

1C-6

動的負荷分散を考慮した分子動力学法の 並列シミュレーション*

林 亮子 堀口 進

北陸先端科学技術大学院大学 情報科学研究科

1 はじめに

近年、計算機の高速化にともなって先端科学技術分野でのコンピュータ・シミュレーションの果たす役割が大きくなっている。そのような数値計算の手法の一つ、分子動力学法は物理、化学、材料科学の分野で広く用いられている。複雑な物質のシミュレーション、また現実の物性を予測するシミュレーションのためには多数の分子を扱う必要があり、そのため的高速化手段として超並列計算機が注目されている。

分子動力学法の超並列計算に関して、様々なノード数、CPU、結合方式の並列計算機を用いた研究が行なわれている [1][2][3]。本論文では、並列化手法の一つ Coarse-grained cell method (以下 CGC 法と称す) について、動的負荷分散法を組み合わせた結果について報告する。

2 分子動力学法と並列計算機

分子動力学法とは、物質を構成する分子一つ一つの運動を模擬することによって、物質の状態の時間変化を調べる方法である。各分子について運動方程式を微小な時間刻みで数値積分し、各時点での分子の位置、速度を計算する。運動方程式に代入すべき分子に働く力は分子間相互作用から計算する。本研究では、相互作用としてレナード・ジョーンズ型ポテンシャルを使用した。

分子動力学法の超並列化アルゴリズムは盛んに研究されている。科学技術計算専用並列計算機 PAX 上でも、分子の割り当て方法が考察されている [1]。また、空間を分割してプロセッシングエレメント (PE) に割り当てる Coarse-grained cell method を用いて、3次元空間で 6.7×10^7 分子が計算されている [2]。分

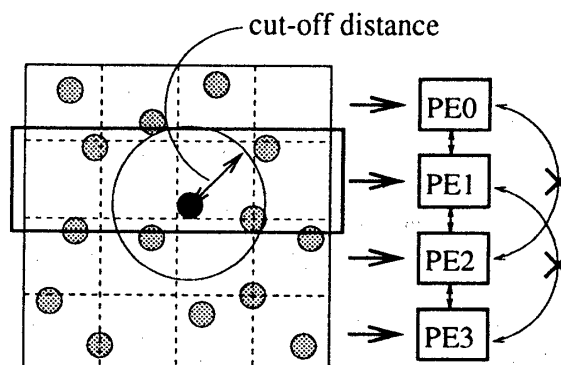


図1: Coarse-grained cell method (CGC 法) の概要

割した空間を PE に割り当てる方法に加えて、動的負荷分散を考慮した例もある [3]。

3 Coarse-grained cell method

CGC 法は空間を立方体型 (セル) に分割し、セル単位で PE に割り当てる方法である。このとき相互作用の影響範囲 (力の切断距離) よりもセルが大きければ、図 1 に示すように各セル中の分子は 26 近傍セル中の分子との相互作用を考慮すればよい。

しかし CGC 法では、分子が空間の一部に集中した場合に計算負荷の不均衡が生ずる。分子動力学法では各時間刻みごとに全 PE で同期をとる必要があり、分子が集中すると計算効率は悪化する [2]。したがって、CGC 法では動的負荷分散を行なう必要がある。本研究では、CGC 法で各 PE の持つセルは柱状の集合体をつくるものとし、局所通信は 8 近傍 PE とのみ行なう。

4 動的負荷分散法

空間を PE に割り当てる手法における動的負荷分散については、2次元空間を短冊状に分割して PE に割り当て、分子の数を均等にするように PE の担当

*Load balancing of parallel simulation for molecular dynamics

Ryoko Hayashi, Susumu Horiguchi
Japan Advanced Institute of Science and Technology
School of Information science

