

短距離力分子動力学法の並列化

埴 与志夫[†] 小柳 義夫[†]

分子動力学法 (MD) は数百から数十億個の相互作用する粒子に対するシミュレーションの方法で、多くの科学分野で利用されている。しかし、依然逐次計算機では解けないような、より大きく系より長時間についてのシミュレーションに対する要求があるので、並列計算機と優れた並列アルゴリズムを使用する必要がある。短距離力に関する MD の手法として空間分割法と粒子登録法とがよく知られているが、この論文では粒子登録法を並列化した MD プログラムを分散メモリ並列計算機 AP1000+ 上で実装し、アーキテクチャや問題の条件によっては空間を 2 次元に分割すべきであることを指摘する。

Parallelization of Short-range Molecular Dynamics

YOSHIO HANAWA[†] and YOSHIO OYANAGI[†]

Although the molecular dynamics (MD) is an approach used in various scientific fields for simulating the systems which consist of a few hundred up to a few billion interacting particles, there is still the needs for the simulations of the larger systems which can't be solved by a single processor machine. This fact forces us to use parallel machines and good parallel algorithms. For the parallelization of short-range MD, two algorithms called the cell method and the Verlet neighbor table method are suitable. In this paper, we implemented the MD using the Verlet neighbor table method on a distributed memory parallel computer AP1000+. We show that the division of space into 2-dimensional blocks is efficient on certain conditions.

1. はじめに

分子動力学法^{1),2)} (Molecular Dynamics, MD) は、相互作用する粒子からなる系についてのマクロな性質を調べるため、個々の粒子の運動を時間分割して直接的に計算するような方法である。数十年来、MD は固体や液体などの性質を理解するのに様々な科学分野で使われてきた。近年では並列計算機を用いてより大きな系をより長時間シミュレートすることが可能になったため、並列計算機を利用した MD の研究が数多く行なわれている。本論文では特にレナード・ジョーンズ・ポテンシャルのような、距離が離れると急激に相互作用が弱まるポテンシャルに関する MD について考える。このような短距離相互作用に適した MD の手法としては空間分割法と粒子登録法の 2 つがよく知られており、どちらの方法も高い効率で並列化することができる。

しかし、MD を並列実行する際には、並列化効率よりもむしろ負荷分散が問題になることも多

い。これに対し、動的負荷分散に関する研究も多くなされているが、多くは空間分割法を基にした方法である。本研究では粒子登録法を基にした動的負荷分散方式を評価したいと考えているが、そのための予備実験的内容として富士通 AP1000+ 上に、Giles ら³⁾ の粒子登録法による並列化手法を実装した。本論文では、この実装において空間の分割方法を検討する必要があることを示す。

2. 分子動力学法

MD は、微小時間区切りごとに各粒子に関する運動方程式を用いて粒子にはたらく力を計算し、その力により位置・速度の更新を行なうことを繰り返すことで、系全体の性質を理解するための方法である。このように系を微視的な立場で明確に記述することで、他の方法ではわからないような、個々の粒子のふるまいを知ることができる。

一般に MD において最も時間のかかる部分は力の計算である。力は全ての粒子との相互作用を重ね合わせて得られるが、全ての粒子との相互作用を考えると計算量は、 $O(N^2)$ となってしまう。これに対し、カットオフ距離 r_c を導入し、 r_c よ

[†] 東京大学 大学院 理学系研究科 情報科学専攻
Department of Information Science, Faculty of Science
University of Tokyo

り離れた粒子同士は相互作用は無視できるとして扱うことで、計算量を $O(N)$ におさえることができる。クーロン力のように、相互作用が遠距離まで減衰しないような力を扱う際は、安易にカットオフを行なうことはできないが、遠距離での相互作用が十分 0 であると見なせるような力の場合にはカットオフは普通に用いられる。この論文ではこのような短距離相互作用を示すポテンシャルの一つである、レナード・ジョーンズ・ポテンシャルについて扱う。

