

## イジングモデル・スピングラス・プログラムの並列化

藤崎 正英\* , 奥田 基\* , 田子 精男\* ,  
富士通株式会社\* 第3システム統括部科学システム部

猪苗代 盛+ , 松原 史卓+  
東北大学+ 工学部応用物理学科

3次元イジングスピングラスモデルのモンテカルロシミュレーション・プログラムを富士通の並列計算機AP1000上で並列化した。本報告は、AP1000の概要とともにこの並列化手法及びその評価について述べる。対象の3次元格子は、AP1000の2次元アレイ構造のプロセッサに自然にマッピングすることができる。計算時間で最も支配的であるモンテカルロ・ループ内の計算処理は、60台で87%の並列化効率であった。

## The Monte Carlo Simulation of the Random Three dimensional Ising Model on Parallel Computer AP1000

Masahide Fujisaki \* , Motoi Okuda \* , Yoshio Tago \* ,  
Scientific Systems Department , Fujitsu Limited \*

Sakari Inawashiro + , Fumitaka Matsubara +  
Department of Applied Physics , Tohoku University +

This paper describes the parallelization of the Monte Carlo simulation program of the three dimensional(3D) Ising Spin Glass Model using the highly parallel computer AP1000 developed by FUJITSU. This paper also describes the outline of the AP1000. A 3D lattice is divided into sublattices which can be mapped onto a two dimensional processor array of the AP1000 naturally. The efficiency of the Monte Carlo loop part which is the most time consuming is 87% on the 60 cell system.

## はじめに

イジングモデルとは、格子上のスピン変数からなり各スピン変数が+1または-1の値を持ち、多くの場合最近接スピン対にのみ相互作用するという特徴を持つモデルである。強磁性イジングモデルは相転移等の協力現象を見せる最も簡単なモデルである。特に2次元の場合は、ワサガによって厳密解が得られている。ところが、3次元の場合は解析的に解くことはかなり困難なため、モンテカルロ法が3次元シミュレーションで最も信用できる方法の1つとして使用されている。モンテカルロ法は注意深く適用すれば有限なスピン系を正確に研究することはできるが、詳細に協力現象を研究するためにはスピン系を大きくする必要があり、即ち高性能計算機と巨大メモリが不可欠となる。現在までに、富士通のVPシリーズやNECのSXシリーズ[1, 2]といったベクトル計算機が使用されてきた。そして、今日の高並列計算機の出現がこのシミュレーションに対する並列計算機への適用研究を実現させた。

イジングモデルで強磁性と反強磁性のボンドがランダムに混在したスピン系はイジング・スピングラスモデルと呼ばれるが、本報告は、富士通の高並列計算機AP1000上で3次元イジング・スピングラスモデルのモンテカルロ・シミュレーション・プログラムの並列化とその評価について行う。

### 1. 高並列計算機 AP1000

AP1000 [3] は、分散メモリ型並列計算機であり、そのシステムは64台から最大1024台のマイクロプロセッサ・エレメント(以後セルと呼ぶ)と2次元トラスネットワーク(以後、Tネット)、放送用ネットワーク(以後、Bネット)、同期用ネットワーク(以後Sネット)の3種類の独立したネットワークから構成されている。AP1000の設計目標は、低遅延・高スループットの通信を提供することである。図1は、AP1000のシステム構成を示している。フロントエンドのワークステーションとして富士通のSファミリ4-330(Sun4/330)を使用している。各セルはTネットによって4つの隣接セルと結合し、全体として2次元のトラスネットワークを構成している。Tネットの各ポートは、毎秒25メガバイトの転送レートを持っている。全てのセルとホスト計算機はBネットによって結合されており、データ放送のように1対nの通信等に使用する。Bネットは、ハイパーキーな共通バスとリング構造のネットワークから構成されているが、論理的には1つの共通バスに見える。Bネットは、毎秒50メガバイトの転送レートを持っている。また、全てのセルとホスト計算機は図1の様にSネットによっても結合されている。Sネットは、木構造でその各ノードはANDゲートとバッファを持っている。各セルはピーク性能15MIPSの整数演算ユニット(IU)とピーク性能8.3MFLOPSの浮動小数点演算ユニット(FPU)と4つのカスタムVLSIと128キロバイトのキャッシュメモリと16メガバイトのダイナミックRAMから構成される。カスタムVLSIは、メッセージコントローラ(MSC)、ルーティングコントローラ(RTC)、Bネットインターフェース(BIF)、ダイナミックRAMのコントローラ(DRAMC)でLBUSと呼ぶ内部バスで結合されている。このLBUSは高速I/Oインターフェース、ディスクインターフェース、ベクトル演算機構そして拡張メモリ等の様々なハードウェアオプションのインストールを可能とする。

