

領域分割を用いた短距離並列分子動力学法シミュレーションにおける最適分割法予測

林 亮子[†] 堀 口 進^{†,††}

本稿では、分子動力学法シミュレーションの並列化手法である領域分割法の最適分割法を議論する。分子動力学法シミュレーションの並列化に適した計算法の1つは、シミュレーションを行う空間を小さく分割し、プロセッサ要素に割り当てる領域分割法である。領域分割法では、サイクリック分割やブロック分割など、シミュレーション空間の様々な分割法がある。しかしながら、最適な分割法を予測する手法はまだ明らかになっていない。使用するプロセッサ数、シミュレーションを行う空間のサイズ、並列計算機の通信性能および処理性能によって、最適な分割法は異なる。そこで本稿では、メッセージ通信型並列計算機上での領域分割法の実行時間を理論的に評価した。そして通信時間の理論予測に基づき、最適な分割法の予測を行った。そして、通信時間の実測値から得られる最適な分割法と比較した。その結果、簡単な試験実行から得られる性能パラメータを利用して、最適な分割法を予測できることが分かった。

Prediction of Optimum Distribution Strategy of Simulation Space for Short-range Molecular Dynamics Simulations on Parallel Computers

RYOKO HAYASHI[†] and SUSUMU HORIGUCHI^{†,††}

This paper discusses the optimum distribution of simulation space for domain decomposition method to molecular dynamics simulations on parallel computers. Domain decomposition method is a promising parallelization method for short-range molecular dynamics simulations in which the simulation space is broken down into numerous small spaces each of them is assigned to processing elements. With domain decomposition method, various strategy for distributing small spaces properly into processing elements are available such as cyclic distribution and block distribution. However, prediction method for the optimum distribution strategy was not clear. The optimum distribution strategy varies according to number of processing elements, simulation size, communication performance and computational performance of the parallel computer. Therefore this paper evaluates execution time of domain decomposition method on a message passing parallel computer theoretically. Next, we predicted the optimum distribution strategy based on the theoretical prediction of communication time. Finally, we compared the theoretical optimum distribution method and actual execution time. The comparison results showed that theoretical optimum distribution based on performance parameters obtained from a simple test-run program could predict experimental optimum distribution strategy.

1. はじめに

分子動力学法 (MD) シミュレーションは、材料科学の分野において物質・材料設計の有力な手段として注目されている。MD は物質を構成する分子1つ1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

を調べるシミュレーション手法である¹⁾。より複雑な物質や詳細な現象を扱うために、並列処理によるMDの高速化について多くの研究が行われ、領域分割法が、相互作用の影響範囲が小さい短距離MDでは最も高速な並列化手法であることが分かった²⁾。そして、領域分割法を利用して、多くの並列シミュレーションが実行されている。一方、近年の並列計算環境は多様化しており、数値計算用のマルチプロセッサシステムに加えて、複数のCPUを持つスーパーコンピュータ、パソコンをクラスタ結合したPCクラスタなどが使用されるようになってきている。そのため、並列シミュ

[†] 北陸先端科学技術大学院大学情報科学研究科
School of Information Science, Japan Advanced Institute of Science and Technology

^{††} 東北大学大学院情報科学研究科
Department of Computer Science, Tohoku University

レーションを高速に実行するためには、並列計算機の CPU 数、通信性能、処理性能、シミュレーション空間の大きさを考慮して最適な領域分割を利用する必要性が大きくなっている。本稿では領域分割法を用いた 3 次元空間の MD シミュレーションにおいて、利用する計算機環境に即して計算時間と通信時間の大きさを考慮した、最適な領域分割形態を議論する。

現在まで、並列計算機上での MD シミュレーションに関しては様々な研究が行われている。Tamayo ら³⁾ は linked cell, ベルレ表, 領域分割法の一形態である coarse-grained cell method の 3 つの計算手法を並列計算機上に実装し、領域分割法が最も高速化に適していることを指摘している。Beazley ら⁴⁾ は領域分割法を用い、1024 プロセッサ要素を有する並列計算機上で 10^8 分子規模のシミュレーションを行っている。Brown らは 3D トーラス型の仮想結合網で間接通信を利用して通信時間削減を行った⁵⁾。Pinches らは 3 次元空間のシミュレーションにおける 3 つの領域分割形態を比較した⁶⁾。彼らはプロセッサ要素間で交換するセルの全セルに対する割合を求め、 p を整数として 2 次元トーラス結合網では p^2 個、3 次元トーラス結合網では p^3 個のプロセッサ要素を使用するのが最適であり、セル数が無限大の極限では立方体ブロック分割が最適であることを示した。また、Hayashi らは 3 つの領域分割形態でのプロセッサ間通信時間の理論比較を試みた⁷⁾。これらの研究から領域分割法は、空間の PE への割当て方の定性的な性質は分かっているが、実際の計算機環境における空間の最適な分割法は、定量的には十分議論されていない。

