

# 大規模並列密度行列繰り込み群法のGPU化

理化学研究所 計算科学研究センター 曾田 繁利

目的 多次元の量子多体系の計算に対応した大規模並列密度行列繰り込み群法プログラム「paraDMRG」のGPU化を行い、より広範な大規模計算機での実行を可能にすることを目的とする。

内容 本研究では大規模並列密度行列繰り込み群法プログラム「paraDMRG」のGPU化を行った。NVIDIA社の協力のもと、特に計算量の大きい状態計算部分のGPU化を行い、計算時間の測定を行った。

結果 計算時間の測定は一次元 $S=1/2$  Heisenbergモデルの基底状態計算について行った。本研究のGPU化により得られた結果を図に示す。CPU(Xeon Gold 6129)と比較して計算時間の短縮が確認される。

利用した計算機  
ノード時間

OCTOPUS  
4,600時間

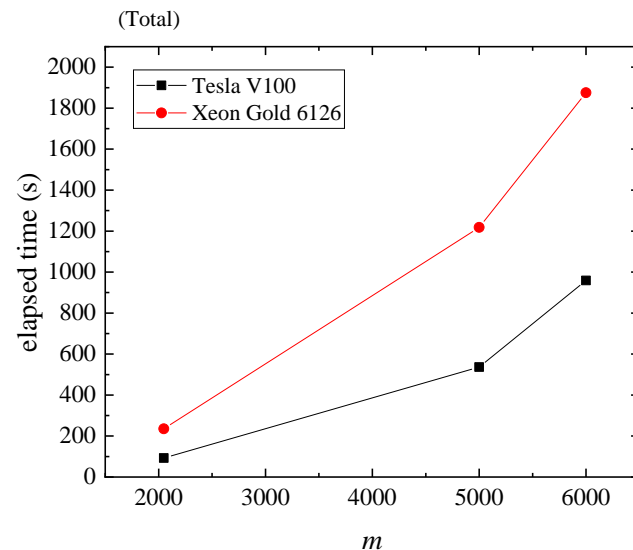


図 計算時間の比較( $m$ : 密度行列繰り込み群法の打ち切り次数)