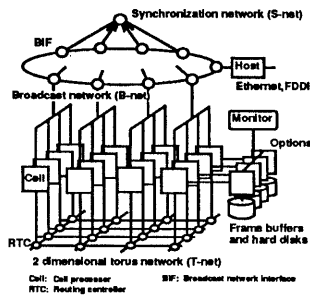


図1 AP1000システム構成図

## 2. 交流磁場のイジングスピングラスモデル

### 2.1 物理モデル

交流磁場中の3次元±Jスピングラスのモンテカルロ・シミュレーションを行った。交流磁場の振幅や温度点を変化させて3次元格子上のスピンの構成の時間変化を観察する。そして、幾つかの物理量例えば各周期での平均磁化、磁化率の正弦及び余弦成分とオーガパラメータが計算される。周期的境界条件を仮定し、スピン間には強磁性作用を示すボンドと反強磁性を示すボンドがランダムに混じり合っている。

### 2.2 シミュレーションでの適用手法

このイジングモデルのモンテカルロ・シミュレーションでは、特に以下の3つの技法を適用している。

#### (1) マルチスピンコーディング

イジングモデルでは、各スピン変数が独立に+1または、-1の値をとる。したがって、1ワードが32ビットの計算機を使用する場合、32個の系を1ワードにパックすることができる。この事で32個の系を同時に取り扱え、結果の物理量は32個の系の平均値としている[1, 4]。

#### (2) スピンフリップ法

このイジングモデルの場合、最近接のスピン対にのみ相互作用する。また、白黒チェッカーボード法を全体のスピン系に適用可能であり、白のスピン変数と黒のスピン変数を交互に回帰のない計算ができる。

#### (3) 乱数発生

乱数は、ボンドが強磁性か反強磁性を決定したり、スピンがフリップするかどうかを決定するために使用される。モンテカルロステップや交流磁場の振幅の種類、温度点の数が増加すると乱数を大量に使用することもあり、M系列(TLP法)を使用している[5, 6, 7]。

## 3. 並列化

イジングモデルのモンテカルロ・シミュレーションには、いくつかの並列アルゴリズムが提案されている[8]が、AP1000のアーキテクチャに最適であると考えられるスピン系の空間を各々に分割する方法を適用した。

### 3.1 データ分散

全体の3次元格子は、AP1000の2次元メッシュ構造のセル上にマッピングできるように副格子に分割する。等分割できない場合は、余りを各々に分散させるようにする。図2に9個の副格子に分割し、3×3の構成のセルにマッピングした例を示す。各副格子は、4つの最近接副格子と相互作用のためのデータ交換を考えると。このようなデータ分散が可能なのは、このイジングモデルのスピン相互作用の局所性によるものである。

