

## TSUBAME 共同利用 平成 23 年度 学術利用 成果報告書

利用課題名 TSUBAME2 GPU によるスピン系のクラスターアルゴリズム・モンテカルロシミュレーション  
 英文: Cluster algorithm Monte Carlo simulations of spin systems using TSUBAME2 GPU

利用課題責任者 岡部 豊  
 First name Surname Yutaka Okabe

所属 首都大学東京理工学研究科  
 Affiliation Graduate School of Science and Engineering, Tokyo Metropolitan University

## 邦文抄録(300 字程度)

物質内の相転移現象を解析するモデルとして、格子スピンモデルがある。格子スピンモデルの解析にはよくマルコフ連鎖モンテカルロ法が用いられており、今日までに多くのマルコフ連鎖モンテカルロ法が提案されている。近年、GPU による計算の高速化が多くの分野で注目されている。本プロジェクトではマルコフ連鎖モンテカルロ法の一つ、Swendsen-Wang (SW) マルチクラスターアルゴリズムの複数の GPU を使ったアルゴリズムの開発を行う。TSUBAME2.0 上で開発したプログラムを性能を評価し、 $q=2$  状態ポッツモデルの転移温度上で全格子サイズが  $65536 \times 65536$  の場合で 1 スピンフリップ当たり 0.117 nano sec の計算速度を実現した。

## 英文抄録(100 words 程度)

The classical spin model is one model for understanding mechanisms of phase transition. The classical spin model is often analyzed by using a Markov Chain Monte Carlo simulation, and many algorithms for Markov Chain Monte Carlo simulation have been proposed. In this paper we realize the GPU computation of the Swendsen-Wang multi-cluster algorithm for multiple GPUs extending our algorithm for single GPU computing [Comp. Phys. Comm. 183 (2012) 1155]. The calculation time on Tesla M2050 using 256 GPUs is obtained as 0.117 nano sec per a spin flip for the  $q=2$  Potts model (Ising model) at the critical temperature with the linear system size  $L=65536$ .

*Keywords:* GPU, Monte Carlo method, cluster algorithm, spin systems, Potts model

## 背景と目的

多体系の物理的性質を理解するためにモンテカルロ法が標準的な手法として広く用いられているが、シングルスピンフリップのモンテカルロ法には転移温度付近で緩和時間が急激に大きくなる問題があり、これを解消する一つの手法としてクラスターアルゴリズムが提唱されている。しかし、クラスターアルゴリズムの大規模な計算には様々な問題があり、今までの報告ではクラスターアルゴリズムは大規模化な並列計算に適していないとされていた。本プロジェクトでは、格子スピンモデルに対し、複数の GPU を使った大規模なクラスターアルゴリズム・モンテカルロシミュレーションを開発し、クラスターアルゴリズムの大規模化の基礎の確立と計算の高速化の2つを目的とする。

## 概要

多体系の熱的な性質を理解するモデルとして、格子

スピンモデルがある。格子スピンモデルは物質内の磁気的性質を簡単なモデルで表し、磁気的性質の熱的な挙動、特に相転移温度付近での振る舞いを調べるために使われる。しかし、格子スピンモデルの熱的性質を調べるためには熱平均の計算が必要である。直接熱平均を計算する場合、その計算量は一番簡単なイジングモデルでも<sup>2</sup>格子サイズとなり、莫大な量の計算が必要となる。そのため、格子スピンモデルの解析では標準的な手法としてマルコフ連鎖モンテカルロ法が使われる。特にメトロポリス法[1]などのシングルスピンフリップのモンテカルロ法は柔軟性が高く、様々な系で用いられている。しかし、シングルスピンフリップのモンテカルロ法には相転移温度付近で緩和時間がサイズに対して指数関数的に大きくなる問題があった。この問題を解消する一つの手法としてクラスターアルゴリズム[2,3]が提唱された。クラスターアルゴリズムはこの緩和時間の影響を劇的に改善させることに成功した。しかし、今まで