レナード・ジョーンズ・ポテンシャルは次のような式で表される。

$$\begin{aligned} V(r_{ij}) &= \epsilon \left[\left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^6 \right] \\ &= 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (1) \end{aligned}$$

ここで r_0 は力が釣りあって 0 になるような距離であり、 $-\epsilon$ はポテンシャルの極小値となるようなエネルギーである。また、 σ の距離でポテンシャルは 0 になり、 $r_0 = 2^{1/6}\sigma = 1.12\sigma$ のような関係がある。このポテンシャルでは至近距離では r^{-12} に比例する斥力が、遠距離では r^{-6} に比例する引力が支配的となる。多くのシミュレーションではカットオフ距離 $r_c \simeq 3r_0$ より遠くにあるときには相互作用は十分無視できるとして計算する。

粒子はニュートンの運動方程式に従うので、微小時間刻みごとの位置と速度を求めるために運動方程式を差分化して解く必要がある。このとき、数値積分法としては、単純な割には精度がよい Verlet 法 (速度形式) がよく用いられる。この方法では粒子 i の位置と速度は (2) と (3) のように表される。

$$\begin{aligned} \vec{r}_i(t + \Delta t) &= \vec{r}_i(t) + \Delta t \vec{v}_i(t) + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \vec{a}_i(t) \quad (2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \vec{v}_i(t + \Delta t) &= \vec{v}_i(t) + \frac{1}{2} \Delta t [\vec{a}_i(t) + \vec{a}_i(t + \Delta t)] \quad (3) \end{aligned}$$

ここで \vec{a}_i は粒子 i の加速度である。

短距離相互作用のためにカットオフを行なったとき、力の計算を行なうには相互作用する粒子を探す作業が必要になる。この部分が $O(N)$ よりも大きいと力の計算全体にかかる時間も $O(N)$ よりも大きくなってしまいますので、相互作用する粒子を

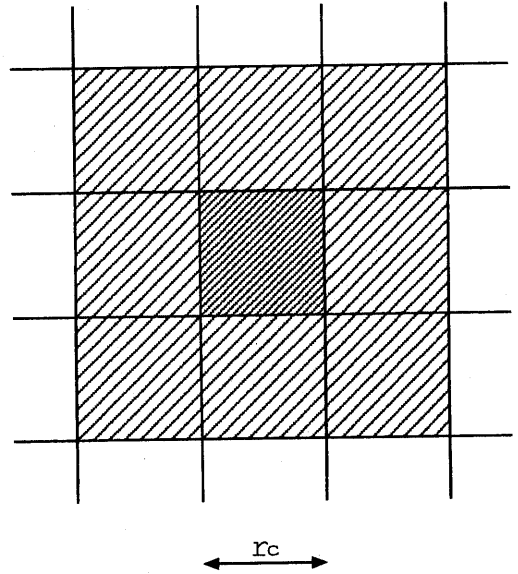


図1 空間分割法

$O(N)$ 以下のオーダーで探さなくてはならない。このための手法として空間分割法と粒子登録法の2つがよく知られている。

空間分割法とは、空間を2次元空間なら正方形の、3次元空間ならば立方体の細かいセルに分割するような方法である。このセルの大きさに依り、相互作用する粒子の存在する範囲を限定することができる。例えばセルの1辺が r_c であれば、あるセルの内部にある粒子については自分自身の含まれるセルとそれに隣接するセルの内部にある粒子とのみ相互作用するかどうか調べればよい (図1)。