本稿の構成は以下のとおりである。2 章では分子動力学法および領域分割法の概要を示す。そして、3 次元シミュレーションでの分割した領域のプロセッサ要素への割当て法を議論する。3 章では、理論式による実行時間評価を行い、最適分割法を予測する。4 章では、実際の並列計算機 CM-5⁸⁾ 上で CMMD⁹⁾、および T3E¹⁰⁾ 上で MPI¹¹⁾ を用いたメッセージ通信を行って通信パラメータを評価し、最適分割法の理論予測と実測値を比較する。5 章では得られた結果をまとめ、今後の展望を述べる。

2. 領域分割を用いた並列分子動力学法シミュレーション

2.1 分子動力学法の概要

MD とは、物質を構成する分子 1 つ 1 つの運動を模倣することによって、物質の状態を調べる計算手法である。多くの場合、分子の運動はニュートンの運動方

程式に従うものとし、分子に働く力は分子の 2 体力の和によって与える。運動方程式を微小時間 Δt で数値積分することによって、時刻 t での位置、速度、力から Δt 後の位置および速度を求める。微小時間ごとのすべての分子について数値積分と相互作用の計算を行い、これを 1 タイムステップと呼ぶ。

分子の間に働く力は、ポテンシャル関数で表した分子間相互作用として与えられることが多い。たとえばよく用いられる相互作用の 1 つであるレナード・ジョーンズ型ポテンシャルは、以下のように定義される。

$$V(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad (1)$$

ここで r は分子間距離、 ϵ および σ は物質によって異なる定数である。式 (1) によると、分子間距離 r が増大すると相互作用の大きさは急速に零に近づく。このようなポテンシャルは短距離相互作用と呼ばれ、ある距離 r_c 以上では相互作用を零として、力の計算時間を短縮することが一般に行われる。このとき、相互作用の有効範囲 r_c を「力の切断距離」という。

MD 計算の主要部分は、相互作用の計算である。扱う分子の数を N とし、作用反作用の法則 $\mathbf{f}_{ij} = -\mathbf{f}_{ji}$ を利用すると、MD の計算複雑度は相互作用を計算する分子の組合せ数に依存し、2 つの分子間に働くポテンシャルの場合、分子の組合せ数は

$${}_N C_2 = \frac{N(N-1)}{2} \quad (2)$$

である。そのため、MD の計算複雑度は $O(N^2)$ である。力の切断を行うことによって、本質的に必要な計算量は $O(N)$ となる。各分子は、分子の位置を中心とした半径 r_c の球体空間、すなわち $4/3\pi r_c^3$ の空間中にある分子と相互作用をする。組合せの数では $1/2$ を掛ける必要がある。分子の密度を ρ とすると、力の計算の組合せ数は以下のように表せる。

$$N \times \frac{4}{3}\pi r_c^3 \rho \times \frac{1}{2} = \frac{2}{3}\pi r_c^3 \rho N \quad (3)$$

ρ および r_c は定数なので、力の計算複雑度は $O(N)$ である。しかし、 $O(N)$ の計算量で MD シミュレーションを行うためには、相互作用影響範囲の局所性を考慮した計算手法が必要である。Linked cell (リンクセル法) は代表的な $O(N)$ の計算手法であり、領域分割法はリンクセル法の並列化版で、プロセッサ要素数を P とすると $O(N/P)$ の並列 MD 計算法である。

2.2 領域分割法

2.2.1 領域分割法の概要

MD の並列化手法の 1 つである領域分割法は、空間

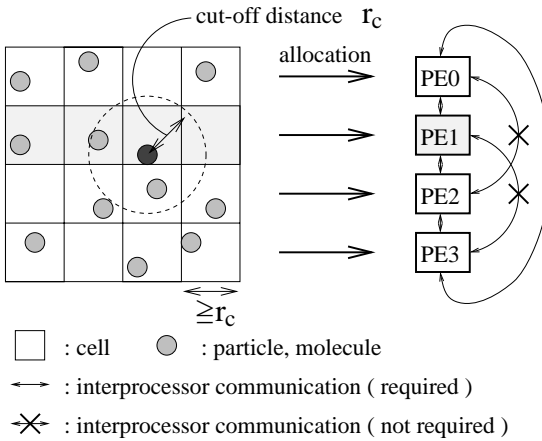


図1 領域分割法の概要

Fig. 1 Domain decomposition method.

