

密度行列繰り込み群法と行列対角化による強相関量子系のシミュレーション：HPC 特別プロジェクト報告

町田昌彦，山田進，奥村雅彦

日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター
CREST (JST)

今村俊幸

電気通信大学・電気通信学部
CREST (JST)

1. はじめに

現在，物理学において最も注目されている話題の1つに，フェルミ原子（Li 等）からなる極低温原子ガス（フェルミ原子ガスと呼ぶ）の物性が挙げられる（図1にそのイメージを示した）{1}。その理由は，フェルミ原子ガスでは，フェシュバツハ共鳴を利用することで原子間相互作用を任意に引力から斥力までコントロール可能であり，原子物理学の根本問題（原子間相互作用を制御すると何が起こりうるか？）から物理学一般の最大の難問（粒子間相互作用の制御により，どのように物質の様態変化を制御できるのか？）にまで解答を与えられる可能性を有するからである。最近，このフェルミ原子ガスにおいて，レーザーの干渉により作られる光学格子中（図2参照）で，超流動・絶縁体転移など，固体材料中で起こりうる様々な現象をほぼ完全に再現できることが示された{2}。この光学格子ではレーザー光や磁場などを連続的に変化させることが可能であるため，固体材料より遥かに容易にかつ系統的に物性を研究できることが分っており，固体物理学の最大の難問となっている高温超伝導体の超伝導発現機構{3, 4, 5, 6}，最近現れた鉄系超伝導体{7}の発現機構，フラストレートした磁性体{8}，ランダムな強相関電子系{9, 10}などの様々な問題の理解に重要な貢献ができる可能性が指摘されている（図3参照）。

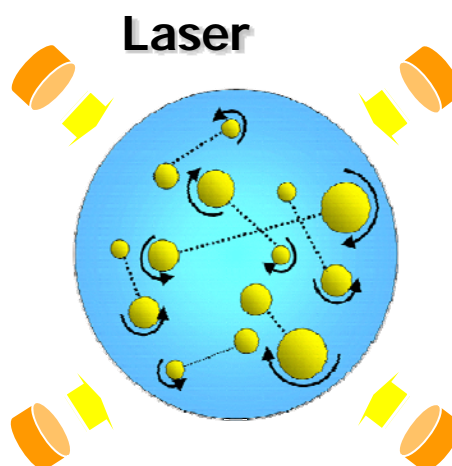


図1. フェルミ原子ガスのイメージ。四方からレーザーを照射したり，磁場を印加する等により，その性質を制御できる。

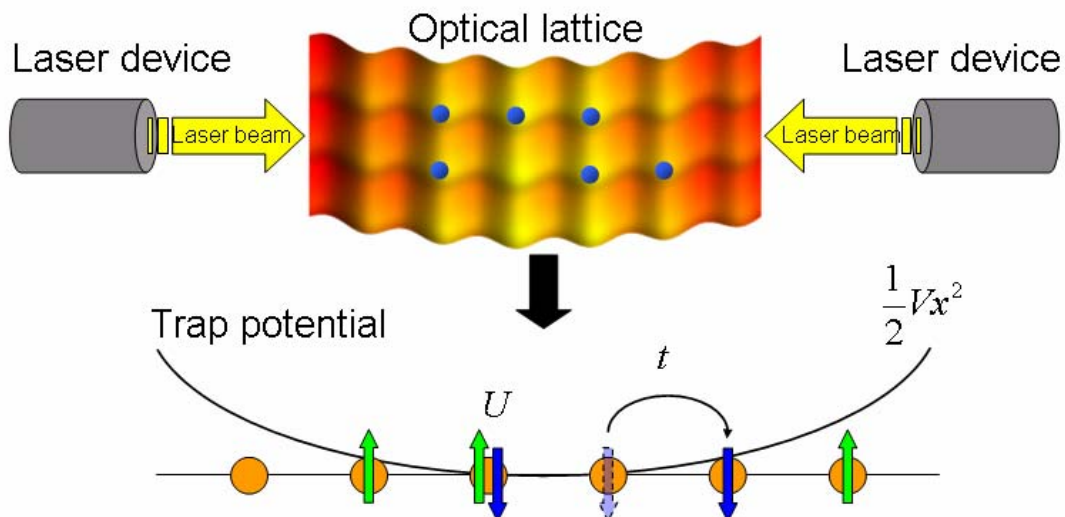


図2. 光学格子中のフェルミ原子ガスのイメージ（上図）。対向レーザーの干渉により格子（定在波）が形成される。フェルミ原子は、そのポテンシャルエネルギー極小点に位置することを好む一方、量子トンネル効果にて隣接格子点へと飛び移ることができる。この様子を模式的（1次元にマップ）に示したのが下図である。