粒子登録法は、それぞれの粒子について一定時間のうちに r_c より近づく可能性のある粒子をテーブルに登録しておくことで、一定時間の間は相互作用する粒子の検査をテーブルの粒子のみに限定するような方法である。図2のように、どの r_s 以上離れた粒子同士も一定ステップ (= n) の間 r_c 以下の距離に近付かないように r_s を定め、テーブルに r_s より近くにある粒子のみを登録する。 n ステップの間はテーブルの粒子との距離が r_c 以下であるかどうかを検査し、 n ステップごとにこのテーブルの更新を繰り返す。これにより空間分割法と同じく、 $O(N)$ で相互作用する粒子を見つけることができる。 r_s が大きいほどテーブルの更新頻度を下げることができるが、 r_s が大

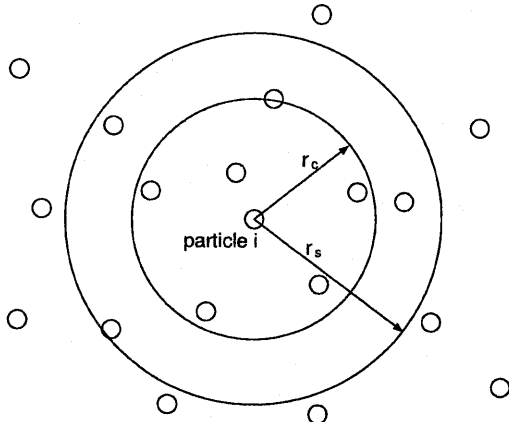


図2 粒子登録法

き過ぎるとテーブルに含まれる粒子が増え、相互作用するかどうかの検査に時間がかかってしまうので、かえって意味がなくなってしまう。系の条件や計算機のアーキテクチャなどによって最適な r_s は変わるが、経験的に 10 ~ 20 ステップごとにテーブルを更新するような r_s を選ぶことが多い。

ところで、粒子登録法のテーブルの更新時には各粒子から r_s の距離にある粒子を探す必要があるが、これを単純に全体を検査して探すとする $O(N^2)$ の時間がかかってしまう。N が大きくなるとこの時間が問題になってくるので、この部分を $O(N)$ で行なうため、セルの一边を r_s とした空間分割法がよく用いられる。

3. 並列化手法

本論文では、Giles ら³⁾ の粒子登録法を用いた並列化手法を実装した。これは、図3のように、PE にある決まった領域（図3の太線四角内、以後セルと呼ぶ）を割り当て、その内部の粒子について粒子登録法を行なうような方法である。

与えられた空間を使用する PE 数個の直方体に分割し、それぞれを各 PE に割り振る。ここで、セルの外側に r_s より離れていない領域の粒子を visitors particle、境界から内側に r_s 内にある粒子を own-shared particle と呼ぶ。このセル内にある粒子についての力を計算するには、このセルから r_s 以内にある点全ての座標が必要である。つまり、各タイムステップごとに visitors particle の座標がわかれば力の計算ができる。あるセ