を分割してプロセッサ要素 (PE) に割り当てることによって、並列に MD シミュレーションを行う手法である。これは、逐次処理で用いられる、リンクセル法と呼ばれる $O(N)$ の計算法の並列化版である。領域分割法ではシミュレーションを行う空間を、2次元空間の場合は正方形、3次元空間の場合は立方体に均等分割する。これをセルと呼び、セル単位でシミュレーション空間を PE に割り当てる。

2次元空間のシミュレーションを例にして、領域分割法の概要を図1に示す。この例では、1列のセルをまとめて各 PE に割り当てている。このセルのかたまりを本稿ではドメインと呼ぶこととする。力の切断距離よりもセルが大きければ、各セル中の分子は近傍セル (2次元空間では8近傍、3次元空間では26近傍) 中の分子との相互作用のみを考慮すればよい。さらに図1では、各 PE の持つ分子はドメインが隣接する PE (近傍 PE) の持つセル中の分子とのみ相互作用するので、各 PE は近傍 PE とのみ通信すればよい。そのため、領域分割法では、計算時間と通信時間の両方を削減することができる。

2.2.2 リンクセル法の計算複雑度

領域分割法の計算複雑度を評価する準備として、3次元リンクセル法の計算複雑度を評価する。計算複雑度は、シミュレーション空間中で分子間距離を計算する組合せ数に比例する。セルの一边が無次元化した力の切断距離 r_c^* ($= r_c/\sigma$) であるとし、シミュレーション空間の分子は均等に分布すると仮定する。また、1種類の分子のみを MD で扱う場合を考慮する。シミュレーション空間中の全セル数を C とすると、シミュレーション空間の体積は Cr_c^{*3} である。ここでは

$$\rho^* = \frac{N}{Cr_c^{*3}}, \quad (4)$$

を密度とする (この密度は無次元化しているので、*がついている)。1つのセル中に存在する分子の数

$$N_{cell} = r_c^{*3} \rho^*, \quad (5)$$

が整数であり、全セルに同数の分子が存在する場合を考える。このとき、 C 個のセル中に N 個の分子が存在し、1個のセル中に N_{cell} 個の分子が存在するため、

$$N = N_{cell}C = r_c^{*3} \rho^* C, \quad (6)$$

の関係がある。近傍セル数と分子の組合せを考慮して、距離を計算する全組合せ数 I_{pairs} は

$$I_{pairs} = \left[\frac{N_{cell}(N_{cell} - 1)}{2} + \frac{26N_{cell}^2}{2} \right] C, \quad (7)$$

$$= \left[\frac{27}{2} N_{cell}^2 - \frac{1}{2} N_{cell} \right] C, \quad (8)$$

$$= \left[\frac{27}{2} r_c^{*3} \rho^* - \frac{1}{2} \right] N, \quad (9)$$

である。式(7)の第1項はセル内での分子の組合せ数であり、第2項は各セル中の分子と近傍の26セル中の分子との組合せ数である。式(9)では、 r_c^* は定数であり、 ρ^* は上限値を持つ。そのため、領域分割法の計算複雑度は $O(N)$ である。式(8)は領域分割法の計算複雑度が $O(C)$ でもあることを示す。その理由は ρ^* は上限値を持つことから必然的に N_{cell} も上限を持つことである。

次に、式(9)の係数を評価する。一般的に r_c^* は2.5から3.5程度である。密度の最大値は面心立方格子の密度 $\rho^* \approx 1.41$ 程度である。そのため、 $r_c^* = 2.5$ で N_{cell} の最大値はおよそ22であり、 $r_c^* = 3.5$ で N_{cell} の最大値はおよそ60である。式(9)の係数は $r_c^* = 2.5$ で297程度、 $r_c^* = 3.5$ で816程度である。並列計算機を使用したシミュレーションでは最低でも $N \approx 10000$ 程度の分子を扱うので、この数値は N よりも十分小さい。