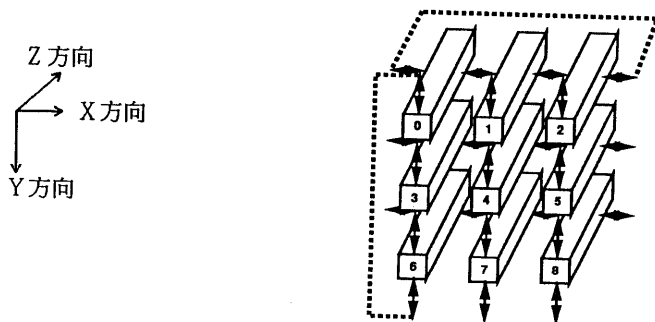


図2 3次元格子のデータ分散

### 3.2 並列化プログラムの処理フロー

並列化されたプログラムの処理フローを図3に示す。ボンドを設定するための乱数生成等の各セルでの初期処理及び最後のホストでの集計計算等以外の処理が並列化される。まずはじめに、1つのセルがホスト上のサルーチンCCREATによって生成され全てのセルに同じタスクがロードされる。初期設定値や乱数の初期値等がホスト上で計算され、サルーチンCBROAD1, CBROAD2, RANDOMHで全てのセルに放送される。これらの初期値を受け取ったセルでは、サルーチンSITESET, CELLで自分のセル内の格子点の番号付けを行う。これは、インデックスで最近接格子をインデックスで知るために行う。そして、自分のセル内の全てのボンドは、サルーチンBONDSET, CELLで乱数を使用して強磁性か反強磁性かを決定する。この設定は、全計算を通して変化しない。このため、隣接するセルにあるボンドのデータを相互に送受信し設定しておく。サルーチンRANDOMCでは、乱数が各セルで独立に生成される。この後、チェッカーボードの白いスピン変数、黒いスピン変数の順番で各セルでのデータ交換とスピントリップの計算が半分ずつ新しいスピン値を持って行われる。各セルでの結果として、各副格子での物理量が32サンプルの平均値としてサルーチンPHYSICAL, CELLで計算され、サルーチンCHSENDでホスト側に送信される。ホストでは、各セルでの物理量の結果を全セルを通して計算し、サルーチンOUTRSTで出力する。

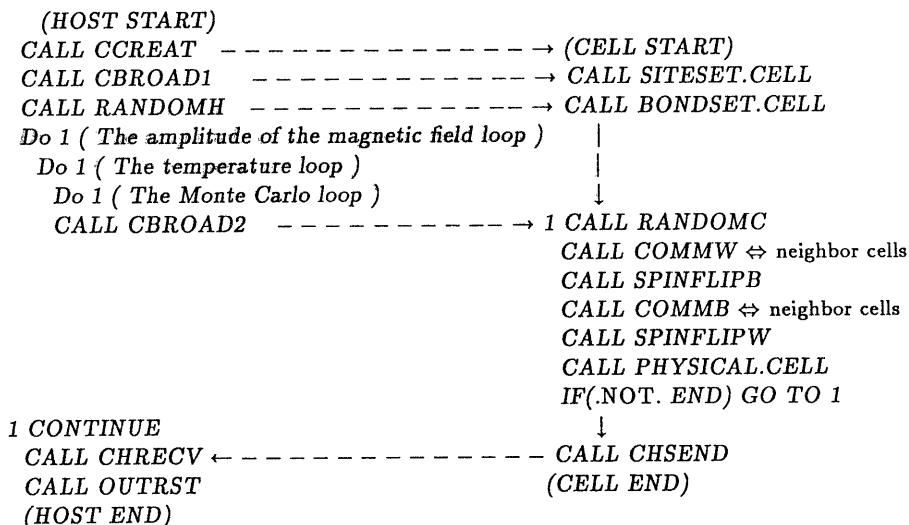


図3 並列化プログラムの処理フロー

### 3.3 通信

並列化されたプログラム内では、以下に示すようなAからDまでの4タイプの通信がある。

- (A) 初期値放送 (1) (ホスト→セル)  
ボンド設定のための乱数, DOLUPに関するパラメータ等がホストからセルへ送られる。
- (B) 初期値放送 (2) (ホスト→セル)  
モンテカルロのDOLUP内で変化するパラメータ, 乱数の初期値等がホストからセルへ送られる。
- (C) スピントリップのためのデータ交換 (セル↔セル)  
境界にあるスピンの値をセルとその隣接セル間で交換する。
- (D) 結果集計 (セル→ホスト)  
各セルで計算した結果を全セルで集計するためにセルからホストに転送する。

これらの通信の内、タイプAとDは最大でも300バイト程度であり、全計算の内1回しか実行されない。

一方、タイプ B と C は、乱数の初期値を除いて各モンテカルロ・ステップで毎回発生する。タイプ C のセル間通信は最も重要であるため、以下に詳細を説明する。3.1 節でも述べたように、各スピンは、その最近接のスピンのみに依存してその値を変更する。したがって、全ての副格子の境界条件はその最近接副格子によって決定される。図 2 中の矢印はその相互に依存した参照関係を示したもので、本手法では各副格子が各セルに対応するため、即ちセル間通信の方向を示している。また、全体の格子での境界は、周期的境界条件を使用しているため、図 2 の点線で示すように最も外側の副格子は図中の X、Y 方向のセル間通信を、その副格子に対応した反対側の副格子と行う。図 2 の Z 方向のデータ参照は同じセル内にデータを保有しているためセル間通信を行う必要はない。このセル間の通信量は、各セルで担当する X、Y、Z 方向の 1 辺の大きさ（スピン変数の数）をそれぞれ  $N_X$ 、 $N_Y$ 、 $N_Z$  とすると次式で定義される。