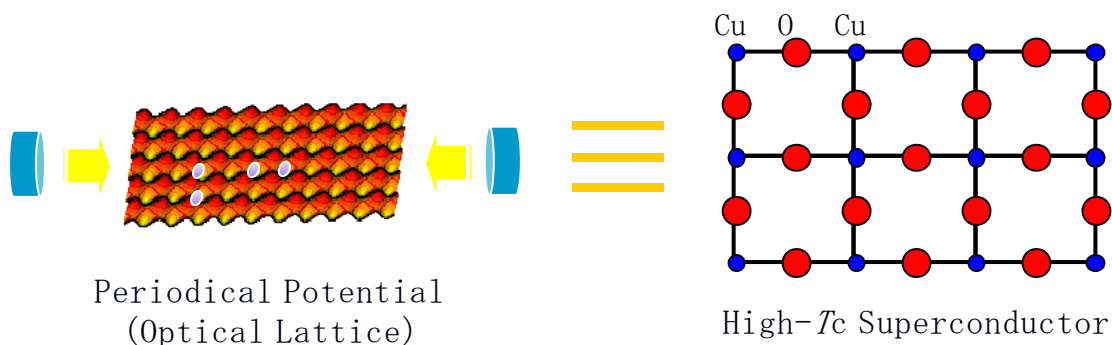


図3. 光学格子中のフェルミ原子ガスを上手に制御することで、高温超伝導体の CuO 面上の電子と同等の状態を作りだすことができる。高温超伝導と同じ現象（原子の場合は超流動）が観測されれば、高温超伝導機構の解明に大いに貢献できるかもしれない。

本記事にて紹介する HPC 特別プロジェクトでは、上記のように、原子物理学から固体物理学にまで広範囲に跨る物理学上の問題を厳密対角化法 {3, 11, 12, 13, 14, 15}, 一般の対角化法(全対角化法) {16} と密度行列繰り込み群法 {17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28} の二つの手法を用いて研究することを目標とした。これまで、厳密対角化法と全固有値を求める全対角化法については、地球シミュレータでの最大ノード利用 (512 ノード・4096 CPU) により計算科学上の成果 (SC05 & SC06 における 2 年連続 Gordon-Bell 賞ファイナリスト選出 {11, 12}) も創出しており、本計算機 T2K を用いて、更なる世界最大規模の計算に挑戦する準備 (次世代計算機が利用可能となった時) ができればと考えている。また、密度行列繰り込み群を用いたシミュレーションにおいては、本質的な超並列化に成功している研究グループは現在、世界において当グループのみ {21, 22}

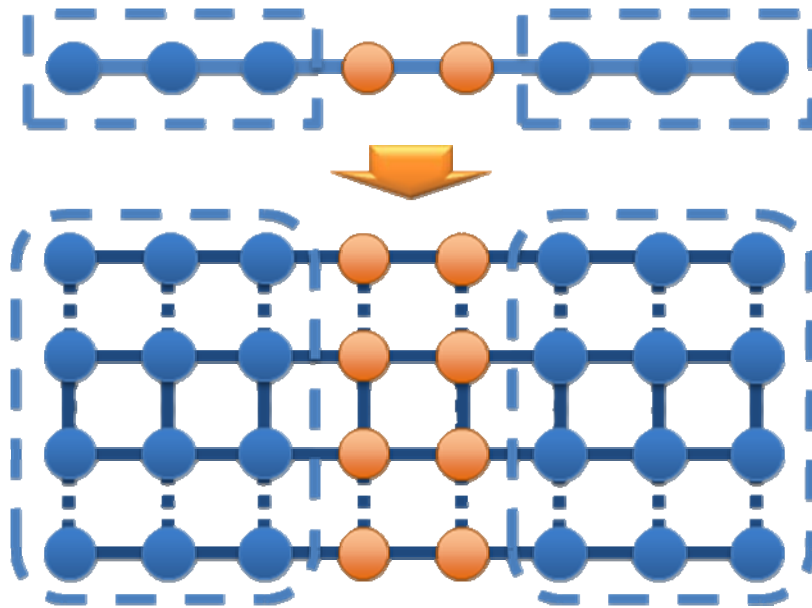


図4. 密度行列繰り込み群は、一次元のモデルに対して適用されてきたが、厳密対角化に相当する計算部分の並列化により、準2次元の梯子格子に対しても適用可能であることが分かっている。原理的には計算機資源が許す限り、梯子の足をいくらでも増やすことができる。

