

磁性体を記述する疎行列の数値対角化における 大規模並列計算の挑戦

中野博生

兵庫県立大学大学院物質理学研究科

多田野寛人

筑波大学計算科学研究センター

坂井徹

兵庫県立大学大学院物質理学研究科

1. 背景

“固有値問題”は、極めて一般的な研究課題で、科学技術の様々な場面でしばしば登場する。一般の人にも関係する身近な事例としては、橋などの巨大な建造物の設計に現れる。こういった建造物を設計する場合、基準振動を求めることが固有値問題に対応し、それを解くことで得られる基準振動は建造物の安全性を知る上で重要な知見となる。学術的な場面としては、量子力学がその一つに挙げられる。量子力学の基礎方程式の一つであるシュレディンガー方程式が正に固有値問題そのものである。この方程式は下の式で与えられる。

$$\mathcal{H}\Psi_n = E_n \Psi_n$$

ここで \mathcal{H} はハミルトニアンと呼ばれ、行列として表現される。研究対象となる物理系ごとにハミルトニアンが与えられ、それに対応する固有値 E_n と固有状態 Ψ_n を求める問題となっている。固有値 E_n は固有エネルギーと呼ばれる系の基礎情報である。固有状態 Ψ_n は波動関数とも呼ばれ、系の様々な性質を引き出す元になる。このような量子力学的研究において多くの研究者が強く関心を持っている物理系では、しばしばハミルトニアン行列の次元が非常に大きくなる場合がある。しかしながら、行列次元が大きくなると固有値問題を解くことは一般に困難である。紙とペンで行う解析計算で固有値問題を解くことは極めて例外的な事例を除いてほとんど不可能と言ってよい。そういう現状で、紙とペンの代わりにコンピュータを活用することが現実的に広く行われているものの、最新のコンピュータを使ったとしても、必ずしもどんな固有値問題も解ける訳ではない。そうすると、巨大次元の行列の固有値問題として、どのくらいの次元の計算だったら実用的な事例の中で実際に実現可能なのか、という課題を設定することが出来る。そのように設定した課題を、我々は、磁性体を対象とする物理研究の中で大規模チャレンジ課題として Oakforest-PACS で推進した。

磁性体は磁石の性質を示し得る物質のことであるが、「小さな磁石」の集合体と考えることができる。その「小さな磁石」は、物質の中の電子が持つ「スピン」と呼ばれる性質がそれを担っている。「小さな磁石」の各々の挙動の総体的な結果として系全体の性質が決まる。微視的な電子サイズの事柄なので、磁性体の問題は基本的に量子力学の問題である。ハミルトニア

ンは、具体的には後で示すように、スピン演算子を用いて表現される。ここでは、系が N 個のスピンを含む場合を考える。このスピン同士が相互作用を持つため、多体問題と呼ばれる一般に解析の困難な問題となる。この問題を行列で書くとき、行列の次元は N に関して指数関数的に増大する。したがって、 N の増加に対して、行列次元は急激に増大する。たとえコンピュータを用いる場合であっても取り扱いが困難となる直接的な原因が、この急激な増大である。現実の磁性体ということであれば N としてはアボガドロ数程度の巨大な数を取り扱っているところであるが、実際に固有値問題として直接的にコンピュータで取り扱える N は、今でも数十のオーダーに留まる。それでも、ほんの少しでも大きな系の計算を実現できるようになると、物理量の精度や解像度が上がり、無限系の情報に迫ることができる場合があり、様々な物性研究で寄与してきた。

