

高並列計算機CAP-256による分子動力学計算

5L-7

佐藤 弘幸 大村 由紀子

株式会社 富士通研究所

1. はじめに

分子動力学法(MD:Molecular Dynamics Method) [6] は、分子や原子の集合体に対して、個々の粒子の運動を古典力学にもとづいて追跡するシミュレーション手法である。各時間ステップ内の計算は、粒子毎または粒子ペア毎の並列性がありベクトル処理による高速化例が報告されている [3]。我々は、並列処理による高速化の可能性を検証するため、MDの並列計算手法を開発し、高並列計算機CAP-256上に実現し、評価を行なったので報告する。

2. 高並列計算機CAP-256の概要

CAP-256 [1] は、セルと呼ぶ高機能プロセッサを256台接続した分散メモリ型の並列計算機である。基本構成を図1に示す。各セルは隣接したセルとの通信路をもち全体ではトラス状のトポロジーをとっている。セルのマイクロプロセッサはインテルのi80186、数値演算プロセッサはi8087あり、隣接したプロセッサ間の転送速度は15Mbit/sである。

3. MDの原理

MDは、粒子毎にニュートンの運動方程式を数値的に解くことで粒子の位置と速度を時間を追って求める方法である。粒子の運動方程式は式(1)で表される。ここで、 F_i は粒子*i*にかかる力ベクトル、 m_i は粒子*i*の質量、 X_i は粒子*i*の位置ベクトルである。これを時間ステップ Δt 間隔で数値積分することで、粒子の位置と速度を求める。力ベクトル F_i は、ポテンシャルのグラディエント式(2)から求める。ここで、 X_{ij} は、2粒子間の距離である。また、 ϕ は2粒子間のポテンシャル関数であり、アルゴンなどの希ガスでは(3)式のようなLennard-Jonesポテンシャルと呼ばれる半経験的な関数式で近似される。ここで、 $r (=X_{ij})$ は、2粒子間の距離である。

$$F_i = m_i \frac{d^2 X_i}{dt^2} \quad (1)$$

$$F_i = - \sum_{j \neq i} \Delta_i \phi(X_{ij}(t)) \quad (2)$$

$$\phi(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad (3)$$

図1 CAP-256の構成

図2. カットオフ距離とブロック分割法

図3. セル内のデータ構造

2粒子間の距離が σ より十分大きい場合は、2粒子間の力を無視することができるので、ある粒子に加わる力は、限られた距離(カットオフ距離と呼ぶ)範囲内にある粒子とのみ相互作用を計算すればよい。カットオフ距離内にある粒子を高速に検索するためブロック分割法 [3,5] と呼ばれる方法がある。粒子の存在する直方体の領域をブロックに分割し、ブロックの一辺の長さをカットオフ距離に等しく(あるいは、少し大きめに)とっておけば、あるブロック内の粒子と相互作用する粒子はこのブロックに隣接するブロック内の粒子から選択すればよい(図2)。

4. 分子動力学法の並列化

4.1 空間分割による並列化

前述のブロック分割法を用い、ブロック単位でセルに割り当てることで並列化する。アルゴン原子の結晶成長シミュレーション [4] を例題とした。結晶基板は薄いのでブロック分割は、Z方向には行わず、X,Y方向のみとした。2次元のブロックアレイを2次元のセルアレイにそのままマッピングする。個々のセルには、隣接したセルのブロックのデータを参照したときなどの格納領域として、本来の割当ブロックより余分の領域を周囲に1ブロック分(袖ブロックと呼ぶ)用意しておく。粒子は時間の経過とともにブロック間を移動するのでリスト構造で保持する(図3)。

4.2 処理手順

セル側のメインプログラムは、以下の手順で実行される。まず、アルゴン原子を安定な面心立方格子の結晶構造をとるように数層配置する。次に基板の初期温度を設定する。最下層の二層は、固定層とし粒子速度は0に固定する。

Molecular Dynamics Simulation on a Highly Parallel Processor CAP-256

Hiyoyuki Sato and Yukiko Ohmura

Fujitsu Laboratories, Ltd.