と自負しており、T2K を用いて従来の計算規模を遥かに超えた超並列計算を行い、準2次元系の基底状態の理解に対し、新たな成果の創出を目指すこととした(図4参照)。尚、本記事では、プロジェクトの限られた利用資源、利用時間の関係上、その大目標を達成するために、特別プロジェクトの期間内で得られた成果、発生した問題点、そして、今後への方策などを列記し、特に、私たちが直面したT2K利用上での初歩的なミスから他のユーザーにとっても共通と思われる問題について率直に、研究の時系列に従って示していくこととした。この記事がT2Kをこれから利用する研究者や、同じ悩みを抱く研究者の方々にとっての一助となれば幸いです。尚、以下の構成として、2章で厳密対角化法のT2Kでのパフォーマンス評価結果について述べ、3章で、全対角化について同様の結果を記す。そして、4章にて、特に全対角化を移植し、チューニング時に出会った問題や特徴的な出来事を時系列に則して記した。

2. 厳密対角化法のT2K上でのパフォーマンス評価

我々の研究グループでは、2000年ぐらいから光学格子上のフェルミ原子ガスやナノスケールの超伝導体の物性等が注目され始めたことを受け(しかも、対象とする系自体は有限系であり、計算資源が許せば計算可能である)、それらの系の物性を理解する上で最も基本となるハバードモデル(図5参照)の厳密対角化法{3}の開発を2004年から開始した。また、同時に地球シミュレータ{29}が稼動し、数テラバイトのメモリが使用可能となったことを受け、地球シミュレータ上で最大限度のメモリを使うことで、上記の物理問題解決に大きく貢献できるに違いないと考え、開発した厳密対角化法の超並列化および高速化の研究を同時に進めてきた{30}。本章では、上記の経緯にて開発した地球シミュレータ用超並列厳密対角化コード{11, 12, 31}をT2Kに移植し、マルチコア性能の評価を行った結果について記す。

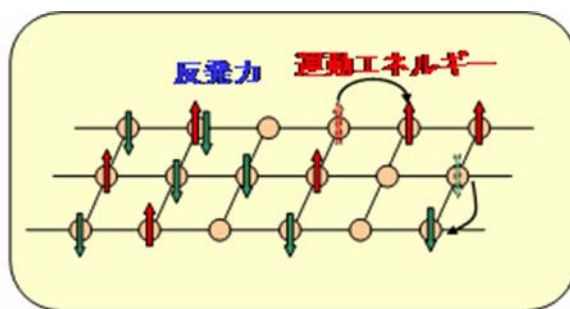


図5. ハバードモデルの模式図。アップスピンとダウンスピン粒子（ともにフェルミ粒子）が格子点上に存在し、同じ格子点にアップスピン粒子とダウンスピン粒子が存在すると反発力によるエネルギーの損失が、粒子が移動できると運動エネルギーの利得がそれぞれ発生する。

T2K のマルチコア性能を評価し、地球シミュレータ・ベクトルプロセッサとの比較評価を行うため、地球シミュレータ用に開発した厳密対角化のプログラムを用いて、MPI と OpenMP を用いたハイブリッド計算を行った。利用したプログラムは、地球シミュレータ上での最適チューニングが済んでおり、地球シミュレータ上ではピーク性能の 50% を超える。尚、移植に際しては、ベクトルパイプラインを想定したループアンローリングを元に戻したことで、MPI_PUT, MPI_GET (MPI-2 命令) が利用できないため、MPI_isend, MPI_irecv, MPI_Wait を利用した通信に変更した。それ以外は支障が無かったので、そのまま T2K で実行した。

次にマルチコアの性能評価結果だが、その評価を行うために必要な情報として、本計算手法の特徴を以下に記す。厳密対角化法でキーとなる数値計算は行列（ハミルトニアンを行列で表現したもので超大規模の疎行列である）×ベクトル（ハミルトニアン行列の固有ベクトル）積の繰り返しであり、実は疎行列×ベクトル演算の並列化を論じるだけで十分である。実際の並列化に際しては、疎行列の並列化は効率が激減するため、一度、疎行列×密行列に計算対象の対称性を考慮して変換し、密行列を均等分割して並列化している {1 1, 1 2}。これにより、分割単位毎のロードバランスが取れ、高い並列化効果が得られることを地球シミュレータ上で確かめている {1 1, 1 2}。また、本手法の二つ目の特徴として、行列の転置を取る必要等から通信量が多い上、メモリアクセスも頻繁に行われるため、マルチコアでの性能向上が難しいプログラムであることを付記しておく。