タイプ C の各セルでの総通信量 =  $N_Z \times (N_X + N_Y) \times$  総モンテカルロステップ実行回数  $\times$  8 バイト —— (式 1)  
 $N_Z$  及び総モンテカルロステップ数を一定とすると、総通信量は、 $N_X$  と  $N_Y$  の和に反比例し、同じセル構成であれば、モンテカルロステップ数に比例して大きくなることを示している。

#### 4. 結果

計測に使用した問題の条件を表 1 に示す。全体の格子サイズは  $30^3$  の系で 32 個のセルを同時に計算する。モンテカルロ・ステップ数は物理的に意味のある結果を得るには大きくする必要があり、実用的な問題では温度点は 50 点以上でかつ交流磁場の振幅を可変にして 15 点程度とっている。ここでは、AP1000 への適用性及び台数効果等の並列化による効果を観察するため問題 1 と 2 を使用した。物理的な出力結果としては、各周期での平均磁化、磁化率の正弦、余弦成分と  $\alpha$ -パラメータを出力する。この並列化プログラムの出力結果の妥当性については、問題 2 を 9 セルと 16 セルで実行した時の結果と並列化する以前のプログラム（以後単セル・プログラム）を富士通 S ファミリ上で実行した時の結果を比較して物理的に容認される範囲で一致していることを確認した。問題 1 の処理時間の計測結果を表 2 に示す。セル構成の X 方向と Y 方向の数は、全体の格子サイズで割り切れるように設定した。問題 1 で、計測に使用したセル台数構成を X 方向  $\times$  Y 方向とすると  $1 \times 2$ 、 $3 \times 5$ 、 $3 \times 10$ 、 $6 \times 10$  の 4 種類で行った。セル 1 台の場合はメモリが各セルで 16 Mバイトを越えるため計測できなかった。S ファミリ上で実行した単セル・プログラムの実行で最も支配的な処理時間比率を持つ部分はモンテカルロ・ループ内であるため、“モンテカルロ部分”として演算時間と通信時間に分けて示した。残りの各セルでの初期設定及び後処理部分は“その他”で示される。モンテカルロ部分及び合計処理時間の欄の括弧内は等号の左側が 2 セル実行時の速度を 1.0 倍とした時の比（以後、速度向上率）、右側が並列化効率である。並列化効率は（実際の速度向上率） $\div$ （線型の台数効果を達成された時の速度向上率） $\times 100\%$  で定義する。問題 1 におけるモンテカルロ部分と全処理の台数効果を図 4 に示す。全体合計処理時間での並列化効率は、表 2 のように 15 台程度までは 90% 以上で良いが、60 台では 71% にまで低下している。

表 1 計測する問題の条件

	問題 1	問題 2
モンテカルロ・ステップの合計数	200	15000
スピンフリップのみ行う初期モンテカルロ・ステップ数	5	5000
交流磁場の周期（振幅 1）	2	500
温度点数	1	1

表2 問題1の計測結果 (単位:秒)

セル構成	モンテカルロ部分			その他		合計処理時間
	演算	通信	小計	演算	通信	
2(1x2)	345.7(1.0倍=100%)	2.4	348.1(1.0倍=100%)	1.1	1.6	350.8(1.0倍=100%)
15(3x5)	46.0(7.5倍=100%)	1.6	47.6(7.3倍=97%)	0.8	1.4	49.8(7.0倍=93%)
30(3x10)	23.3(14.8倍=99%)	1.4	24.7(14.1倍=94%)	0.8	1.6	27.1(12.9倍=86%)
60(6x10)	12.2(28.3倍=94%)	1.2	13.4(26.0倍=87%)	1.6	1.4	16.4(21.4倍=71%)