そのような状況で、本課題がチャレンジする物理の課題は、2016年度のノーベル物理学賞に輝いたハルデンが提唱した量子スピン系の特異な物性である。ハルデンは、構成スピンの大きさが整数である場合、ハイゼンベルク型の相互作用を持つ1次元鎖の反強磁性体の性質として、その基底状態に縮退はなく、同時に、基底状態のすぐ上にはエネルギーギャップが開いている、と予想したことが発端となった[1,2]。当初驚きを持って迎えられたエネルギーギャップ（ハルデンギャップと呼ばれる）も確かに開いていることが検証され、この分野の理解が急速に発展した。近年でも、対称性に守られたトポロジカル相として一般化された形で新たな関心を引いている。そのようなハイゼンベルク反強磁性体1次元鎖模型のうち、スピンの大きさが $S=1$ の場合は、最も幅広く様々な方法で取り組まれてきた事例である。ハルデンギャップの精密評価も進み、密度行列繰り込み群法[3]と量子モンテカルロ法[4]といった、大きなシステムサイズの系の計算が可能な方法で得られた値は高い精度で互いに合致する。一方、ごく小さい系しか取り扱えない数値対角化法のデータでも、慎重に外挿手続きを行えば、密度行列繰り込み群法や量子モンテカルロ法の評価と匹敵する精度で合致するエネルギーギャップが見積もれることが実証されている[5]。この $S=1$ のハルデンギャップは比較的大きいことが幸いし、研究が深化したが、より大きな S の場合は、それほど進んでいる状況ではない、 S が大きくなるにつれて、ハルデンギャップは小さくなるため、ギャップ値の具体的な数値を $S=1$ の場合のように精度良く見積もることが難しいためである。実際、 $S=2$ については、密度行列繰り込み群法での研究が最も早く様々な研究者によって取り組まれたが、当初は値すらバラバラな時期が続いた。

このような $S=2$ のハルデンギャップについて、高精度評価としていち早く報告されたのが密度行列繰り込み群法による研究[6]である。しかしながら、その後、行われた量子モンテカルロ法による評価値[5]と比較すると、それぞれが高精度評価として誤差付きで報告されたものながら、互いに誤差の範囲では合致していない結果となっていた。さらに、その後に行われた密度行列繰り込み群法による研究[7]は、量子モンテカルロ法による評価値[4]を支持した。密度行列繰り込み群法における微妙な取り扱いの違いが評価値に僅かながらでも有意な違いをもたらしており、いずれの評価値が真の値と考えてよいのか、密度行列繰り込み群法と量子モンテカルロ法のいずれとも異なる第3の手法による検証が必要な状況となっていた。 $S=2$ のハルデンギャップについては、その候補物質も実験的に報告されている状況[8,9]を鑑みると、僅かな違いであっても科学的真理を追究する必要がある。そのような物理的課題に数値的対角化法で取り組んだのが、本研究である。

2. 模型

今回、我々が調べたのは、 $S=2$ ハイゼンベルク反強磁性体 1 次元鎖の系である。この系を記述するハミルトニアンは、次の式で与えられる。

$$\mathcal{H} = \sum_i J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}$$

ここで、 \mathbf{S}_i はサイト i での $S=2$ スピン演算子である。隣接スピン間の相互作用の強さを $J(>0)$ で表す。有限サイズクラスターは N 個のスピンを含むものとする。ただし、有限サイズクラスターの端は以下の 3 式で定義される捻り境界条件を課す。

