

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 29 年 5 月 26 日現在

機関番号：22604

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2016

課題番号：25400406

研究課題名(和文)GPUを用いた高速計算による相転移の研究

研究課題名(英文)High-performance computing of phase transitions using GPU

研究代表者

岡部 豊 (OKABE, Yutaka)

首都大学東京・理工学研究科・客員教授

研究者番号：60125515

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：新しいモンテカルロ法を用いて、主にスピン系の統計力学の問題に取り組んだが、Graphical Processing Unit (GPU) を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に応用するプログラム開発を行った。このプログラムを、ライブラリーとして登録し、一般公開した。GPUによるクラスターアルゴリズムの応用として、準結晶上のスピン系の相転移、パイロクロア格子上的強磁性スピンモデルの相転移を扱った。さらに、フラストレートした反強磁性系を希釈した場合の残留エントロピーをWang-Landau法を用いて論じ、また、レプリカ交換法を用いて、磁化曲線を議論した。

研究成果の概要(英文)：I developed parallel calculation of cluster-flip Monte Carlo algorithm using the Graphical Processing Unit (GPU). I enrolled the program of our group in the program library of Comp. Phys. Commun. for the convenience of other researchers. I applied the GPU algorithm of the cluster-flip Monte Carlo simulation to the problem of the phase transition of the spin models on the quasi-lattices, that is, the Penrose lattice and its dual lattice. I also applied the GPU algorithm to the problem of ferromagnetic spin models on the pyrochlore lattice. I also studied the frustrated antiferromagnetic systems on the pyrochlore lattice. Using the Wang-Landau method, which calculates the energy density of states directly, I studied the residual entropy of the diluted spin-ice models. Using the replica-exchange method for both the temperature and magnetic field, I investigated the magnetization curve of the diluted spin-ice problem.

研究分野：数物系科学

キーワード：モンテカルロ法 GPU クラスターフリップ法 フラストレーション イジングモデル 準結晶

## 1. 研究開始当初の背景

物性物理学の研究の発展において、研究対象の広がり、新しい複雑な現象の出現が顕著であり、種々の物質系が示す多様な物理現象を理解する上で、計算機シミュレーションの役割が一層増している。1980年代のCRAYや日本の計算機メーカーのベクトル型スーパーコンピュータ、1990年代に入り並列型計算機の発展、そして、最近の「京」に代表される巨大並列型計算機の出現など、計算機の発展が研究のブレイクスルーを引き起こしてきた。現在、計算機のユニットとして、GPU (Graphic Processing Unit)の科学計算への応用が急速に注目されている。研究代表者のグループは、モンテカルロ・シミュレーションのクラスターフリップ法において、GPUによる並列計算を実現してきた。さらに、相転移の分析手法として、エネルギー状態密度の微分から相転移の次数を決定する系統的な手法を確立するなど、方法的な発展に貢献してきた。

## 2. 研究の目的

以上のような背景のもと、本研究の目的は、GPUを用いた高速クラスターモンテカルロアルゴリズムにより、特にスピン系の問題について、従来の研究と比べて飛躍的に大きなサイズの系に対する高精度の計算を実行し、ランダム系、フラストレート系などを含む、困難な問題に取り組むことにある。

研究代表者は、画像処理に関して、画像領域分割の問題へのモンテカルロ法の適用の研究を行ってきたので、画像処理問題へのモンテカルロ法の適用を拡大すると共に、GPUの画像処理問題への応用を試みる。

## 3. 研究の方法

本研究では、GPUを用いた高速クラスターモンテカルロアルゴリズムを中心とした効率のよい計算手法を用いて、具体的に、様々なスピン系の相転移の問題に取り組んだ。計算手法について整理すると、次のような方法を用いた。

### (1) GPUを用いた高速クラスターモンテカルロアルゴリズム

研究代表者のグループが開発した、GPUによるクラスターアルゴリズムを、準結晶上のスピン系の相転移の問題と、パイロクロア格子上的強磁性スピンモデルの相転移の問題に適用した。

前者は、具体的に、ペンローズ格子上のイジングモデル、また、その双対格子上のイジングモデルの高精度計算を行った。後者は、スピナイスの問題と関連して興味を持たれているパイロクロア格子上的強磁性相互作用系のイジングモデル、XYモデル、ハイゼンベルグモデルの相転移の問題を扱った。

また、研究代表者のグループの開発した、GPUのプログラムは、Comp. Phys.