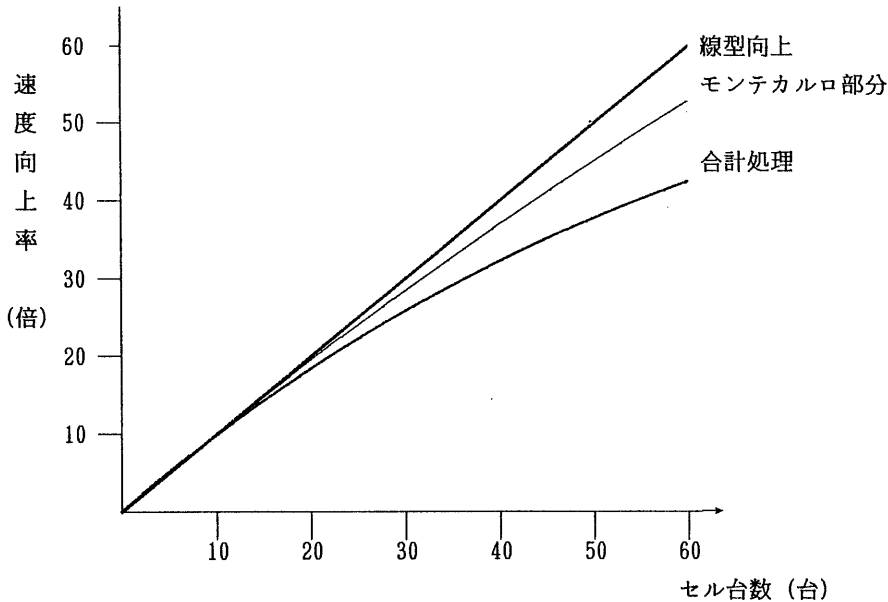


図4 問題1の台数効果

## 5. 評価面

本手法では、セル台数構成を格子が等分割できるように選択しているため各副格子の演算量は等価であり受信待ちのアイドル時間を含む通信時間と演算時間が合計処理時間にほぼ等しいため、モンテカルロ部分とその他の部分の演算時間及び通信時間について並列化効率の阻害原因について考察する。

### (1) 並列化効率の阻害原因

図5.1 にセル台数別のモンテカルロ部分とその他の部分の処理時間の内訳を示す。図5.1 で2セルでの実行時と60セルでの実行時を比べると、セル台数が増加した時にその他の部分の処理時間の絶対的な時間はほとんど変化していないが、合計処理時間との比率は18%にまで上昇し並列化効率の阻害原因になっている。しかし、実用的な問題 (モンテカルロ・ステップ15000, 温度点50, 磁場ループ15) では、モンテカルロ部分の処理時間が問題1の5万倍以上になることが予想され、その他の部分の処理時間は合計処理時間に対して相対的に小さくなるため、並列化効率低下への影響は少なくなると考えられる。

次に、モンテカルロ部分について演算時間と通信時間に分けて考察する。問題1についてセル台数別にモンテカルロ部分の演算時間と通信時間の比率を図5.2 に示す。図5.2 から、セル台数の増加に伴って通信時間の比率が上昇しているのがわかる。表2から演算時間は60セルまでほぼセル数に反比例して減少していく。しか

し、通信時間は、反比例よりゆるやかな減少を示している。これは3.3節の式1からも明らかのように、通信量が、各ノードの担当する副格子のX方向とY方向の1辺の大きさの和に反比例するためであると考えられる。これは、実用的な問題の実行時でも同様な傾向を示すと考えられる。

したがって、並列化効率の主な阻害原因はモンテカルロ部分の通信時間であると考えられる。

(2) まとめ

モンテカルロ部分の処理時間（演算時間と通信時間の和）は、60ノード実行時で並列化効率87%を示した。これは、主に格子サイズを等分割したことによって実際に負荷分散が均等になったためであると考えられる。計算時間は格子サイズの3乗、モンテカルロ・ステップ等に比例して大きくなるので、この台数効果は大きな問題サイズで向上すると考えられる。

しかし、その他の部分を合計した処理時間では、60ノード実行時で並列化効率71%となった。これは、問題サイズが小さいために逐次処理部分が相対的に大きいためと考えられる。

実用的な問題を100台以上の多数台で実行する場合では、モンテカルロ部分の通信時間の速度向上が必要であると予想される。また、この分野の問題を本手法で行う場合には、各副格子の計算量を低下させないためにノード台数の増加に伴って全体の格子数を増やした体系の計算を行う事が効果的であると考えられる。