$$S_{N+1}^x = -S_1^x$$

$$S_{N+1}^y = -S_1^y$$

$$S_{N+1}^z = S_1^z$$

この境界条件の下での有限系（サイト数 N ）のエネルギーギャップ

$$\Delta \equiv E_1 - E_0$$

がハルデンギャップの評価に適切であることが分かっている[5]。ただし、 E_0 と E_1 はそれぞれ基底状態エネルギーと第一励起状態エネルギーである。

3. 計算手法

既に述べたように、量子スピン系に対する直接数値シミュレーションとしては、量子モンテカルロ法と密度行列繰り込み群法、数値的厳密対角化法が代表的な方法である。これらの方法にはそれぞれの一長一短が知られている。このうち、量子モンテカルロ法と密度行列繰り込み群法は、比較的大きな系の計算が可能であるが、量子モンテカルロ法は、系にフラストレーションがある場合には負符号問題と呼ばれる計算上の困難が知られている。結果に統計誤差を伴うため、高精度の結果を得るには十分多くのサンプリングを取り扱う必要があり、大きな系では非常に大きな資源を要する。密度行列繰り込み群法は、フラストレーションの有無に関係なく適用できるが、1 次元的な系に大変強力な方法であるものの、高次元系に対する有効な処方箋は今のところ見つかっていない。1 次元についても開放端境界条件の下での計算が基本となっていて、高精度の結果を得るには端の効果をもどのように処理するかが課題となる。一方で、数値対角化法は、これらの中で最も古くから使われている方法ながら、フラストレーションの有無や系の形状に依らずに計算が可能であることが大きな利点である。取り扱える範囲の大きさの系であれば、統計誤差のない、非常に高精度な結果を得ることが出来る。唯一の短所は、取り扱える系の大きさが非常に小さいものに限られることである。その短所を何らかの方法で少しでも克服し、過去に行われていない大きさの系の計算が出来れば、新たな知見を得ること

が期待される。その克服の手段として、近年のスーパーコンピュータの特徴を活かした並列計算を行う方向性が考えられ、我々は、そのような並列計算を行う数値対角化法のプログラムを独自に開発してきた。

ランチョス法に基づく数値対角化では、ベクトルに対してハミルトニアン行列を繰り返し作用させながら、3重対角行列を作る計算を行うが、ベクトルに行列を作用させる手続きが高コストの中心部分である。この計算を行うには、行列の次元に対応する長さを持つベクトルを数本、コンピュータのメモリに格納することが必要となる。ハミルトニアンが記述する系の大きさ（スピンの数： N ）が小さいうちは、行列次元がそれほど大きくないので問題ないが、 N の増加に対して指数関数的に行列次元が増大するため、あっという間に利用可能なコンピュータの資源量を超えてしまう。このような困難を少しでも解消する方法の一つに、MPIを用いて計算を並列化し、各計算ノードが有するメモリに分散してベクトルを格納（それによって単一ノード使用時には使えない大きさの実メモリを複数ノードで同時に使用）することが考えられる。あるノードでの計算には、他のノードのメモリ上にあるデータを使って計算しなければならない状況が発生するが、通信コストの増大を抑えるバタフライ型のノード間データ転送を行うことで、これを実現することが出来る。これを実現した並列プログラムを我々は独自に開発し、京コンピュータを含む様々なスーパーコンピュータで有効に実行できることを確認している。物性研究に寄与する成果も複数の論文で報告してきた[10-18]。

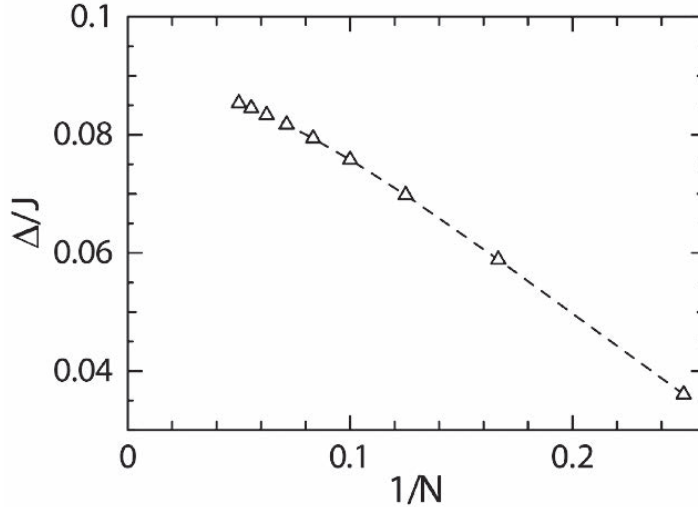
今回の大規模チャレンジジョブでは、 $N=20$ の $S=2$ スピン系が最大規模の計算となった。これまでの $S=2$ スピン系に対する数値対角化法による研究報告では、1次元系のハルデンギャップの精密評価に関する研究で $N=16$ の報告事例[5]があり、著者が知る限り、これが最大であった。行列次元の具体的な数字としては、 $N=20$ の系の $M=0$ の部分空間の次元が5,966,636,799,745である。著者が知る限り、これだけ大きな行列次元の固有値計算が実現したという報告はない。

