

# 大規模疎行列固有値問題に対する数値対角化並列プログラムの高度化

## Development of a numerical-diagonalization parallel program for the eigenvalue problems of large-scale sparse matrices

中野博生  
兵庫県立大学

### 1. 研究目的

固有値問題は様々な科学技術計算に現れる一般的な問題形式である。科学的な重要性の高い状況では、表現行列の次元が極めて大きくなることがある。このような場合に対して、現代では、コンピュータを用いて数値的に対角化することが広く行われている。とはいえ、コンピュータを使うとしても、取り扱える行列次元の大きさには利用するコンピュータに応じた限界がある。利用するコンピュータの性能をできるだけ有効に使い、行列次元が大きい事例の固有値計算が可能となる場合、それを基盤とした科学研究に多大な貢献をもたらす。本研究グループでは、量子力学の基礎方程式であるシュレーディンガー方程式を行列形式で表現し、固有値問題として解くことで磁性の研究を推進している。富岳で効果的な大規模並列計算を実現し、様々な成果をあげてきた。本研究は、富岳で活用したハイブリッド並列(MPI プロセス並列+CPU ベース・スレッド並列)プログラムのプログラムに対して、FugakuNext を見据えて、GPU をアクセラレータとして活用する GPGPU 化を推進し、より高度なスレッド並列で計算を加速化させることを目的としている。

### 2. 研究成果の内容

富岳で良好な並列スケールングの実績を有する本研究グループのプログラムは、ランチョス法に基づく固有値計算を行う。MPI プロセス並列とノード内 CPU コアを使う OpenMP によるスレッド並列を組み合わせたハイブリッド並列を実現している。OpenMP の directive を OpenACC の directive に置き換え、必要な GPU-CPU 間のデータ通信を指示する OpenACC の directive を追加することで、スレッド並列部分を GPU 側で計算できる形にプログラムを更新した。その結果、計算が可能なメモリを確保できる最低限度のノード数同士のジョブと比較して、富岳で実行するよりも短時間で計算結果が得られることを実証した。

本プログラムを活用して、磁性研究として、主に 2 個の研究課題に取り組んだ。一つは、2016 年ノーベル物理学賞の受賞対象課題として知られているハルデンギャップ問題である[1]。整数スピンの 1 次元ハイゼンベルク反強磁性体では、シングレット基底状態のすぐ上にギャップが開いたスピン励起となるというハルデン予想まで、半奇

整数の場合と同等でギャップレスのスピンの励起と見なされていた。ハルデン予想以降、多くの研究でその予想を裏付けられているが、スピン  $S$  が大きい場合の知見は計算が難しいことで限定的であった。本研究グループでは、2025 年度に  $S=7$  の場合のハルデンギャップの数値的評価を実現した。もう一つの研究課題は、シャストリー・サザーランド格子上的ハイゼンベルク反強磁性体の量子相転移の解明である[2]。この系は正方格子を構成する相互作用( $J_2$ )と直交ダイマー相互作用( $J_1$ )から成り、相互作用比  $J_2/J_1$  が小さい場合にダイマー状態が厳密な基底状態として実現することが知られていた。良い候補物質  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$  の挙動解明を中心に  $S=1/2$  の場合が精力的に研究されてきたが、スピンが大きくなった場合の挙動は十分には解明されていなかった。本研究グループでは 2024 年度までに  $S=1$  と  $3/2$  の場合のダイマー相の端および、 $J_2/J_1$  が大きい領域で広がっているネール秩序相の端に対応する相互作用比を明らかにしてきた。2025 年度には、 $S=2$  の場合についても、ダイマー相とネール秩序相の端の相互作用比を見積もり、二つの相互作用比の  $S$  依存性の系統的な挙動を明らかにした。

両課題の成果は、量子磁性研究の基礎的な知見として、今後の研究の基盤となる情報となった。

### 3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

Pegasus や Miyabi-G 以前の GPU スパコンでは、GPU 側のメモリが(CPU 側に比べて)大幅に少なく、CPU で行ってきた計算を GPU 側で実行すること自体が困難であった。Pegasus や Miyabi-G では、GPU 側のメモリが CPU 側と比べて遜色ないレベルに実装されていることで、ようやく現実的な計算を GPU で行うことの可能な環境となった。この環境を生かすことで、本研究課題の対象となる固有値計算を GPU の効果的活用により計算を実現できる基盤が整えることが出来たという点で、学際共同利用プログラムが果たした意義が大きい。

### 4. 今後の展望

今後、期待される具体的な進展として 2 つの点が挙げられる。一つ目は、OpenACC の形を継続する中での改善点で、GPU-CPU 間のデータ通信に関する、より効率的な形に更新できるかどうか、ということである。もう一つは、ユニファイドメモリ技術を活用することで、GPU 側メモリと CPU 側メモリを一体として実行する計算を効率的に出来る形にしていく更新である。今年度の成果を土台として今後の進展を適切に進めて行く基盤整備を進めることで、FugakuNext における更なる発展が大いに期待できる。

### 5. 成果発表

(1) 学術論文

[1] **H. Nakano** and T. Sakai, “The Haldane Gap of the S=7 Antiferromagnetic Chain”, J. Low Temp. Phys. **222**, 69 (2026).

[2] **H. Nakano**, T. Sakai, and Y. Hosokoshi, “Numerical Diagonalization Study of the Phase Boundaries of the S=2 Heisenberg Antiferromagnet on the Orthogonal Dimer Lattice” J. Phys. Soc. Jpn. **95**, 033704 (2026).

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース※		
		当初配分	移行*	一般利用による追加
Pegasus	○	14400		0
Miyabi-G	○	40500	0	0
Miyabi-C				
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。 *バジェット移行を行った場合、「+2000」「-1000」のように記入				