性能評価結果に移ろう。先の移植を実施した後、まず、マルチコアの特性を調べ、その効果を体感する意味を含めて、小さいモデル（16 サイトのハバードモデルを表現している約 6400 万次元のハミルトニアン行列）でのシミュレーションとして

case1-1 4 プロセッサ/ノード × 1 ノード × 2 スレッド (4 MPI x 2 スレッド)
 case1-2 4 プロセッサ/ノード × 2 ノード × 2 スレッド (8 MPI x 2 スレッド)
 case1-3 4 プロセッサ/ノード × 1 ノード × 4 スレッド (4 MPI x 4 スレッド)

の 3 ケースを実行した。得られた結果を表 1 に示す。尚、スレッドは OpenMP で並列化している。同じシミュレーションであり、ノード数とコア数だけを変えて実行している。

表1：小規模モデルのシミュレーション結果

	コア数	プロセッサ数	1プロセッサ あたりのコア数	計算時間 (秒)	計算性能 (ピーク比)
case1-1	8	4	2	184.49	2.70GFLOPS (3.67%)
case1-2	16	8	2	102.64	4.86GFLOPS (3.30%)
case1-3	16	4	4	160.45	3.11GFLOPS (2.11%)

表1の結果の case1-1 と case1-2 の比較から 1 プロセッサあたりのコア数が増加しなければ 1.80 倍の高い高速化を達成しているが、case1-1 と case1-3 の比較からコア数が増加したのでは 1.15 倍とほとんど高速化していないことが確認できた。この原因としては、本アプリケーションは本来地球シミュレータ（ベクトル計算機）用であり、データの再利用を全く考慮しないアルゴリズムを採用しているためであると考えられ、具体的には

1. データの再利用を考慮していないため、キャッシュメモリを有効的に利用できない
2. メインメモリへのアクセスが大量に発生するが、T2K のメインメモリは 4 つのコアで共有しているため、メモリアクセスが競合し、十分な計算データを用意することができない
3. コア数が増えて計算の理論性能が向上しても、計算に必要なデータがないため、計算ができず、実際の計算性能は向上しない

という状況になっていると考えられる（正確に知るためには、メモリアクセス等の情報を解析する必要があるが、今回は時間が限られていたため、解析は実行できず）。

次に、大規模なシミュレーション（21 サイトのハバードモデルを表現する約 135 億次元のハミルトニアン行列）の性能評価を行う。ここでは、大規模なシミュレーションとして

case2-1 4 プロセッサ/ノード × 128 ノード × 2 スレッド (512MPI x 2 スレッド)
 case2-2 4 プロセッサ/ノード × 64 ノード × 4 スレッド (256MPI x 4 スレッド)

の 2 ケースを並列計算した結果を表 2 に示す。

表2：大規模モデルのシミュレーション結果

	コア数	プロセッサ数	1プロセッサ あたりのコア数	計算時間 (秒)	計算性能 (ピーク比)
case2-1	1024	512	2	704.44	165.03GFLOPS (1.75%)
case2-2	1024	256	4	1135.85	102.31GFLOPS (1.09%)

この結果からも、総コア数が同じでも 1 プロセッサあたりの利用するコア数が少ないほうが約 1.6 倍高速であることが確認できる。このことから、本アプリケーションをそのまま利用したのでは、メインメモリへのアクセスが多く、メモリバンドの競合のため、T2K の計算性能を有効に利用できないと推測できる。

以上の結果から、マルチコアのアーキテクチャを利用するためにはこれまで以上にキャッシュメモリを考慮する必要がある。そのため、本プログラムのように既存の計算機（特にベクトル機）用開発されたアプリケーションをマルチコア計算機で実行する場合には、キャッシュ

メモリが有効に利用できているかを調査し、有効利用できていない場合には、キャッシュメモリを有効に利用できるアルゴリズムに変更することが必要であることが分かる。

3. 全対角化法の T2K 上でのパフォーマンス評価

我々の研究グループでは、2章で記した厳密対角化法の超並列化と共に、全ての固有値及び固有状態を得るために必要な全対角化法の超並列化も同時進行で研究開発を行ってきた。全対角化は、1章にて記した物性物理や原子物理だけでなく、化学やバイオ等、あらゆる分野にて利用可能な普遍的ルーチンであり、その研究開発は様々なアプリケーションが動作するだろう次世代計算機において重要であると考えている。計算は以下に記述するように、3つのルーチンから構成され、その一部は地球シミュレータ上で70%以上のパフォーマンスを出している{12, 32}。また、スカラー計算機上での並列化も進めており、パフォーマンスは十分に満足できる結果である。このように、全対角化は、2章で記した厳密対角化と比べて、あまり、機種その他に依存せず、チューニングによる性能向上が目に見えて上昇するなど、マルチコアによる超大並列計算を行う予定の次世代計算機上でも、高い性能を出すと期待できる。本章では、これまでに開発してきた超並列全対角化コードをT2Kに移植し、マルチコア性能の評価を行った結果を記す。