クラスターアルゴリズムは大規模な並列計算に適していないとされていた[4]。

近年、GPUを用いた計算の高速化が研究され、シングルスピントリフリップ法に関しては、数十倍の加速が報告されているが、クラスターアルゴリズムへの GPU の利用は始まったばかりである。申請者のグループは、1個の GPU を用いたスピントリフリップ系のクラスターアルゴリズムの研究を既に報告した[5]。クラスターアルゴリズムの大規模計算は台数効果が得られず困難と考えられてきたが、本研究では1個の GPU の計算を MPI 並列により複数の GPU の計算に拡張し、種々の工夫を加えることにより、台数効果が高い計算を実現する。

### 結果および考察

q 状態ポッツモデルのハミルトニアンを以下に示す。

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\delta_{S_i S_j} - 1), \quad S_i = 0, 1, \dots, q-1$$

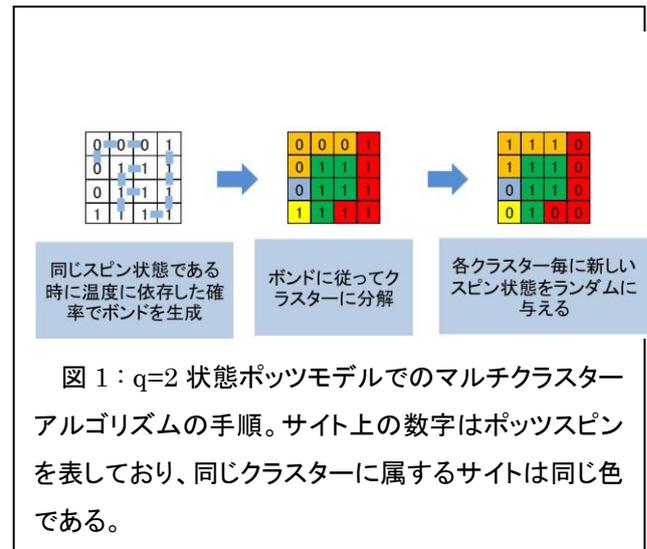
ここで  $S_i$  はサイト  $i$  でのポッツスピンを表し、0 から  $q-1$  までの値をとる。 $\delta$  はクロネッカーのデルタであり、和は全ての最近接格子で行う。格子としては正方格子を考え、周期的境界条件をとる。

本プロジェクトで高速化するクラスターアルゴリズムは Swendsen-Wang (SW) マルチクラスターアルゴリズムである[2]。SW マルチクラスターアルゴリズムは以下の3つの手順からなっている。

- (1) 最近接サイトとのボンド接続の有無
- (2) ボンド情報に従ってクラスターに分解
- (3) 各クラスター毎にスピントリフリップ

q 状態ポッツモデルでの 1 モンテカルロステップの手順を図 1 に示す。申請者のグループは、1個の GPU を用いた SW マルチクラスターアルゴリズムの研究を既に報告した。しかし、1 個の GPU の計算は共有メモリ型の計算であるため、マルチ GPU のような分散メモリ型の計算への適用の際には工夫が必要となる。また、参考文献[4]の計算は共有メモリ型のコンピュータを用いて計算されているため、そちらの手法も適用出来ない。

(1)の計算は 1GPU での計算方法を直接マルチ GPU の計算に適用できるが、(2)と(3)の計算は直接マルチ GPU のような分散メモリ型コンピュータでは適用出来ない。そのため、本プロジェクトではこの 2 つを

