

動的粒子集団分割法の性能評価

2 G-3

江丸裕教 高井昌彰 山本強
北海道大学大学院工学研究科 北海道大学大型計算機センター

1 はじめに

ここ数年、スーパーコンピュータを凌ぐような性能を持つ、超並列計算機が次々と発表されている。また、科学技術計算の分野において、計算機を駆使したシミュレーションの重要性はますます増してきている [1]。

このような状況の中、より大規模なシミュレーションを高速に行なうために、PE 数、結合方式など様々な種類の並列計算機を用いた研究が行なわれている。その中でも、我々は物理・化学などの分野で現在広く用いられている分子動力学法 (Molecular Dynamics Simulation) [2] に着目している。

分子動力学法とは、多数の粒子から構成される仮想的な系を考え、与えられた粒子間相互作用を用いて、各粒子に働く力を求め、運動方程式の時間に関する近似方程式により全粒子を一斉に運動させ、時間に対する粒子の位置と速度などの情報から種々のマクロ量を求める、分子シミュレーションとよばれる手法の一つである。分子シミュレーションには他にも分子力学法、モンテカルロ法などがあるが、この手法の優れている点は、原子・分子の大規模な集団の挙動からそのマクロな性質を導くことが可能である、という点にある。

本論文では分子動力学法の並列解法として動的粒子集団分割法を取り上げ、並列分子動力学法で最も良く用いられているセル分割法との比較を行なうことによってその利点を明らかにする。

2 関連する研究

短距離分子動力学法の処理単位は

1. 相互作用する粒子対を特定する
2. その相互作用の大きさを求める
3. 運動方程式を解き次ステップの粒子の位置を決定する

という3つのステップから成る。これを必要回数繰り返すことによってシミュレーションの結果を得るわけ

Performance Evaluation of the Dynamic Grouping of Particles
Hironori Emaru, Yoshiaki Takai and Tsuyoshi Yamamoto
Hokkaido University, Sapporo 060 JAPAN.

であるが、一般に相互作用を計算するまでに70%から90%の計算量が集中すると言われている。したがって分子動力学法の高速度化は、粒子対の特定をいかに効率良く行なうかという点が鍵となる。

粒子対の特定を効率良く行なう代表的な手法として、粒子登録法とセル分割法が知られている。

粒子登録法は、登録ステップ R ごとに各粒子が登録距離 R_c 内に存在する粒子を登録し、 R ステップの間、各粒子が登録された粒子とのみ相互作用の計算を行なうことによって、計算量を削減する手法である。 R と R_c は、登録時に R_c 外にあった粒子が R ステップ後までにその粒子の切断距離 r_c 以内に近付くことがないように選択する。

セル分割法はシミュレーション空間をセルに分割し、各粒子が自分の存在するセルとその近傍のセルに含まれる粒子のみを探索範囲とする手法である。

3 動的粒子集団分割法

一般に並列プログラミングにおいては1) 通信量、2) ロードバランス、3) データ並列といった点を考慮する必要がある。

分子動力学法の並列化に関する研究は数多くあるが、ほぼ全ての研究がセル分割法をベースとした手法を用いている [3]。これはセルをPEに割り当てる手法が上に挙げた条件をうまく満たすことができるからである。しかしながら、この手法には基本的に割り当てられた領域がシミュレーションの間固定であるため、粒子の分布が偏るような場合ロードバランスをとるのが困難であるという問題点がある。また他のPEの受け持つ粒子の位置を知るため、毎ステップ通信が必要となる。

そこでこれらの問題点を解決するため、動的粒子集団分割法 [4] の提案を行なった。この手法は、決められたステップ毎に動的に粒子をグルーピングすることによって、計算量と通信量を削減する手法である。

この手法では登録ステップ R を1つの計算単位とし、その最初にグルーピングと呼ばれる処理を行なう。グルーピングとはお互いに登録距離内に存在する粒子が同じグループに属するように系を粒子のグループに分

