

7C-5

SUPER-SPIN CODINGのベクトル化による高速モンテカルロ・シミュレーション

津田義典 森 正寿 中村 彰

長崎大学工学部

§1 はじめに

スピン系のシミュレーションでは、メモリ効率と処理速度向上の観点からスピンをメモリ上にいかに効率よく配置するかが検討されてきた。最近Williamsらの提出したSuper-spin Coding [1]はメモリのすべてのbitにスピンを対応させるという画期的なもので、従来主に使用されてきたMulti-spin Codingと比べてメモリ効率が4倍向上(IBM系)している。しかしながらWilliamsらのそのままのアルゴリズムではベクトル計算機向きになっていない。そこで今回このSuper-spin Codingのベクトル化を可能な限り行い、約5倍(M-280H比で約300倍)の処理速度を得ることができたので報告する。なお、本シミュレーションには、乱数の周期が非常に長い最大周期列乱数発生法(長周期法)による乱数列を用いた[2][3]。

§2 SUPER-SPIN CODING [1]

Multi-spin Codingでは4bitで1個のスピンを表すのに対しSuper-spin Codingでは1bitで1個

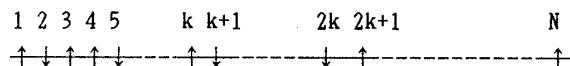


図1 第I行のスピン列

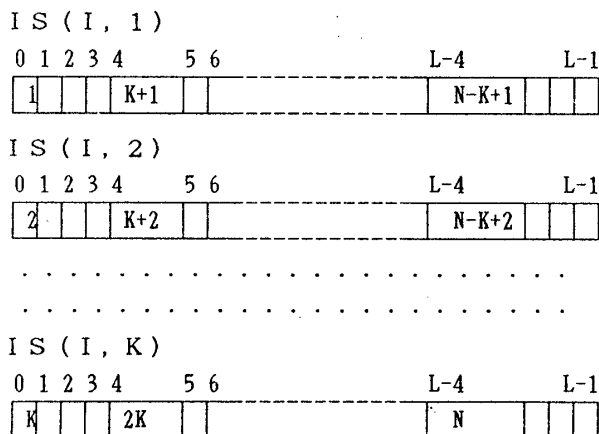


図2 Multi-spin Coding による第I行の配列の様子

のスピンを表している。このためSuper-spin Codingはメモリ効率が良く、より少ないメモリでモデルを構成することができる。

$N \times N$ の2次元正方格子Isingモデルを考え、これを配列ISで表すとする。この時、第I行のスピン列は図1のようになる。これをスピン列がUPならば1, DOWNならば0に対応する2進数列で表す。

Multi-spin Codingでは、図2のように4bitおきに1個のスピンを配置し、第I行のスピン列は配列IS(I, 1)から配列IS(I, K)のK個の配列で表される。ただし、使用する計算機のワード長をL(レジスタ長)、又 $K = 4N/L$ とする(便宜上Lは4の倍数)。

同様にSuper-spin Codingでは図3のように1bitに1個のスピンを配置し、第I行のスピン列は配列IS(I, 1)から配列IS(I, H)のH個の配列で表される。ただし $H = N/L$ とする。

Super-spin CodingではL個のスピン処理が一度にできるところに特徴がある。これはスピンの反転条件を量子化し、これと乱数を比較する際、計算をすべて論理演算でおこない条件分岐(IF文など)を用いないことなどによる。このためシミュレーションのプログラムは、ほとんどが論理演算で成っている。

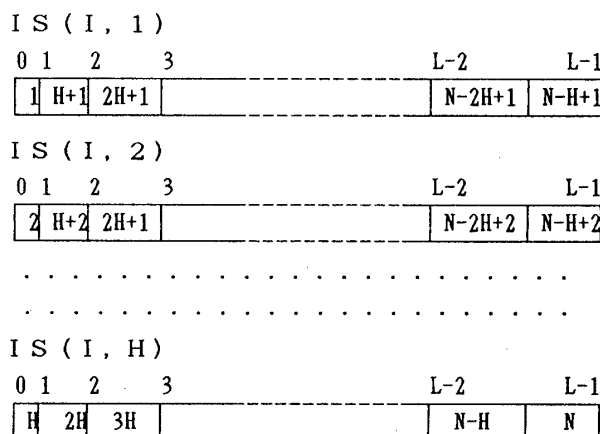


図3 Super-spin Coding による第I行の配列の様子

§ 3 ベクトル化

Super-spin Codingは、配列の参照の関係上そのままベクトル化することはできない。そこで配列の参照をベクトル化に適するようにするために、スピンの処理の順序を変更する。通常、スピンの処理は第1行を例にとると配列 $IS(I, m)$ において m を1から H まで順に処理する方法をとられている。これを m の値が偶数の配列と奇数の配列とに分けそれぞれ別々に処理を行う。

すなわち、第1行においてスピンの処理を偶数番目のスピンの処理と奇数番目のスピンの処理の2回に分けて行う。このようにするとそれぞれの処理は配列の参照領域が重ならないのでベクトル化することができる。

このほかさらに処理速度を上げるためにモデルの境界に当たる部分(第1行と第 n 行)のスピンの処理を別に分ける(境界の部分では多少処理が異なる)などを行って、条件分岐を使用しないようにする。

§ 4 処理速度比較と考察

シミュレーションの処理速度を比較したものを表-1に示す。今回行ったシミュレーションは2次元 Isingモデルであり、3次元 Isingモデルと比べると多少プログラムは簡単であるが十分な処理速度が得られたものと思われる。又、プログラムはすべて FORTRAN 77 で書かれているが、今後論理演算命令の充実や、アセンブラ言語との LINK が行えるようになると、もっと早い処理速度が得られるものと思われる。

終わりに、今回のアルゴリズム開発には一部分子科学研究所電子計算機センターの HITAC-S810 を使用した。

参考文献

- [1] G.O.Williams and M.H.Kalos: A New Multispin Coding Algorithm for Monte Carlo Simulation of the Ising Model, J.Stat.Phys., Vol.37, p283(1984).
- [2] 津田孝男: モンテカルロ法とシミュレーション、倍風館(1980).
- [3] 津田ほか: スーパーコンピュータによる最大周期列乱数発生法の高速化手法、情報処理学会第31回全国大会講演論文集、P77(1985).
- [4] S.Wansleben, J.G.Zabolitzky, and C.Kalle: Monte Carlo Simulation of Ising Model by Multispin Coding on a Vector Computer, J.Stat. Phys., Vol.37, p271(1984).
- [5] G.S.Pawley, R.H.Swendsen, D.J.Wallace, K.G.Wilson: Monte Carlo renormalization-group calculations of critical behavior in the simple-cubic Ising model, Phys.Rev.B 29,4030(1984).
- [6] R.Pearson: First Results from the Ising Monte Carlo Processor, Phys. Lett., Vol.103, p185(1984).

表-1 Isingモデルにおけるシミュレーションの処理速度比較

使用計算機	HITAC S-810/20	FACOM VP-200	NEC SX-1	CDC Cyber205	専用プロセッサ DAP	専用プロセッサ MCP
SIZE	10240^2	10240^2	10240^2	512^3 8192^2	64^3	64^3
Coding	Super-spin	Super-spin	Super-spin	Multi-spin	—	—
処理速度 (SPINS/S)	5.1×10^7	5.3×10^7	5.4×10^7	2.2×10^7	9.5×10^6	2.5×10^7
研究グループ	長崎大学	長崎大学	長崎大学	ケルン大学 グループ[4]	エジンバラ大学 グループ[5]	UCSB[6]