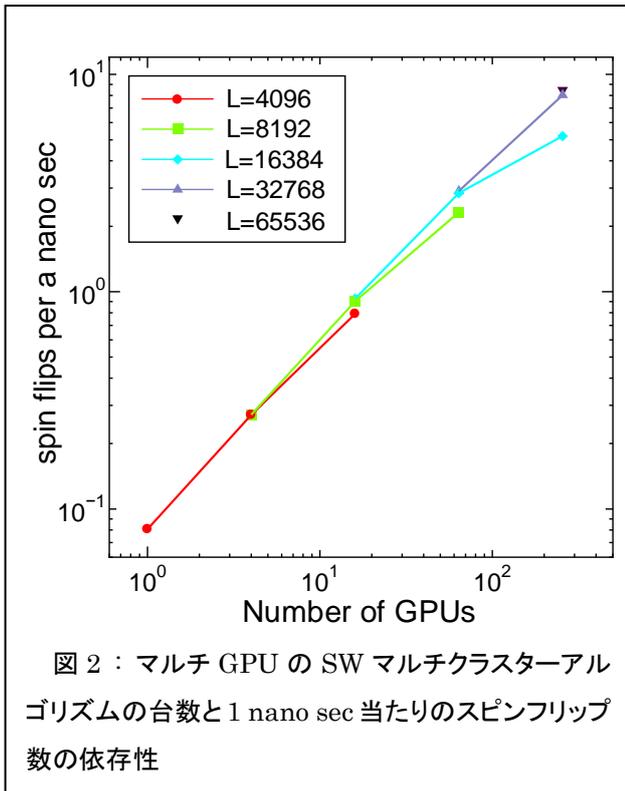


分散メモリ型コンピュータに適用させる方法を考案した。こちらの具体的な説明は投稿中の論文に記載している[6]。

本グループで作成したプログラムの q=2 状態ポッツモデルでの転移温度上の平均計算時間を表 1 に示す。表 1 では 1 スピントリフリップ当たりの計算時間を示しており、各 GPU 当たりの格子サイズを  $4096 \times 4096$  と固定し、GPU の個数を増やしている。表 1 より、GPU の個数が増えるに連れて計算の効率が上がっていることがわかる。ベストパフォーマンスは全格子サイズが  $65536 \times 65536$  の場合での 1 スピントリフリップ当たり 0.117 nano sec である。

全格子サイズ (GPU の個数)	1 スピントリフリップ当 たりの計算時間
4096 × 4096 (1GPU)	12.39 nano sec
8192 × 8192 (4GPU)	3.679 nano sec
16384 × 16384 (16GPU)	1.075 nano sec
24576 × 24576 (36GPU)	0.550 nano sec
32768 × 32768 (64GPU)	0.344 nano sec
49152 × 49152 (144GPU)	0.184 nano sec
65536 × 65536 (256GPU)	0.117 nano sec

表 1: q=2 状態ポッツモデルの転移温度上での 1 スピントリフリップ当たりの平均計算時間



strong scalability を議論するために全格子サイズを固定した場合の GPU 個数の依存性のグラフを図 2 に示す。図 2 は両対数グラフでプロットしており、縦軸は 1 nano sec 当たりのスピントリップ数、横軸は GPU の台数である。

以上より、本プロジェクトでは台数効果が高く、かつ複数の GPU を使うことでより計算速度の速いプログラムの開発に成功した。

#### まとめ、今後の課題

本プロジェクトではマルチ GPU を用いた SW マルチクラスターアルゴリズムの開発を行い、台数効果が高く、かつ GPU を使うことでより計算速度の速いプロトタイププログラムの開発に成功した。TSUBAME 2.0 上で開発したプログラムの性能を評価し、結果 256GPU で 0.117 nano sec の高速化を実現した。また、strong scalability の測定も行い、台数効果の高いプログラムであることも示した。

現段階ではプロトタイプの作成のみで、このプログラムはまだ改良の余地を残している。そのため、今後はこのプログラムを改良していくと共に、実際の問題への適用を行っていく。

なお、本研究は大学院生の小村幸浩君との共同研究である。

#### 参考文献

- [1] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, E. Teller, Equation of State Calculations by Fast Computing Machines, J. Chem. Phys. 21 (1953) 1087-1092.
- [2] R.H. Swendsen, J.S. Wang, Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations, Phys. Rev. Lett. 58 (1987) 86-88.
- [3] U. Wolff, Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems, Phys. Rev. Lett. 62 (1989) 361-364.
- [4] G. T. Barkema, T. MacFarland, Parallel simulation of the Ising model, Phys. Rev. E 50 (1994) 1623-1628.
- [5] Y. Komura, Y. Okabe, GPU-based Swendsen-Wang multi-cluster algorithm for the simulation of two-dimensional classical spin systems, Comp. Phys. Comm. 183 (2012) 1155-1161.
- [6] Y. Komura and Y. Okabe, Multi-GPU-based Swendsen-Wang multi-cluster algorithm for the simulation of two-dimensional q-state Potts model, submitted.