Commun. 誌のプログラムライブラリに登録し、広く研究者が利用できるようにした。このライブラリは、Ver.2 に更新した。

### (2) 複数パラメータに対するレプリカ交換法の応用

フラストレーションを生ずる反強磁性系について、磁場効果と希釈効果を調べたが、その際、複数の温度と磁場のレプリカ系のシミュレーションを同時に実行し、両方のパラメータに対するレプリカ交換を実行する方法を用いた。これにより、局所平衡にとらわれることを回避し、精度よく、磁場効果、希釈効果を論じることができた。

### (3) Wang-Landau法による全粒エントロピーの計算

フラストレーションのある系で興味のある、残留エントロピーについて、エネルギー状態密度を直接計算するWang-Landau法を用いて計算し、残留エントロピーの希釈度依存性を高精度に論じた。

### (4) 画像領域分割問題へのモンテカルロ法の適用

画像領域分割の問題について、Mumford-Shah エネルギーモデルに基づき考察してきた。従来の解法と異なり、問題をスピンモデルにマップし、複雑な非線形相互作用をもつスピンモデルの最小解をモンテカルロ法で探し出す方法を提案してきた。シミュレートッド・アニーリングの適用、ブロックスピン変換のアイデアを応用してきたが、局所平衡にとらわれてしまう場合があり、それを克服する手法を検討した。

## 4. 研究成果

### (1) 準結晶上のイジングモデルの相転移

GPUによるクラスターアルゴリズムの応用として、準結晶上のスピン系の相転移の問題を取り扱った。具体的には、ペンローズ格子上的イジングモデル、また、その双対格子上的イジングモデルの高精度計算を行った。これは、1988年に研究代表者のグループにより研究された問題であるが、当時の計算精度では、臨界温度の決定など、3桁精度程度であった。準格子上的イジングモデルについても、双対格子との間に、双対関係が成り立つことを強く示唆していたが、その精度は十分ではなかった。GPUを用いた並列計算により、20633239という非常に大きなサイズの系を扱うことができ、従来の計算に比べて、2桁精度の高い計算結果を得ることができた。その結果、双対関係も数値的に非常に高精度で示すことができたが、さらに、解析的な検証も行った。

図1に、ペンローズ格子上的イジングモデルのモーメント比の温度依存性を示してある。サイズの異なるデータの交点が転移温度を与える。

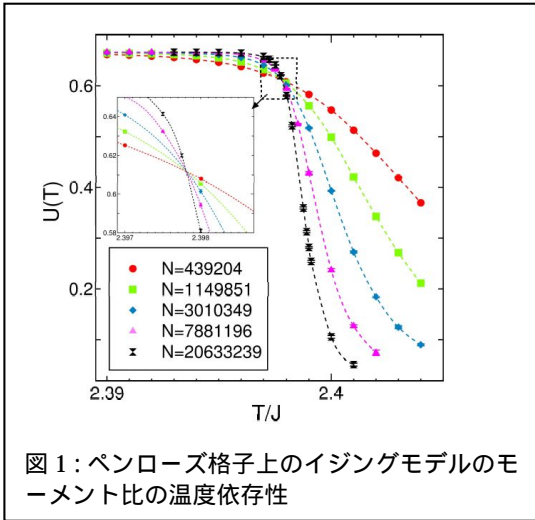


図 1: ペンローズ格子上のイジングモデルのモーメント比の温度依存性

### (2) パイロクロア格子上の強磁性スピンモデルの相転移

パイロクロア格子上の強磁性相互作用系の相転移を GPU を用いた高精度大型計算で論じた。具体的にパイロクロア格子上のイジングモデル、XY モデル、ハイゼンベルグモデルの相転移温度を精密に決定し、さらに立方格子上のモデルのデータと比較して、ユニバーサル有限サイズスケーリングが成立することを示した。計算は、我々のグループが開発した、GPU を用いたクラスターモンテカルロ法のアルゴリズムを用いて行った。