本プロジェクトでは、量子シミュレーションの中核となるハミルトニアン行列の全固有値固有ベクトル求解ルーチンを地球シミュレータより移植し、1000コア以上の環境で高速にかつ安定、スケラブルに動作するかの検証を行うことを目標として作業に着手した。まず、1コア単体でハウスホルダー順変換2.39GFLOPS、ハウスホルダー逆変換2.94GFLOPSを記録した(尚、全体角化法は、ハウスホルダー順変換、分割統治法、ハウスホルダー逆変換の3つのルーチンに分割できる)。次に1ノード内の16コア使用によるflat-MPI実行での動作を検証し、1000次元から32000次元まで問題なく動作することを確認した。性能は1コア時からチューニングを行い、32000次元の計算でハウスホルダー変換16.51GFLOPS、逆変換60.55GFLOPSを記録した。尚、逆変換は1ノードの理論ピーク(147.2GFLOPS)の41.1%であり、極めて高い性能を示している。次に、複数ノード間複数コアによるflat-MPI実装での動作検証を行うため、32ノードまでを利用して動作検証を行った。32ノードまでの2ベキのノード数利用では全く問題なく動作した。性能は、32ノード使用時96000次元でハウスホルダー順変換428.35GFLOPS(ピーク4710GFLOPSの9%)、逆変換2210GFLOPS(ピーク4710GFLOPSの47%)を達成した。全体の計算では概算で781GFLOPS(ピークの16%)に到達した。最後に1000コア以上での性能評価を実施した。各ノードで実施した最大規模の問題とその時の性能を次の表に記す。

ノード数 (コア数)	最大次元	ハウスホルダー順変換	ハウスホルダー逆変換	全体 (含む分割統治法)
128 (2048)	128000	1077GFLOPS (5.7%) 2594 秒	7562GFLOPS (40%) 554 秒	3298GFLOPS (17.5%) 3298 秒
256 (4096)	256000	2868GFLOPS (7.6%) 7799 秒	15373GFLOPS (40%) 2182 秒	5536GFLOPS (14%) 10241 秒
512 (8192)	192000	2393GFLOPS (3.1%) 3942 秒	24834GFLOPS (33%) 570 秒	5025GFLOPS (6.7%) 5025 秒

いずれの計算においても、全体でテラフロップスを記録できたが、512 ノード使用時が最も性能が悪い結果となっている。データの詳細を解析すると、通信時間の比率が 256 ノード以上に大きくなっていることが分かった。結論としては 512 ノードでは問題サイズが小さすぎたために十分な性能を活かしきれなかったと見ている。また、本結果は十分なチューニングを施しているわけではなく、十分な性能向上の余地を残したものであくまでも短期間での移植作業による結果である。したがって、固有値計算においては少なくともこれ以上の性能が見積もれる「指標」として考えてもらいたい。

4. 全対角化法の T2K 上への移植と発生した問題点

本章では、2, 3 章にて書くことのできなかつた全対角化コードのテストで出会った事象（発生した問題点や解決策及びその他の出来事について）について、今後、新たに T2K 利用を始める方々に何らかの役に立つと考え、時系列に従い散文形式にて記した。