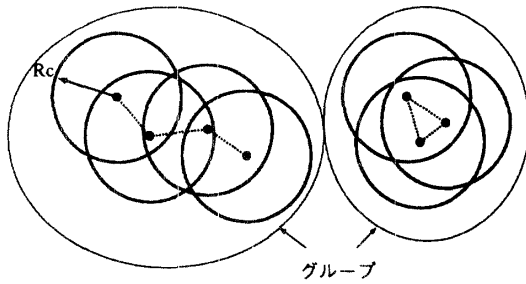


図 1: 動的粒子集団分割法

ける作業である。提案手法は粒子登録法をベースとしているが、粒子登録法が粒子ごとに登録のテーブルを持つのに対し、提案手法では系全体で1つの統一的なグルーピングを行なうという点が異なっている。

R_c と R を粒子登録法と同じようにして定めると R ステップ毎に図1のようなグルーピングが行なわれることになる。このグループを単位に各PEにタスクを割り振ることによって、残りのステップ各PEは他のPEの担当する粒子の情報を必要とすることなく、すなわち通信を行わずに計算を行なうことが可能となる。

4 実験と考察

動的粒子集団分割法 (以下 DGP と呼ぶ) とセル分割法を超並列計算機 SR2201 上に実装し、同一のシミュレーション条件下で比較を行なった。

図2は、系全体の粒子数を10800、PE数を10としたとき、1000ステップを計算するのに要した時間を測定した結果である。DGPにおいてグループを構成する粒子数がある一定の数になるような粒子の初期配置を課し、最初に発生するグルーピングにおける1グループあたりの粒子数を横軸に取った。すなわち粒子の初期配置を、横軸に示した粒子数でグルーピングができるような配置にしてある。またDGPにおける登録ステップ R は50とし、50ステップごとに再グルーピングを行なった。

このグラフから、今回与えたような物理条件下では、グループを構成する粒子の数が25を下回るような場合にはDGPの利点が生かされるということがわかる。

DGPがほぼ線形な増加を示しているが、これは1000ステップの間に行なわれる20回のグルーピングを通じてグループ間の粒子の出入りがあまりなく、シミュレーションの間、グループの分布がほぼ一定に保たれていることが原因と考えられる。一方、セル分割法がなだらかな増加を示しているのは、横軸にグループを構成する粒子の数をとり、これが変化しても系全体の平均密度がほとんど変わらないため、密度に依

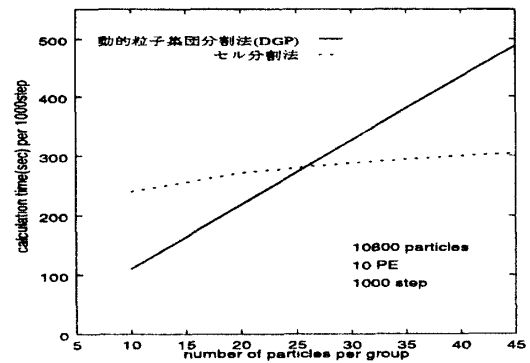


図 2: 2手法の比較

存するセル分割法の計算コストがあまり変化しないということが理由となっている。実際、系の平均密度は初期グループ粒子数が10のとき0.05、45のとき0.08とほとんど変わっていない。

すなわち、セル分割法が平均密度で表される粒子のマクロな分布に依存し、1セルあたりいくつの粒子が含まれるかによって性能が決定されるのに対し、DGPは小さなグループに分割できるような疎密の波があるかという、粒子のミクロな分布に依存し、1グループを構成する粒子の数によって性能が決定されることになる。

1グループを構成する粒子数をある一定の数で抑えなければならないため、DGPが適用できるのは気相、または液相の系でなければならないと考えられる。

5 まとめ

DGPはグループを構成する粒子数を小さくできる場合に有効であることが判明した。さまざまな物理条件に対する有効性を調べるのは今後の課題である。

参考文献

- [1] 上田 顕: "コンピュータシミュレーション", 朝倉書店
- [2] 河村雄行: "パソコン分子シミュレーション-分子動力学実験入門-", 海文堂
- [3] 林亮子, 堀口進: "並列分子動力学シミュレーションにおける動的負荷分散法", 並列処理シンポジウム JSPP96 論文集, 1996
- [4] 江丸裕教, 高井昌彰: "超並列計算機による分子動力学シミュレーション", 情報処理学会第54回全国大会, Vol.1, pp.73-74, Mar.1997