### (3) フラストレーションを生ずる反強磁性系における磁場効果と希釈効果

フラストレーションを生ずる反強磁性系について、磁場効果と希釈効果を論じた。具体的に、 $[111]$  方向の磁場をかけると、2つの磁化プラトーを示すことが知られていることに加え、磁気イオンを希釈すると、5つの磁化プラトーを示すことを明らかにした。計算手法としては、温度と磁場の2つのパラメータに関するレプリカ交換モンテカルロ法を用いた。図 2 に、 $[111]$  方向に磁場をかけたパイロクロア格子上の反強磁性イジン

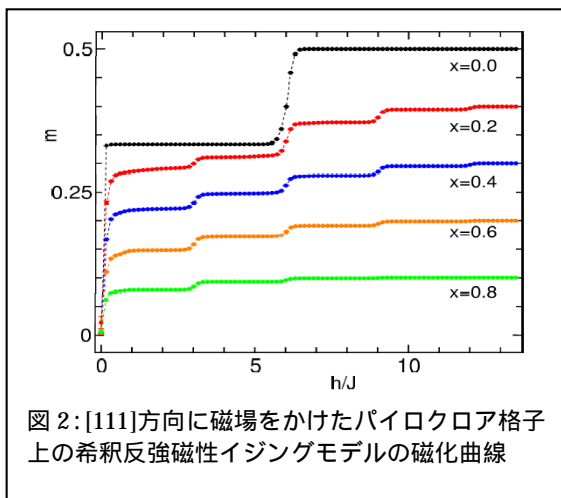


図 2:  $[111]$  方向に磁場をかけたパイロクロア格子上の希釈反強磁性イジングモデルの磁化曲線

グモデルの磁化曲線を示した。希釈系では、ステップ状に5つのプラトーが現れることを示している。5つのプラトーの出現の起源を、フラストレーションの基本構成要素である正四面体内のスピンの競争相係で説明できることを明らかにした。

### (4) 希釈フラストレート系における残留エントロピー

フラストレーションのある系では、残留エントロピーが興味ある問題である。Pauling により水の残留エントロピーの議論がなされたのは、1935 年である。エントロピーについて、エネルギー状態密度を直接計算する Wang-Landau 法を用いると、精度のよい計算をすることができる。パイロクロア格子上の希釈スピンアイス系の残留エントロピーを高精度で計算し、残留エントロピーの希釈度依存性を論じた。図 3 に、希釈度依存性の計算結果を示し、一般化された Pauling 近似の希釈度依存性と比較しているが、近似をよく再現することを示した。フラストレート系として、三角格子、カゴメ格子の場合との比較も行った。