今回の大規模チャレンジで計算した $N=20$ の $S=2$ スピンのジョブは、15,625 ($=5^6$)個のプロセスから成り、上述の巨大行列次元の配列を各プロセスが分担して格納する。分割は完全均一ではなくヘテロな分割となっているが、ほぼ均一に近い状況となっていて、分担のうち一番大きなものは454,805,755である。これらのプロセスを8,192ノードに投入した。すなわち、一つのノードに最大2個のプロセスが乗った形になっている。各々のプロセスには136のスレッドを設定し、実コアの4倍に相当するハイパースレッディングの形で実行した。

4. 数値計算の結果

4-1. 有限系のギャップ値のシステムサイズ依存性

まずは、 $S=2$ ハイゼンベルク反強磁性1次元鎖について、スピン数 N の有限系に対する基底状態と第一励起状態のエネルギー差 Δ を見てみよう。結果は第1図でプロットした。この図の中の左側の2点を除くデータは論文[5]で報告されていたもので、この左側2点のデータが新たに得られたものである。数値データ自体も論文[19]に載せているので、数値自体が必要な場合は論文[19]を参照して戴きたい。捻り境界条件の下での結果のため、スピン数が大きくなると Δ の値は徐々に大きくなる。この挙動から、 Δ/J の値はそれほど大きな値ではないものの、 N が ∞ の極限でゼロに向かうものでないことが明瞭となっている。



第1図： $S=2$ ハイゼンベルク反強磁性1次元鎖の基底状態と第一励起状態のエネルギー差。数値的厳密対角化法で各々の固有エネルギーを捨り境界条件の下で計算し、その差をプロットした。

4-2. 収束加速法による外挿

物理的に関心があるのは、 $N \rightarrow \infty$ となる、いわゆる熱力学極限での様子である。この熱力学極限におけるエネルギーギャップの値を、有限サイズの場合に得られたエネルギーギャップ値から知るには、「外挿」と呼ばれる手続きが必要となる。今回、この外挿の方法として、数列の収束加速の方法を実行する。収束加速の具体的な手続きには様々なやり方があり、本研究ではWynnの ϵ アルゴリズム[20]と呼ばれるものを採用した。このアルゴリズムは、数列 $A_N^{(0)}$ から出発して $A_N^{(k-1)}$ と $A_N^{(k)}$ が分かっていたら、収束が加速された形の $A_N^{(k+1)}$ を得ることができる方法で、式としては、

$$\frac{1}{A_N^{(k+1)} - A_{N-2}^{(k)}} = \frac{1}{A_{N-4}^{(k)} - A_{N-2}^{(k)}} + \frac{1}{A_N^{(k)} - A_{N-2}^{(k)}} - \frac{1}{A_{N-4}^{(k-1)} - A_{N-2}^{(k-1)}}$$

で与えられる。ただし、 $A_N^{(-1)} = \infty$ とする。収束が適切に加速されたかどうかの状況は、以下で定義する decay length $\xi_N^{(k)}$ によって調べることが出来る。

$$\xi_N^{(k)} = 2 / \log \left(\frac{A_{N-4}^{(k)} - A_{N-2}^{(k)}}{A_{N-2}^{(k)} - A_N^{(k)}} \right)$$

すなわち、収束加速が適切に出来ているかどうかは、 $\xi_N^{(k+1)} < \xi_N^{(k)}$ という挙動を確認できるかどうかで判断することが出来る。それが適切に確認できている場合に、収束する数列で単調増加の性質を持つ $A_N^{(k)}$ に対して $T_N = A_N^{(k)}$ 、 $S_N = A_N^{(k-1)}$ となるように設定した T_N と S_N を使って定義した

$$B_{N+1}^{(k)} = \frac{T_N S_{N+2} - T_{N+2} S_N}{S_{N+2} - S_N - T_{N+2} + T_N}$$