1. まず、今回のプロジェクトでは、移植作業の時間を多くとれなかつたためインテルコンパイラは使わず日立コンパイラのみでの作業であったことを記す。
2. 移植に際して、コンパイル・リンクについて問題はなかつたが、実際の動作において ScaLAPACK が複数ノード利用+あるサイズ以上の問題でハングアップしてしまった。ScaLAPACK を実際にソースから構築し直し、ハングアップ部分を特定しようと試みたが、BLACS 通信関数でハングする傾向があることが分かつたため、BLACS の build 時に SENDIS = -DSndIsLocBlk を有効にして build することでハングの傾向は減つた。ただし、完全に減つたわけではなく ScaLAPACK の関数で BLACS により複数の送受信を同時に行っている部分を MPI のノンブロッキング通信関数に書き換え一時的にハングを解消した。しかし、それでもハイブリッド実行時には完全ではなかつた。
3. ScaLAPACK ルーチンの性能は BLAS で決定するため、GotoBLAS を導入することで対応した。
4. MPI の交換型の通信パターンの際にハングすることがあつたため、Isend->Recv または Irecv->Send を利用する代わりに Irecv->Isend->Waitall に変更した。
5. ハイブリッド実装の際、日立製コンパイラにてコンパイルした場合に実行時予期しない数のプロセスが立ち上がり、性能が全くでないという事態に遭遇した。マニュアル等を調べ実行時に `-F' prunst(threadnum(4))'` を指定すればよいことが分かり性能は改善したが、後で、調べた結果基盤センターの Web ページにも別の解決方法が示されていることが分かつた。

次に、実際にプログラムを動作しパフォーマンス測定にまで至つた作業について、何が問題となり、それらをどのように解決し、何を達成できたかを以下に示す。

1. Altix システム向けに開発したコードを HA8000 に移植：
自作コード部分は特に問題なく移植完了。ScaLAPACK 部分は先に述べたとおり。
2. 1 コアでの動作検証：
バッチ環境でのチューニング経験があまりなかったため、Intel Xeon プロセッサでチューニングしたものをもとにわずかなチューニング作業を行い、1 コア単体でハウスホルダー順変換 2.39GFLOPS、ハウスホルダー逆変換 2.94GFLOPS を記録した。逆変換部分はチューニングの余地は大きくあったが作業をこの程度に止めた。
3. 同一ノード内複数コアによる flat-MPI 実装での動作検証：
1 ノード内の 16 コア使用による flat-MPI 実行での動作を検証し、1000 次元から 32000 次元まで問題なく動作することを確認した。性能は 1 コア時からチューニングを行い、32000 次元の計算でハウスホルダー変換 16.51GFLOPS、逆変換 60.55GFLOPS を記録した。逆変換は 1 ノードの理論ピーク (147.2GFLOPS) の 41.1% であり、性能面ではかなりよい成績を示している。
4. 複数ノード間複数コアによる flat-MPI 実装での動作検証：
HPC プロジェクトでは通常 128 ノードのクラスが開放されていたが、通常の試験では 32 ノードまでを利用して動作検証を行った。結論としては 32 ノードまでの 2 べきノード利用では全く問題なく動作した。それ以外は検証していないが、地球シミュレータ等での経験から問題なく動作するものと判断する。性能は、32 ノード使用時 96000 次元でハウスホルダー順変換 428.35GFLOPS (ピーク 4710GFLOPS の 9%) 逆変換 2210GFLOPS (ピーク 4710GFLOPS の 47%) を達成した。全体の計算では概算で 781GFLOPS (ピークの 16%) に到達した。
5. 1000 コア以上での性能評価：
128 ノード、256 ノード、512 ノード使用の機会を頂けたため、限られた時間ではあるが 4. の設定をそのまま使い大規模ノードでの実測を試みた。各ノードで実施した最大規模の問題とその時の性能については、3 章の表を参照されたし。いずれも計算全体でテラフロップスを記録できたが、512 ノード使用時が最も性能が悪い結果となっている。データの詳細を解析すると、通信時間の比率が 256 ノード以上に大きくなっている。具体的には順変換の 256 ノード (256K 次元) では通信 2557 秒、全体が 7799 秒であるので通信が 32.7% に相当する。512 ノード (192K 次元) では通信 2652 秒、全体で 3942 秒なので通信は 67.2% になり 512 ノードでは 256 ノードの倍以上の時間プロセッサがアイドル状態でいたことになる (図 6 に 256 ノードのときのみであるが実行ログを掲載する)。結論としては 512 ノードでは問題サイズが小さ過ぎたために十分な性能を活かしきれなかったということになる。また、通信性能が仮に 2 倍になっても本質はレイテンシにあるため、性能の改善はわずかなものになると予想される。測定データが少ないためスケーラビリティの議論はできないのだが、512 ノードで 360000 次元の測定が可能であれば全体で 10TFLOPS (ピーク 1/6) が達成できた可能性がある。ただし実行時間は 4 時間にも達するため、本プロジェクトのような

制限時間付ベンチマークとしては不適切になる（これは、来る次世代計算機にて問題になりそうである。次世代計算機で最大の計算サイズにてベンチマークした場合、結果が出るまでの時間を見積もると大変な占有時間となってしまいうだろう）。