これより上位の可動層の原子には、温度に対応する初速度をランダムに与える。以上で準備が完了し、以後指定した時間ステップだけ以下の処理を繰り返す。

まず、力の計算を行なうために、図4に示すように袖のブロックの粒子データを隣接したセルとの通信を行ないコピーする。コーナーのブロックは縦横2回の転送で行なう。力の計算は、まず担当ブロック内の粒子同士との相互作用による力を計算する。同一の粒子ペアの力の相互作用は、作用反作用の法則により大きさが等しく、方向が逆なので計算は一回で済ませることができる。次に、隣接するブロック間で粒子の相互作用を計算する。ここでも作用反作用の法則を利用し、計算量の増加を防ぐ。ブロックの組み合わせは、図4の矢印で示したものを計算し、次に計算された袖ブロックの粒子の力を隣接セルの元のブロックの粒子の力に加算するために、一旦、図5のように袖ブロックにコピーしたのち、太線の矢印の方向に力に加算処理を行なう。これによって、細い矢印で示す相互作用の効果も反映され、結局すべてのブロック間の相互作用の結果が反映される。セルはトラス状に接続されているので、この方法により周期的境界条件は自動的に満たされる。

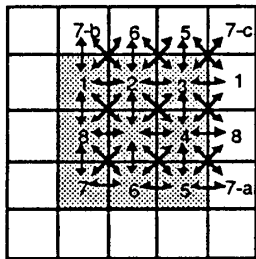


図4 ブロック間の計算

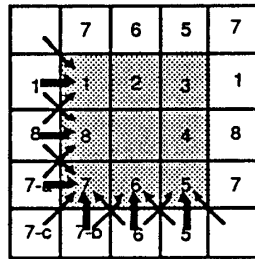


図5 袖ブロック粒子の力加算

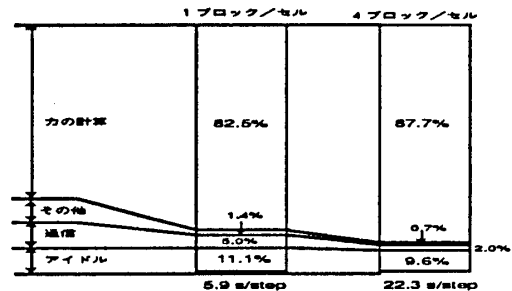


図6 実験結果

これで各粒子の力が求まったので、これから各粒子の速度と位置の時間積分を行なう。位置の更新によって、他のブロックに移動する粒子は、行き先のブロックに移動する。袖のブロックに出た粒子はさらに隣接したセルのブロックへ通信によって移動する。一回のタイムステップで粒子が移動する距離は小さいので移動による通信は頻繁ではない。このほかに、温度調節のための粒子の速度スケールを数十ステップに一回行なう。全粒子の平均温度を求めて、目標温度との比較から各粒子の速度をスケールする。

5. 実験と性能評価

カットオフ距離を 3σ とし、セル当たりのブロック数1と4の場合を実験した。層数は6層で、最下層2層を固定している。粒子総数は、それぞれ11,532個と46,128個である。温度調節は20ステップに一回とした。結晶成長実験のための粒子の注入処理は、今回の実験には含めていない。

図6にステップ当たりの計算時間と処理時間(平均)の内訳を示す。力の計算が支配的であり通信時間は5%以下であった。アイドル時間は、セルが担当する粒子数がばらつくことに起因する。通信時間は、力の計算のための袖ブロックの粒子の座標データの転送と計算した力データの転送、また粒子のセルをまたぐブロック間の移動処理を含む。粒子の速度、座標の時間積分や、担当ブロック間の移動処理は、その他に含まれる。セルの担当するブロック数を一定にしてセル数を変えても処理時間およびその内訳はほぼ一定である。

6. まとめ

ブロック分割法による分子動力学計算法をブロック単位でプロセッサに割り当てる方法で並列化した。CAP-256上で実験したところ高い並列処理効率(80%以上)が得られ、本方式の有効性を確認した。この方法の三次元のブロック分割への拡張は容易である。クーロン力など長距離の相互作用を含む問題への対応は今後の課題である。

〔謝辞〕アルゴンの結晶成長シミュレーションについてご指導いただきました半導体結晶研究部の池田研究員、原研究員に深謝致します。

<参考文献>

- [1] 例えば、石畑ほか：高並列計算機CAP-256.情報処理36回全国大会, pp. 185-190(1988)
- [2] 佐藤、大村：並列計算機CAPによる分子動力学計.電子情報通信学会、コンピュータシステム研究会、CPSY89-24(1989.8)
- [3] 三上：分子動力学法の高速度化技法、日本シミュレーション学会第4回シミュレーションテクノロジーコンファレンス(1984.6)
- [4] K.Hara, M.Ikeda, O.Ohtsuki, K.Terakura, M.Mikami, Y.Tago, and T.Oguchi: Molecular-dynamics simulations for molecular-beam epitaxy: Overlayer growth pattern in two-component Lennard-Jones systems. Phys. Rev. B39, 9476(1989)
- [5] G.Fox et al.: *Solving Problems On Concurrent Processors*. Prentice Hall.
- [6] 堂山、山本編：計算材料科学.海文堂(1987)