究では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複数の固有値および固有ベクトルを LOBPCG 法で計算する際の前処理として，固有値情報を利用したノイマン展開を提案し，その有効性および並列性能を調査した．ノイマン展開前処理で使用する行列は作用素ノルムが 1 未満，つまり，すべての固有値の絶対値が 1 未満になる必要があるため，LOBPCG 法の反復過程で得られる近似固有値の情報や Gershgorin の定理から得られる固有値の分布に関する情報を利用して，できるだけ多くの固有値の絶対値が 1 未満になるように行列を変形している．しかし，すべての固有値を 1 未満にすることはできないため，前処理を施したベクトルから，絶対値が 1 以上の固有値に対応する固有ベクトル成分を除く順序でベクトルを直交化している．この提案した前処理を用いて複数固有値を計算し

たところ、反発力の大小にかかわらず、既存の前処理方法 (ZSPJ) よりも高速化することを確認した。また、並列数を 3000 程度まで増加させても、並列性能は劣化しないことを実際の並列計算から示した。さらに、モデルの物理的性質を考慮した省通信化を行うことで、さらなる高速化が実現できることを確認した。このことから、LOBPCG 法を用いてハバードモデルから導かれるハミルトニアン固有値を並列計算する際に、ノイマン展開は有効な前処理であると考えられる。

今後は、ハバードモデル以外の問題に対するノイマン展開前処理の有効性を調査する予定である。

謝辞 本研究の一部は、JSPS 科研費 15K00178 の助成を受けたものです。

参考文献

- [1] M. Rasetti, ed., The Hubbard Model: Recent Results, World Scientific, Singapore (1991)
- [2] A. Montorsi, ed., The Hubbard Model, World Scientific, Singapore (1992)
- [3] J.K. Cullum and R.A. Willoughby, Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations, Vol.1: Theory, Philadelphia: SIAM, (2002)
- [4] A. V. Knyazev, Preconditioned eigensolvers - An oxymoron?, Electronic Transactions on Numerical analysis 7, 104-123 (1998)
- [5] A. V. Knyazev, Toward the optimal eigensolver: Locally optimal block preconditioned conjugate gradient method, SIAM J. Sci. Comput.,23, 517-541 (2001)
- [6] 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).
- [7] 山田進, 今村俊幸, 町田昌彦, 量子大規模固有値問題における共役勾配法の収束性; 適応的シフト前処理の収束性の評価, 日本計算工学会論文集, No. 20060027, 2006. https://www.jstage.jst.go.jp/article/jscs/2006/0/2006_0_20060027/_pdf
- [8] S. Yamada, T. Imamura, and M. Machida, Communication avoiding Neumann expansion preconditioner for LOBPCG method: Convergence property of exact diagonalization method for Hubbard model, *Proc. of ParCo2017*. (accepted)
- [9] Y. Saad, Numerical methods for large eigenvalue problems: Revised Edition, SIAM, (2011)
- [10] 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).
- [11] R. Barrett, et. al., Templates for the Solution of Linear Systems; Bulding Blocks for Iterative Methods, Philadelphia: SIAM, (1994)
- [12] Y. Saad, Iterative methods for sparse linear systems, 2nd edn, SIAM, (2003)
- [13] J. Langou, AllReduce algorithms: application to Householder QR factorization, *Proc. of the 2007 International Conference on Preconditioning Techniques for Large Sparse Matrix Problems in Scientific and Industrial Applicatipns*, pp.103106, (2007).

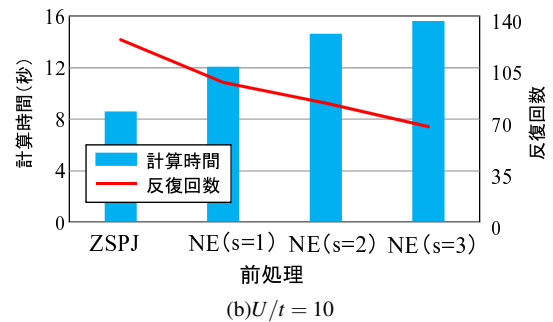
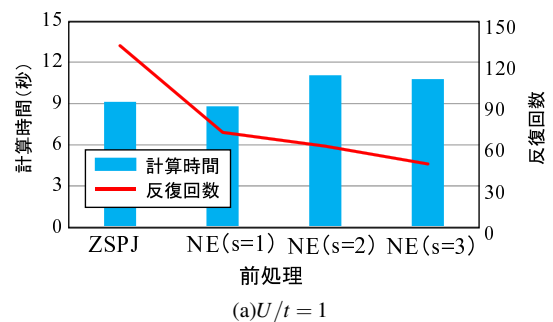


図 A-1 ハミルトニアン基底状態のみを計算するとき前処理として zero-shift point Jacobi(ZSPJ) およびノイマン展開 (NE) を用いた際の計算時間および反復回数の関係。ノイマン展開の次数 s は 1~3 である。この時、ノイマン展開前処理で利用する最大固有値は Gershgorin の定理により得られた最大固有値に減衰パラメータ $\alpha = 0.9$ を掛けたものを利用している。

- [14] J. Demmel, L. Grigori, M. Hoemmen, and J. Langou, Communication-avoiding parallel and sequential QR factorizations, Technical report, Electrical Engineering and Computer Sciences, University of California Berkeley (2008).

付 録

A.1 基底状態のみを計算する際のノイマン展開前処理の有効性

図 A-1 に電子数がアップスピンおよびダウンスピンともに 6 個の 2 次元 4×5 -サイト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基底状態 (最小固有値とそれに対応した固有ベクトル) を SGI ICX で 96 コア (8 MPI \times 12 OpenMP) で並列計算した際の zero-shift point Jacobi 前処理及び省通信ノイマン展開と収束性の関係を示している。この結果から、ノイマン展開前処理を用いることで、クーロン反発力 U/t の大きさに関わらず収束までの反復回数は減少するが、反発力が大きい場合には、トータルの計算時間は遅くなることがわかる。また、反発力の大きさに関わらず、ノイマン展開の次数 s を増加させると収束までの反復回数は減少するが、反復 1 回あたりの計算量が増加するため、トータルでは遅くなり、 $s = 1$ の時が最速であることが確認できる [8]。