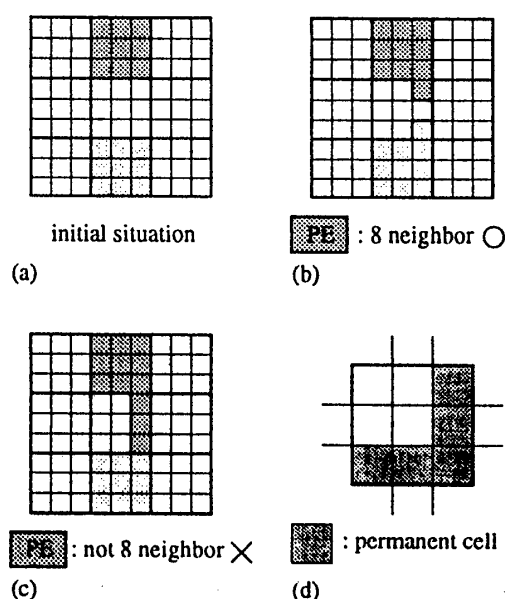


図 2: 動的負荷分散法の概要 (a) 初期状態 (b) セルの再分配 (成功例) (c) セルの再分配 (失敗例) (d) PE 固有のセル

する空間の境界を移動させる方法が報告されている [3]。一方 CGC 法では、セルの境界が変化するとセルの空間的配置が変わり、26 近傍のみを参照する局所条件が成り立たなくなる。したがって、空間の境界が変化する方法を単純に拡張することはできない。

本研究では、大規模シミュレーションにおいてセル数が膨大になることに着目し、セルを単位としたタスクスケジューリングによる動的負荷分散を提案する。この手法は、計算負荷の高い PE は近傍 PE に分子のデータをセルごと送って (セルの再分配) 全体として計算負荷の不均衡を小さくする。セルの再分配の結果、図 2(b) に示したような場合は PE の隣接関係が保持されて、各 PE は 8 近傍 PE のみと通信すれば良い。一方図 2(c) のように再分配された場合は、近傍 PE 数が変化し、8 近傍 PE のみと通信する局所条件が成立しない。ここで、図 2(d) に示すように PE 固有のセルを定義すると、図 2(c) の状態は起こらずに PE の隣接関係を保持することができる。

分子が時間とともに集中するような物理条件を用いて、動的負荷分散法の有効性を調べる計算を行なった。図 3 に 64PE の CM-5 を用いて 4096 セルのシミュレーションを行なった際の、各時間ステップでの計算時間を示す。シミュレーションの初期は比較的計算負荷が均等であるために、動的負荷分散法のオーバーヘッドが大きい。時間ステップが進むと分子の集中が顕著となり、動的負荷分散法を行なわな

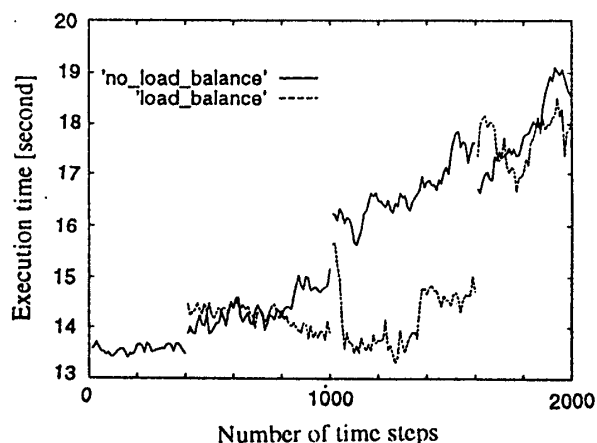


図 3: 計算時間変化の比較

い場合は急激に処理時間が増加する。しかしさらに時間ステップが進むと分子が極端に集中するために、動的負荷分散法を使用しても、計算負荷を分散しきれなくなっている。

5 まとめ

分子動力学法の並列化アルゴリズムである CGC 法の動的負荷分散法を提案し、その有効性について検討した。ここで提案した動的負荷分散法は、比較的簡単に計算負荷を平均化できた。しかし、極端に分子が集中する時 (希薄な気体が完全に液体になる時など) には効果がなくなる。今後の課題としては、動的負荷分散法の効果が得られる範囲を大きくすることが考えられる。

参考文献

- [1] T. Hoshino, K. Takenouchi, *Processing of the molecular dynamics model by the parallel computer PAX*, Computer Physics Communications 31(1984)287-296
- [2] D. M. Beazley and P. S. Lomdahl, *Message-passing multi-cell molecular dynamics on the Connection Machine 5*, Parallel Computing 20(1994)173-195.
- [3] F. Bruge, S. L. Fornili, *Concurrent molecular dynamics simulation of spinodal phase transition on transputer arrays*, Computer Physics Communications 60(1990)31-38