MATRIX_SIZE=	256000			
NUM.OF.PROCESS=	4096 (64	64)	
calc (u,beta)	465.143042325973511			
mat-vec (Au)	6092.16216659545898		1835.93449432374246	
COMM1/2	781.987825393676758		730.568418025970459	
2update (A-uv-vu)	614.600288152694702		18198.5119146053039	
calc v	187.255089759826660			
v=v-(UV+VU)u	428.345677375793457			
UV post reduction	1.29367899894714355			
COMM_STAT				
BCAST ::	535.078449249267578			
REDUCE ::	1960.95371365547180			
REDIST ::	0.000000000000000000E+000			
GATHER ::	62.2501411437988281			
TRD-BLK	256000	7799.53520894050598	2868.07107527270637	GFLOPS
D&C	259.870339870452881	ERRCODE=	0	
TRDBAK-WY	256000			
TRBAK=	2182.48651695251465			
COMM=	424.347877740859985			
	15374.4051747239555	GFLOPS		
	18818.0385140817889	GFLOPS		
	19674.9351032307859	GFLOPS		
COMM_STAT				
BCAST ::	120.342360734939575			
REDUCE ::	303.681238889694214			
REDIST ::	0.000000000000000000E+000			
GATHER ::	0.000000000000000000E+000			
TRDBAK	256000	2182.56937813758850	15373.8210510624122	GFLOPS

図6. 256 ノードを使用して 256K 次元の全対角化実行時のログ（上記ログは内部の主要ルーチンや通信コストを示しているが詳細は省略する。また、3 章で示した全体の FLOPS は $(10/3N^3)/(\text{全体の経過時間})$ で算出したものである。）

6. MPI と OpenMP を併用したハイブリッド実装での動作検証：

ハイブリッド実装（日立コンパイラ）での実行は残念ながら 1. の問題が解決されなかったため（理由は不明）、自前のルーチンのみ実行できることを確認するのみに終わった。通信が 1/4 以下になるため、性能面での改善は期待できたのであるが誠に残念である。こちらの Xeon クラスタでは問題なく動作しており、ScaLAPACK の問題がなければ、ハイブリッド版により計算全体でピーク性能の 20% は達成できたかも知れない。

5. 本 HPC 特別プロジェクトのまとめと今後の展望

以上が本 HPC プロジェクトにおいて実際に行った作業、そして得られた知見だが、我々は、これまで、地球シミュレータなどのベクトル計算機を中心に固有値ソルバーの開発を行ってきたため、性能面、特に対ピーク性能で 10% を切るようなルーチンに遭遇するのは初めての経験であった（具体的には、全対角化のハウスホルダー順変換がその際たるものである）。厳密対角化では、抜本的アルゴリズムの変更が必要であることが判明した一方、全対角化については、

予想通りのパフォーマンスをほぼ得ることが出来たと考えている（ハウスホルダー逆変換で最大 40%の効率である）。また、問題点等については学会等ですでに議論されており、解決策の目星は大体ついている。今後はその解決策を取り込んだ新しいアルゴリズムの実装と評価を行うこと、さらには、今回実施できなかったハイブリッド実装の性能評価を行うことが目標となる。尚、本プロジェクトの範囲で、当初に密度行列繰り込み群法の移植や性能評価を予定したが、時間の都合で実行できなかった。その後、T2Kの有償利用により、その計画を実行していることを付記する。

最後に、東京大学情報基盤センターの皆様には大変御世話になりました。厚く御礼申し上げます。今後もこうした機会がございましたら何卒、宜しく願いいたします。

参 考 文 献

- { 1 } I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, Many-body physics with ultracold gases, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 885 (2008).
- { 2 } M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. Sen(De), and U. Sen, Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond, *Adv. Phys.* **56**, 243 (2007).
- { 3 } E. Dagotto, Correlated electrons in high-temperature superconductors, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
- { 4 } Y. Yanase, T. Jujo, T. Nomura, H. Ikeda, T. Hotta and K. Yamada, Theory of Superconductivity in Strongly Correlated Electron Systems, *Phys. Rep.* **387**, 1 (2003).
- { 5 } P.A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 17 (2006).
- { 6 } J.R. Schrieffer and J.S. Brooks (ed), *Hand book of high-temperature superconductivity* (Springer, New York, 2007).
- { 7 } Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono, Iron-Based Layered Superconductor $\text{La}[\text{O}_{1-x}\text{F}_x]\text{FeAs}$ ($x=0.05-0.12$) with $T_c=26\text{K}$, *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 3296 (2008).
- { 8 } H. T. Diep (ed), *Frustrated Spin System* (World Scientific, Singapore, 2004).
- { 9 } P.A. Lee and T.V. Ramakrishnan, Disordered electronic systems, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985).
- { 1 0 } F. Evers and A.D. Mirlin, Anderson transitions, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1355 (2008).
- { 1 1 } S. Yamada, T. Imamura, and M. Machida, 16.447 TFlops and 159-Billiondimensional Exact-diagonalization for Trapped Fermion-Hubbard Model on the Earth Simulator, *Proc. of SC05* (2005).
- { 1 2 } 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).