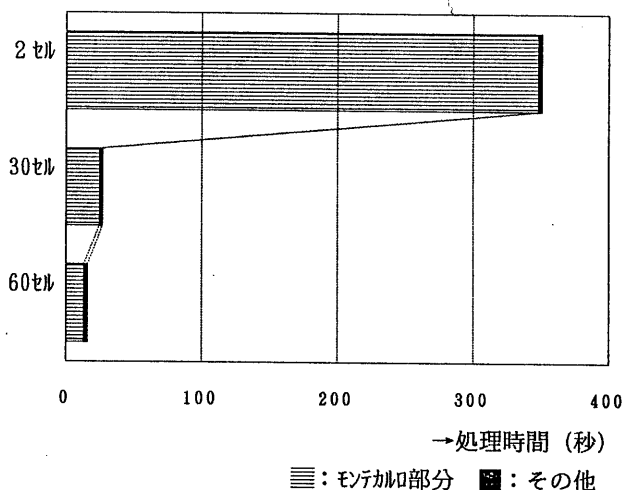


図5.1 モンテカルロ部分とその他の処理時間内訳

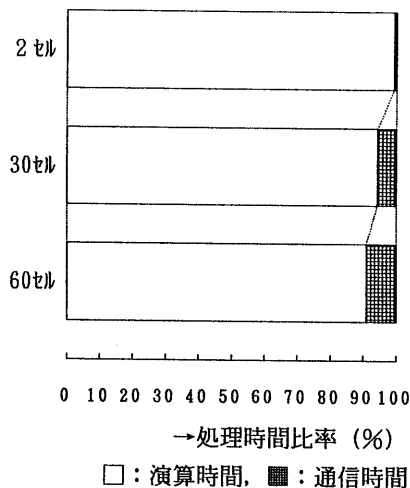


図5.2 モンテカルロ部分の演算時間と通信時間の比率

## 6. 結 語

3次元イジング・スピングラス・モデルのモンテカルロ・シミュレーションをAP1000上に格子を分割することによって容易にマッピングすることができた。計測は簡単な問題で60台まで計測し、逐次計算プログラムで支配的であったモンテカルロ・ループ内の処理の並列化効率は87%になった。

しかし、 $30^3$ 程度のスピン系を数百台以上の機で効率良く実行するためには、機間通信部分の速度向上が課題になる。計測した問題は、 $30^3$ のスピン系を使用した。格子を分割する本手法でモンテカルロ・ループ内の演算部分は効率良く負荷を分散できることから、共有メモリ型では実行が困難な格子サイズの大きい問題での性能が期待できる。また、この手法は量子色力学等の計算物理の分野にも応用可能であると考えられる。

## 謝 辞

貴重な物理的助言を頂いた東北大学工学部の白倉氏、伊与田氏、田森氏に感謝致します。また、乱数の並列化についての貴重な助言を頂いた広島大学の宮村助教授に感謝致します。

## 参 考 文 献

- [1] Masaki Suzuki, Takayuki Shirakura and Sakari Inawashiro, AC Susceptibilities and Relaxation Time Distributions in the 2D and 3D  $\pm J$  Ising Spin Glasses, *Journal of Physics, condens. matter*, 1991 in press.
- [2] Nobuyasu Ito and Yasumasa Kanada, An effective algorithm for the Monte Carlo simulation of the Ising model on a vector processor, *SUPERCOMPUTER*, Vol. 5 No. 3, 1988.
- [3] 石畑, 稲野, 堀江, 清水, 加藤, 高並列計算機C A P - II 構成とメモリシステム, 第1回SWoPP 計算機アーキテクチャ, P217-222, 1990年7月
- [4] Dieter W. Heermann and Anthony N. Burkitt, Parallelization of the Ising model and its performance evaluation, *Parallel computing* Vol. 13 No. 3, 1990 p345-357.
- [5] Lewis, T. G., and Payne, W. H. Generalized feedback shift register pseudorandom number algorithm, *J. ACM*, Vol. 20, No. 3, 1973, p456-478.
- [6] M. Fushimi and S. Tezuka, The k-distribution of Generalized Feedback Shift Register Pseudorandom Numbers, *Communication of ACM*, Vol. 26 July, 1983.
- [7] Herbert S. Bright and Richard L. Enison, Quasi Random Number Sequences from a Long-period TLP Generator with Remarks on Application to Cryptography, *ACM Computing Surveys*, Vol. 11 No. 4, 1979.
- [8] M. P. Harding, Monte Carlo Simulation of Ising Systems Using a Data Structure, *J. of Computational Physics*, 44, p227-242, 1981.