2.2.3 領域分割法の計算複雑度と通信量

ここでは、領域分割法の計算手順を説明し、各手順での計算複雑度と通信量の概要を述べる。図2に領域分割法の計算手順を示す。図2の手順のうち、近傍の PE とのデータ交換を要する手順を太枠で示した。以下では、各 PE は均等に分子が存在する空間を同じ体積だけ担当するものとし、 N/P 個の分子を担当するものとする。いずれの処理も、各 PE は N/P 個の分子に関する処理のみ行うので、計算複雑度は $O(N/P)$ である。

数値積分 各分子の次の位置および速度を、数値積分により求める。各 PE は、分子ごとに独立した

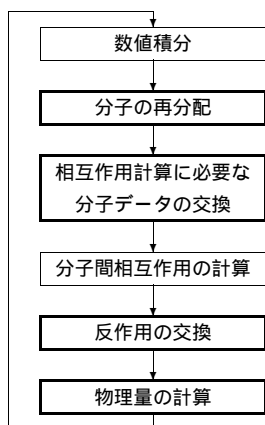


図 2 領域分割法の計算手順

Fig. 2 Procedures of domain decomposition method.

N/P の整数倍個の式を計算し、通信はせずに計算のみ行う。

分子の再分配 分子は時間とともに移動するため、領域分割法では各タイムステップで分子の位置をセルの大きさで除算して新しいセル番号を計算し、セル番号に従って配列中にデータを格納しなおす。この手続きが、分子の再分配である。分子がセルを移動すると PE 間で分子が移動する場合があるので、分子の再分配では、通信が必要である。分子の移動は等方的であると考えられるので、分子の再分配では近傍関係にあるすべての PE と、移動する分子のデータを交換する。通信すべき 1 分子あたりのデータ量は、3 次元空間での位置、速度、力なので 9 ワードである。しかし、そのセルから周囲の個々のセルに何個分子が移動するのかが明らかではないので、通信すべきセルあたりのデータ量は一般には不明である。そこでセルあたりの通信量の上限值として、1 セルのすべての分子がそのセルから外に出るが、議論を簡略化してセルの 6 つの面から同数ずつ出ていく場合を考えれば (交換すべき 1 セルあたりのデータ量) $< 9 \times 1/6 N_{cell} = 1.5 N_{cell}$ ワードであると考えられる。

相互作用計算に必要な分子データの交換 セルの位置関係を用いて、相互作用計算に必要な分子データをあらかじめ知ることができる。そこで、分子の再分配によって各分子を正しいセルに所属させた後に、相互作用計算で必要な分子の位置データを交換する。本稿では作用反作用の法則 $f_{ij} = -f_{ji}$ を利用して相互作用の計算量を半分にするので、各 PE は近傍 PE のうち半数からデータを集める。本稿の場合、ここで交換するのは 3 次元空間での分子位置のみなので、通信すべき 1 セルあたりのデータ量は $3N_{cell}$

ワードである。

分子間相互作用の計算 分子の間で働く相互作用、すなわち分子どうしに働く力を計算する。相互作用の計算は、MD シミュレーション中で最も処理時間を要する場合が多い。相互作用の計算時間の大きさは 2.2.2 項で述べたように相互作用の定義に依存し、相互作用の影響範囲が大きく、複雑な相互作用であるほど計算時間が大きくなる。本稿で用いる相互作用の計算複雑度は、逐次処理でリンクセル法を使用すると 2.1 節で示したように $O(N)$ であり、リンクセル法を並列処理に拡張した領域分割法では各 PE は N/P 個の分子に関する計算を担当し、 N/P の整数倍個の式を計算するので $O(N/P)$ である。

反作用の交換 作用反作用の法則より $f_{ij} = -f_{ji}$ なので、1 つの相互作用を計算して 2 つの分子に加える。そのため相互作用を計算した後に、反作用に相当する力を PE 間で交換し、位置データを交換した分子に加える。相互作用計算に必要な分子データの交換と同様に、この処理では、各 PE は近傍 PE のうち半数とのみデータ交換を行う。ここで交換するのは 3 次元空間での力なので、通信すべき 1 セルあたりのデータ量は $3N_{cell}$ ワードである。

物理量の計算 MD では温度、圧力、エネルギー、各種分布関数などの物理量を計算する。これらを計算するためには、分子 1 個あたりの物理量を計算してから全分子の総和をとる。総和などの集計計算であるため、広域通信を利用して計算することが多い。結果として、この段階で全 PE 間で同期する。

上記のいずれの処理も各 PE は、 N/P の整数倍個の式を処理するため、計算複雑度は $O(N/P)$ である。そのため、本稿で議論する領域分割法を用いた MD シミュレーションの計算複雑度は $O(N/P)$ である。