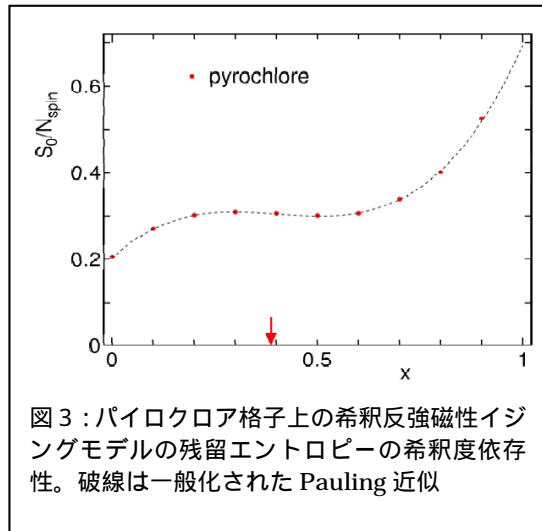


図 3: パイロクロア格子上の希釈反強磁性イジングモデルの残留エントロピーの希釈度依存性。破線は一般化された Pauling 近似

### (5) 画像領域分割問題への反復モンテカルロ法の提案

我々のグループが提案してきたモンテカルロ法による画像領域分割の解法、3次元医療画像に適用した際、局所平衡にとらわれてしまう場合があることがわかった。それを克服する方法として、グラフカット法で用いられる手法を参考にした、反復モンテカルロ法の提案を行った。最小エネルギー探索の手法として、グラムカット法と性能は同程度であるが、必要なメモリ数が小さく、大きな画像、領域分割の分割数が多い場合に、グラフカット法より優位であることを示した。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計9件)

- 1) A. Peretyatko, K. Nefedev, Y. Komura and Y. Okabe, "Interplay of dilution and magnetic field in the nearest-neighbor spin-ice model on the pyrochlore lattice", Phys. Rev. B 96 (2017) 14410 (5pp), 査読有
- 2) K. Soldatov, K. Nefedev, Y. Komura and Y. Okabe, "Large-scale calculation of ferromagnetic spin systems on the pyrochlore lattice", Phys. Lett. A 381 (2017) 707-712, 査読有
- 3) S. Sashida, Y. Okabe and H. K. Lee: Application of Monte Carlo simulation with block-spin transformation based on the Mumford-Shah segmentation model to three-dimensional biomedical images, Comp. Vis. Image Underst. 152 (2016) 176-189, 査読有
- 4) Y. Komura and Y. Okabe, "Improved CUDA programs for GPU computing of Swendsen-Wang multi-cluster spin flip algorithm: 2D and 3D Ising, Potts, and XY models", Comp. Phys. Commun. 200 (2016) 401-404, 査読有
- 5) Y. Komura and Y. Okabe, "High-Precision Monte Carlo Simulation of the Ising Models on the Penrose Lattice and the Dual Penrose Lattice", J. Phys. Soc. Jpn. 85 (2016) 044004 (5pp), 査読有
- 6) T. Surungan, Y. Komura and Y. Okabe, "Probing phase transition order of q-state Potts models using Wang-Landau algorithm", AIP Conference Proceedings 1617 (2014) 79-82, 査読有
- 7) Y. Komura and Y. Okabe, " CUDA programs for the GPU computing of the Swendsen-Wang multi-cluster spin flip algorithm: 2D and 3D Ising, Potts, and XY models", Comp. Phys. Commun. 185 (2014) 1038-1043, 査読有
- 8) S. Sashida, Y. Okabe and H. K. Lee: Comparison of multi-label graph cuts method and Monte Carlo simulation with block-spin transformation for the piecewise constant Mumford-Shah segmentation model, Comp. Vis. Image Underst. 119 (2014) 15-26, 査読有
- 9) Y. W. Koh, H. K. Lee and Y. Okabe, "Dynamically optimized Wang-Landau sampling with adaptive trial moves and modification factors ", Phys. Rev. E 88 (2013) 053302 (9pp), 査読有

[学会発表](計3件)

- 1) Y. Okabe: High performance computing for statistical physics, The 6th International Conference on Theoretical and Applied Physics, Makassar, Indonesia, 2016年9月
- 2) Y. Okabe: GPU-based computation of the Monte Carlo simulation of classical spin systems, Perspectives of GPU Computing in Physics and Astrophysics, Rome, Italy, 2014年9月
- 3) Y. Okabe: GPU-based computation with cluster spin flip algorithm for the simulation of classical spin systems, West-Lake International Workshop on Statistical Physics and Complex Systems, Hangzhou, China, 2013年11月

[図書](計0件)

[産業財産権]

出願状況(計0件)

取得状況(計0件)

[その他]  
ホームページ等

## 6. 研究組織

- (1)研究代表者  
岡部 豊 (OKABE, Yutaka)  
首都大学東京・理工学研究科・客員教授  
研究者番号: 60125515
- (2)研究分担者  
なし
- (3)連携研究者  
なし
- (4)研究協力者  
なし