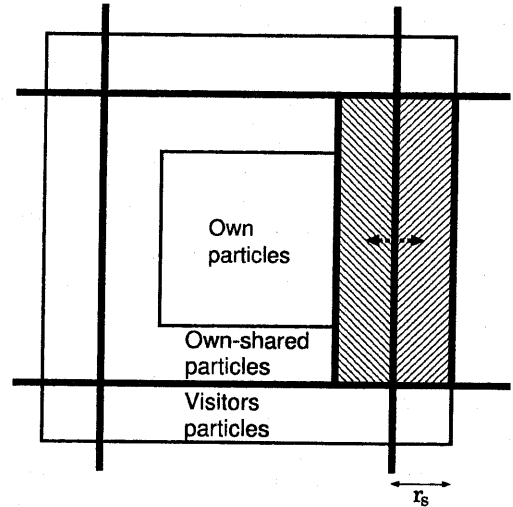


図3 粒子登録法の並列化

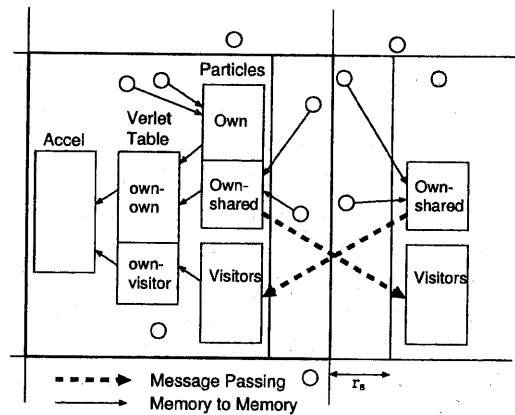


図4 データ構造と処理の流れ

ルでの own-shared particle は隣接するセルでの visitors particle なので、各タイムステップに隣接する全ての方向のセルと own-shared particle を通信しあうことで全てのセルが visitors particle の座標を得ることができる。

粒子を登録するテーブルについても、並列化により複雑になる。通常、力の計算は作用反作用の法則により、2体間について1回行なえばよいが、セルの境界をはさんでいる場合には両方のセルで計算をせざるを得ない。このため、そのセルに含まれる粒子同士で相互作用しているか (own-own) 隣接するセルの粒子と相互作用しているか

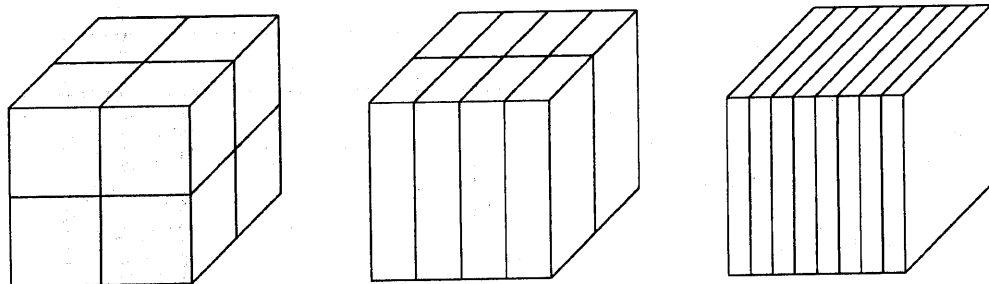


図 5 空間分割の種類

(own-visitor) によってテーブルを 2 つ作る必要がある。(図 4)

このような準備をした上で、力の計算、位置・速度の更新、visitors particles の位置の更新を毎ステップ行ない、このテーブルを一定時間ごとに更新すれば並列に粒子登録法を実行できる。このテーブルの更新もまた元のアルゴリズムよりも複雑である。

更新の手順は、

- (1) visitor particles を含めた全ての粒子の座標を調べ、新たな own particles と own-shared particles を得る。
- (2) 前のテーブル更新時には自分のセルに存在した粒子の速度を送り、別のセルに存在した粒子の速度を受けとる。(own particles の位置・速度を得る)
- (3) 隣接する全てのセルに対して送るべき own-shared particles の粒子数をそれぞれ送り、受けとった visitor particles の粒子数分のメモリを確保する。
- (4) 新たな own-shared particles を交互に通信しあう。(visitors particles の位置を得る)
- (5) テーブルを更新する。

のようになる。テーブル更新の際、own-visitor interaction のテーブルについては全て登録する必要があるが、own-own interaction については力の計算で作用反作用の法則を利用するので、どちらか一方の粒子のテーブルに登録する。

実装について触れると、own-shared particles を通信するときなど、3次元では通常隣接するセルは 26 方向になるので、常に 26 回の通信を行なうような実装も考えられる。しかし、空間をある一方向に分割しないような場合(2次元分割)では通信は 8 方向について行なえば十分であり、あ

る一方向にしか分割しないような場合(1次元分割)では 2 方向で十分になってしまう。本論文では、このような特殊な場合に必要な回数しか通信を行なわないように実装した。

4. 空間分割に対する評価

前章の MD の実装における 1 タイムステップあたりの総通信量を考えると、通信の量は own-shared である粒子の数に比例するので、各 PE が担当する領域が同じ体積であれば立方体に近ければ近いほど通信量は小さくなる。