次に、各処理での通信データ量を議論する。領域分割法ではセルを単位として通信を行うので、セルあたりの通信データ量の評価が必要である。「相互作用計算に必要な分子データの交換」および「反作用の交換」ではセルあたりの通信データ量が決定しており、 $3N_{cell}$ ワードである。一方「分子の再分配」では、セルあたりの通信データ量が不明である。ただし、「分子の再分配」のセルあたりの通信データ量は「相互作用計算に必要な分子データの交換」および「反作用の交換」よりも小さいと考えられる。そこで、議論を簡単にし、通信時間の上限を評価するため、本稿ではいずれの処理でもセルあたりの通信データ量は $3N_{cell}$ ワードであるものとする。次に、分割したセルの PE への割当て法を概観する。

2.3 セルのプロセッサ要素への割当て法

2.3.1 議論の方針

領域分割法では、セルの PE への割当て法には様々な手法がある。本稿ではそのすべてを扱うことはせず、いくつかの基本的な割当て方に限定し、それらの割当て方の中で最適な手法を決定することに重点を置く。セルの PE への割当て法は、各 PE が担当するセルを空間的にまとめるブロック分割法と、空間的に分散してセルを PE に割り当てるサイクリック分割法の 2 種類に大きく分けられる。以降の項では、それぞれの割当て法を議論する。

2.3.2 ブロック分割法

3 次元の領域分割法では、シミュレーションで扱う 3 次元空間を立方体のセルに分割するため、セル間は格子状の隣接関係を持つ。各 PE は複数のセルを担当するが、担当するセルが空間的にまとまっていると、まとまった空間の表面のセルだけを交換すればよいので、通信負荷を小さくすることができる。各 PE に割り当てられたこのセルのまとまりを本稿ではドメインと呼ぶ。通常は、PE に格子状の隣接関係を仮定してドメインを割り当てる。PE の隣接関係として図 3 に示すように 1 次元格子、2 次元格子、3 次元格子を考える。それぞれの格子結合に対して、ドメイン形状は平面ドメイン (plane domain)、四角柱ドメイン (square pillar domain)、立方体ドメイン (cube domain) となる。

各ドメイン形状と PE 数、セル数の関係を表 1 に示す。ここで P を使用する PE 数、 C を全体のセル数とする。実際に並列計算機上で並列シミュレーションを行う際には、PE 数によって C は制限される。 P および C は、表 1 に示す自然数 p および c をパラメータに用いて定める。どのドメインについても、ここで扱う PE 数は $p \geq 3$ で与えられる場合のみを考える。 $p = 3$ では使用する全 PE の間で PE 間通信を行い、 $p \geq 4$ では通信をしない PE の組合せが必ずできる。また、 $p = 2$ に相当する PE 数を用いた実装も可能であるが、通信相手 PE 数や通信量は、後に示す一般式と異なる。

3 種類のドメインは表 1 のように性質が異なり、並列計算機の処理性能や使用 PE 数、シミュレーションの大きさなどによって最適なドメインが異なることが予想される。並列処理においては、計算時間に加えて通信時間を考慮する必要がある。並列 MD シミュレーションの実装に際しては、通信時間と計算時間の大きさの程度を評価し、最適なドメインを使用する必要がある。

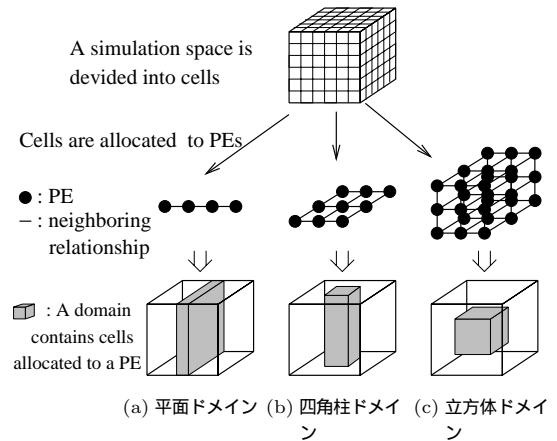


図 3 3 次元 MD シミュレーションの 3 種類のドメイン形状

Fig. 3 Three domain shapes in three-dimensional MD simulation.

表 1 各ドメイン形状の性質

(p と c は自然数である。 p は 1 次元あたりのプロセッサ要素数であり、 c はドメインの大きさを表すパラメータである)

Table 1 Nature of the three domains (p and c are natural numbers and p represents the number of processor elements per dimension and c represents the size of the domain).