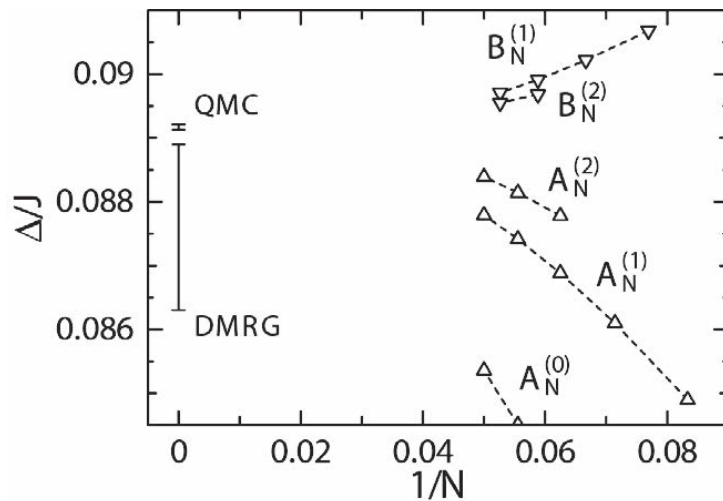
という数列 $B_N^{(k)}$ を新たに考える。この新たな数列 $B_N^{(k)}$ は、 $A_N^{(k)}$ とは反対の側から収束値に向かうことが分かっている。この特徴を活かして、収束値に対する誤差評価が可能となる。

4-3. ハルデンギャップの評価

第1図で見たデータ列を、4-2で説明した Wynn の ϵ アルゴリズムで収束加速することで、熱力学極限への外挿を試みた。結果は第2図で示した。第2図での $A_N^{(0)}$ は、第1図で示したデータと同じものである。 $A_N^{(1)}$ と $A_N^{(2)}$ が、 $A_N^{(0)}$ と同じでそれぞれ下から近づくデータ列であり、 k が大きくなるほど、収束値に対する、より良い下限となっていることがわかる。一方、 $B_N^{(k)}$ は、 $A_N^{(k)}$ とは反対の側から収束値に向かう様子がはっきりとわかる。したがって、 $B_N^{(1)}$ と $B_N^{(2)}$ が共に、収束値に対する適切な上限となっているといえる。我々は、これらの結果を元に、最終的な収束値が $A_{20}^{(2)}$ と $B_{19}^{(2)}$ の間にあると結論し、今回の評価値として

$$\Delta/J = 0.0890 \pm 0.0007$$

を導いた。論文[6]の評価値は、 $\Delta/J = 0.0876 \pm 0.0013$ であり、互いの誤差の範囲には合致する部分もあるものの、互いの中心値は他方の誤差の範囲内にはない。一方、論文[4]の評価値 $\Delta/J = 0.08917 \pm 0.00004$ と論文[7]の評価値 $\Delta/J = 0.0891623 \pm 0.0000009$ は、誤差の範囲自体が、我々の評価値の誤差の範囲に完全に含まれている。合致する誤差の範囲が残る以上、論文[6]の評価値に真の値が含まれていないと完全に断言することはできないものの、今回の評価値は、論文[4]と論文[7]の結果を強く支持しているといつてよいだろう。



第2図：有限系エネルギー差の収束加速による解析。

$A_N^{(k)}$ は収束値に対する下限、 $B_N^{(k)}$ は上限を与える。 $1/N=0$ の位置で示したデータは、密度行列繰り込み群法 (DMRG) による結果[6]と量子モンテカルロ法 (QMC) による結果[4]である。

5. まとめと展望

我々は、 $S=2$ ハイゼンベルク反強磁性体次元鎖について数値対角化計算を行い、基底状態のすぐ上を開いている、いわゆるハルデンギャップを調べた。スピン数 $N=20$ の有限系の計算

を Oakforest-PACS における大規模チャレンジのジョブで計算に成功した。この結果を含む、有限系のデータ列を収束加速の解析を行い、数値対角化計算に基づく高精度の評価値を与えて、過去に報告された他の方法による評価値の違いを議論した。