また、力の計算についても own-visitor であるような相互作用の数が多いほど作用反作用の法則を用いて計算を省くことができなくなるので、総通信量と同様、立方体に近いほど計算時間は減少する。

一般にシミュレーションを行なう領域は立方体またはそれに近いような形であると考えられ、分割された領域は、3次元方向全てに分割した方がある方向に分割しないよりも立方体に近い形になる。(図 5) すなわち、ある方向に分割しないことで、一般に

- 通信の方向が減る
- 総通信量は増える
- 力の計算時間が増える

ということがいえる。

ここで、前章の方法を用いて富士通 AP1000+ 上に実装したプログラムを用い、空間分割の方法による性能について評価する。AP1000+ は 2 次元トラスネットワークを持つ分散メモリ型並列計算機であり、PE として SuperSPARC を使用している。測定に利用した計算機は 256PE 構成であり、ネットワークは 16 × 16 の 2 次元トラスである。

測定ではレナード・ジョーンズ・ポテンシャル

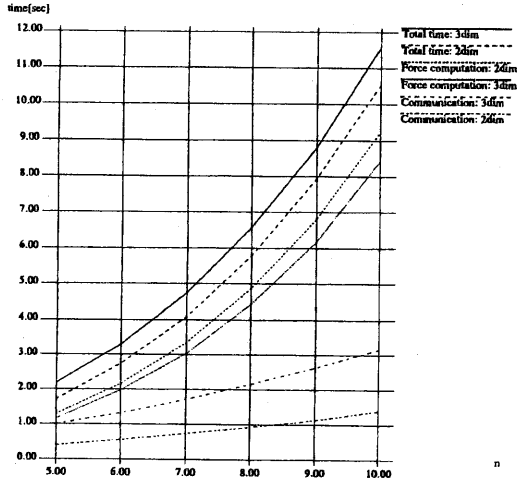


図6 分割方法による比較 (256PE)

に従う粒子を用い、 $r_c = 3\sigma$ 、 $r_s = 4r_c$ 、密度 $\rho = 0.00195$ 、また、テーブルは 10 time step ごとに更新するものとする。初期配置は等間隔とし、速度については、シミュレーションとしての意味はないが、分割が 3次元か 2次元かで結果が変わらないよう、等速度で同方向に運動し続けているとする。この条件で $128n \times 128n \times 64n$ の空間を $8 \times 8 \times 4$ に分割した場合 (3次元分割) と、 $16 \times 16 \times 1$ に分割した場合 (2次元分割) とでそれぞれ n を変化させて 100 time step にかかった時間を比較する。(表 1、表 2、図 6)

力の計算時間については実際に 3次元分割の方が速いことがわかる。しかし、通信時間については通信量が少ないはずであるにも関わらず、3次元分割の方が時間がかかっており、さらに n が大きくなるほど差は開いている。通信には通信を実際に起こす前の準備時間 (スタートアップ時間) が必要なので、2次元分割の方が通信の回数が少

表 1 2次元分割の結果 (256PE)

n	5	6	7	8	9	10
通信時間	0.41	0.56	0.73	0.93	1.14	1.39
力の計算	1.30	2.16	3.34	4.87	6.81	9.23
合計	1.71	2.72	4.07	5.80	7.95	10.52

表 2 3次元分割の結果 (256PE)

n	5	6	7	8	9	10
通信時間	1.01	1.33	1.71	2.16	2.62	3.15
力の計算	1.17	1.96	3.03	4.43	6.18	8.42
合計	2.18	3.29	4.74	6.59	8.80	11.57

ない分だけ有利になる可能性はあるが、スタートアップ時間の差は通信の量には依らないので、これだけの理由では n が増えるほど差が開くことの説明にはならない。これは、2次元分割が AP1000+ の 2次元トラスネットワークに非常に合致しているため通信はネットワーク的に近い PE に対してのみしか起こらず、効率が良いのに対し、3次元分割をすると隣接セルがネットワーク的に遠くの PE に割り付けられるものができるので、通信の衝突が起こりやすくなっているためだと考えられる。