- { 1 3 } M. Machida, S. Yamada, Y. Ohashi, and H. Matsumoto, Novel Superfluidity in a Trapped Gas of Fermi Atoms with Repulsive Interaction Loaded on an Optical Lattice, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 200402 (2004).
- { 1 4 } M. Machida, S. Yamada, Y. Ohashi, and H. Matsumoto, On-site pairing and microscopic inhomogeneity in confined lattice fermion systems, *Phys. Rev. A* **74**, 053621 (2006).
- { 1 5 } S. Yamada, M. Machida, Y. Ohashi, and H. Matsumoto, Strong pairing and microscopic inhomogeneity of lattice fermion systems, *Physica C: Superconductivity and its applications*, **463**, 103 (2007).
- { 1 6 } S. Yamada, M. Machida, T. Kano, T. Imamura, and T. Koyama, On-site pairing interaction and quantum coherence in strongly correlated systems, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **69**, 3395 (2008).
- { 1 7 } S. R. White, Density matrix formulation for quantum renormalization groups, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).
- { 1 8 } S. R. White, Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups, *Phys. Rev. B* **48**, 10345 (1993).
- { 1 9 } U. Schollwoeck, The density-matrix renormalization group, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 259 (2005).
- { 2 0 } K. A. Hallberg, New trends in density matrix renormalization, *Adv. Phys.* **55**, 477 (2006).
- { 2 1 } S. Yamada, M. Okumura, and M. Machida, Direct Extension of Density-Matrix Renormalization Group toward 2-Dimensional Quantum Lattice Systems: Studies for Parallel Algorithm, Accuracy, and Performance, arXiv:0707.0159.
- { 2 2 } S. Yamada, M. Okumura, and M. Machida, High Performance Computing for Eigenvalue Solver in Density-Matrix Renormalization Group Method: Parallelization of the Hamiltonian matrix-vector multiplication, *Proceedings of VECPAR' 08*, 448 (2008).
- { 2 3 } T. Yamashita, N. Kawakami and M. Yamashita, Fermionic Atoms Trapped in One-Dimensional Optical Superlattice with Harmonic Confinement, *Phys. Rev. A* **74**, 063642 (2006).
- { 2 4 } M. Tezuka and M. Ueda, Density-Matrix Renormalization Group Study of Trapped Imbalanced Fermi Condensates, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 110403 (2008).
- { 2 5 } M. Machida, M. Okumura, S. Yamada, Stripe formation in fermionic atoms on a two-dimensional optical lattice inside a box trap: Density-matrix renormalization-group studies for the repulsive Hubbard model with open boundary conditions, *Phys. Rev. A* **77**, 033619 (2008).
- { 2 6 } M. Machida, S. Yamada, M. Okumura, Y. Ohashi, and H. Matsumoto, Correlation effects on atom-density profiles of one- and two-dimensional polarized atomic Fermi gases loaded on an optical lattice, *Phys. Rev. A* **77**, 053614 (2008).
- { 2 7 } M. Okumura, S. Yamada, N. Taniguchi, and M. Machida, Hole Localization in Doped

- One-Dimensional Anderson-Hubbard Model, Phys. Rev. Lett. **101**, 016407 (2008).
- { 2 8 } M. Machida, M. Okumura, S. Yamada, T. Deguchi, Y. Ohashi, and H. Matsumoto, Mott phase in polarized two-component atomic Fermi lattice gas, Phys. Rev. B **78**, 235117 (2008).
- { 2 9 } <http://www.jamstec.go.jp/esc/index.html>
- { 3 0 } 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 Vol.2006, 論文番号 20060027, (2006).
- { 3 1 } 山田進, 今村俊幸, 町田昌彦, 荒川忠一, 共有分散メモリ型並列計算機における新規通信手法, 日本計算工学会論文集 2005 年号, 論文番号 20050010,
- { 3 2 } 山田進, 今村俊幸, 町田昌彦, 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, 数理解析研究所講究録 1573, 53 (2007).