我々が大規模チャレンジで実現した行列次元の大きさは、5兆を超える巨大な次元数である。このサイズの配列数本を、一つの計算ジョブの中で取り扱う計算であり、非常に大きなメモリ空間を必要とする。すなわち、コンピュータシステムがノードごとに分散して持つメモリのかなりの部分を一度に使うことになる。そのような規模であっても、固有値計算が成功裏に実施できることが実証された。このような固有値計算は、計算内容自体はオーソドックスなものであるが、様々な新規なアルゴリズムの成果を適切に検証する際にも有効な情報となるもので、計算実現の可能性がある限り、今後も継続していく必要のある課題といえるだろう。磁性という物性科学の分野だけを見ても、特にフラストレートを含む高次元の格子系を調べるためには、数値対角化という固有値計算が今なお信頼性と汎用性の高い計算手法であることが広く認識されている。より大きなシステムサイズの計算が可能となってきたことで、見逃されてきた、より精密な知見を今後も提供し続けることが強く期待される。

謝辞

本研究は、科学研究費助成事業学術研究助成基金助成金（基盤（C）16K05418，基盤（C）16K05419）及び文部科学省科学研究費補助金（新学術領域研究（研究領域提案型）16H01080）の支援を受けました。東京大学情報基盤センターのスーパーコンピュータ Oakforest-PACS の大規模チャレンジジョブとして実行した大規模数値計算に加えて、Oakforest-PACS は、HPCI システム利用研究課題の「京」を除く HPCI システム一般課題 hp170207 および hp180053 によって計算資源の提供を受けて利用しました。数値計算の一部は、東京大学物性研究所および自然科学研究機構核融合科学研究所のスーパーコンピュータの共同利用によって得られたものです。

参考文献

- [1] F. D. Haldane, Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).
- [2] F. D. Haldane, Phys. Lett. **93A**, 464 (1983).
- [3] S. R. White and D. A. Huse, Phys. Rev. B **48**, 3844 (1993).
- [4] S. Todo, and K. Kato, Phys. Rev. Lett. **87**, 047203 (2001).
- [5] H. Nakano and A. Terai, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 014003 (2009).
- [6] X. Wang, S. Qin, and L. Yu, Phys. Rev. B **60**, 14529 (1999).
- [7] H. Ueda and K. Kusakabe, Phys. Rev. B **84**, 054446 (2011).
- [8] S. Shinozaki, A. Okutani, D. Yoshizawa, T. Kida, T. Takeuchi, S. Yamamoto, O. N. Risset, D. R. Talham, M. W. Meisel, and M. Hagiwara, Phys. Rev. B, **93**, 014407 (2016).
- [9] Y. Iwasaki, T. Kida, M. Hagiwara, T. Kawakami, Y. Hosokoshi, Y. Tamekuni, and H. Yamaguchi, Phys. Rev. B, **97**, 085113 (2018).
- [10] H. Nakano and T. Sakai, J. Phys. Soc. Jpn. **80**, 053704 (2011).
- [11] H. Nakano, S. Todo, and T. Sakai, J. Phys. Soc. Jpn. **82**, 043715 (2013).
- [12] H. Nakano and T. Sakai, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 104710 (2014).

- [13] H. Nakano and T. Sakai, J. Phys. Soc. Jpn. **84**, 063705 (2015).
- [14] H. Nakano, Y. Hasegawa, and T. Sakai, J. Phys. Soc. Jpn. **84**, 114703 (2015).
- [15] H. Nakano and T. Sakai, J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 063702 (2017).
- [16] H. Nakano and T. Sakai, J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 114705 (2017).
- [17] H. Nakano and T. Sakai, J. Phys. Soc. Jpn. **87**, 063706 (2018).
- [18] Y. Hasegawa, H. Nakano, and T. Sakai, Phys. Rev. B **98**, 014404 (2018).
- [19] H. Nakano and T. Sakai, J. Phys. Soc. Jpn. **87**, 105002 (2018).
- [20] P. Wynn, Numer. Math. **8**, 264 (1966).