解くべき問題の性質にもよるが、この結果はこのような 2次元的なネットワークを持つ並列計算機では、空間を分割する方向を制限することで性能が向上する可能性を示唆している。

Y林ら⁴⁾も CM-5 において、通信量がさほど多くない状況においては 2次元分割の方が優れていると計算により結論しているが、これを実証したといえる。

5. 関連研究

既存の並列化手法としては、本論文で使用したものとは別に、空間分割法を並列化した方法がよく知られている。Beazley ら^{5),6)} のアルゴリズムは、空間分割法において、あるセルの内部にある粒子にはたらく力を計算するために、隣接するセルのうち一定の方向のものについてそれら全てを經由して自分自身に戻ってくるようなループを考え、そのループ上のセルと元のセルの内部にある士の相互作用を計算しながらループを一周するような方法である。このようにすることで、通信の回数を抑えつつ、作用反作用の法則を利用して同じ力の計算を全体で 1 回しか行わないで済ませることができる。これは均一な系では高い性能を示すが、低温のシミュレーションなどでは負荷がバランスしないことがある。

これに対する負荷分散の方法も多く研究されている。林ら⁴⁾は並列な空間分割法において、通信先が変わらないような制限をつけながら動的にセルを再分配することで、CM-5 上で多くの場合に負荷を平均化することに成功している。

また、松原ら⁷⁾は CP-PACS の高速なネットワークを利用し、粒子登録法と空間分割法を用いた大域的な空間分割にとらわれないような方法により、それぞれ負荷分散が可能であることを示し

た。

それらの研究に対し、本論文で実装した並列化手法を基に動的負荷分散を行なうような研究は我々の知る限り行なわれていない。空間分割法と比べ、粒子登録法ではテーブル更新などの手間がかかるが、テーブルを更新するタイミングで負荷をバランスさせることができれば、次のテーブル更新までは同程度にバランスするので、我々はむしろ動的負荷分散に適しているのではないかと考えている。

6. ま と め

粒子分割法での MD の並列実装を行ない、使用する並列計算機のネットワークや解くべき問題の性質に依り、空間を分割する方向の制限を検討すべきであることを示した。

今後の課題としては、より現実的な条件でのシミュレーションを行なうこと、他の並列化手法との比較が挙げられる。これを元に動的負荷分散を実現し、他の動的負荷分散方法と比較することも行なっていく予定である。

参 考 文 献

- 1) D.W.Heermann (小澤哲・篠嶋妥 訳). シミュレーション物理学. シュプリンガー・フェアラーク東京, 1990.
- 2) 田中 寛, 山本 良一. 計算物理学と計算科学. 海文堂, 1988.
- 3) Roscoe Giles and Pablo Tamayo. Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. In *World Scientific Annual Review in Computational Physics*, volume 3, pages 1-28, 1995.
- 4) 林 亮子, 堀口 進. 並列分子動力学法シミュレーションにおける動的負荷分散法. In *JSP'96 論文集*, pages 81-88, 1996.
- 5) David M. Beazley and Peter S. Lomdahl. Message-passing multi-cell molecular dynamics on the connection machine 5. *Parallel Computing* 20, pages 173-195, 1994.
- 6) David M. Beazley, Peter S. Lomdahl, Niels Grønbech-Jensen, and Pablo Tamayo. A High Performance Communications and Memory Cacheing Scheme for Molecular Dynamics on the CM-5. In *IEEE supercomputing '94*, pages 800-809, 1994.
- 7) 松原 正純, 板倉 憲一, 朴 泰祐. 超並列計算機 CP-PACS における大規模分子動力学法シミュレーション. In *JSP'98 論文集*, pages 215-222, 1998.