ドメイン形状	平面	四角柱	立方体
近傍 PE 数 P_t	2	8	26
使用 PE 数	$P = p$	$P = p^2$	$P = p^3$
セル数	$C = (cP)^3$	$C = (c\sqrt{P})^3$	$C = c^3P$

2.3.3 サイクリック分割法

サイクリック分割法にもいくつかの分割法があるが、最も基本となるのは、 P 個の PE を使用する時、 $\text{mod}(\text{セル番号}, P)$ 番目の PE にそのセルを割り当てる分割法である。この分割法では一般には PE の結合関係には規則性がなく、最悪の場合は各 PE は他のすべての PE とデータを交換する必要がある。しかし、PE 数とセル数の間で一定の条件を満たすと PE 間にトラス結合関係が生じる場合がある。たとえば、 $C^{1/3}$ が P で割り切れる場合、つまり $\text{mod}(C^{1/3}, P) = 0$ である場合は、PE は 1 次元トラス結合の関係を持つ。

$\text{mod}(C^{1/3}, P) = 0$ の条件を満たし、PE が 1 次元トラス結合を持つサイクリック分割法の例を図 4 に示す。図 4 では、 $8^3 = 512$ 個のセルを x 方向に順繰りに 4 PE に割り当てている。このとき、PE は 1 次元トラス結合の関係を持ち、各 PE は 2 PE と結合関係がある。そして、各 PE は、64 個のセルが yz 平面上に並んだものを 2 個担当する。各セルが相互作用を計算すべき 26 近傍のセルのうち、同じ yz 平面上の

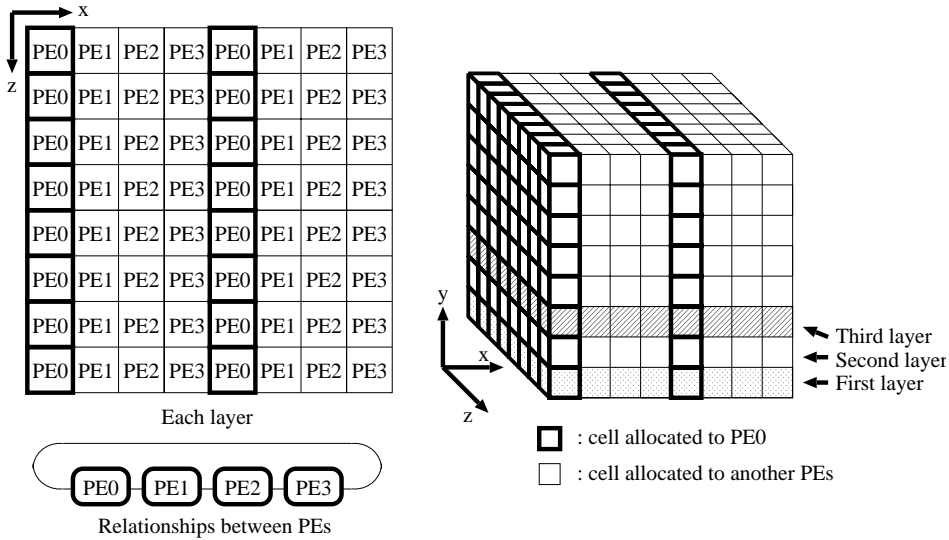


図 4 サイクリック分割法の例
Fig. 4 An example of cyclic distribution strategy.

8 近傍だけが同じ PE のセルであり、残りは近傍 PE が持つセルである。図 4 のようにトラス結合を持つサイクリック分割法では、ある PE の担当するセルの 1 つ 1 つが、近傍 PE の担当するセルと必ず接しているため、各 PE はすべてのセルのデータを近傍 PE と交換する必要がある。

次に、サイクリック分割法の通信時間を議論する。サイクリック分割法では一般にブロック分割法よりも通信回数が多いが、トラス結合の規則性を持つような PE 数とセル数の条件を用いれば、通信回数をブロック結合と同じにすることができる。しかし、ブロック分割法ではドメイン表面のセルだけが他 PE の担当するセルに接触しているのに対して、サイクリック分割法ではある PE の担当する個々のセルが必ず他 PE の担当するセルを近傍に持つ。つまり、サイクリック分割法ではすべてのセルの情報を近傍 PE と交換する必要があるため、1 回の通信で転送する通信量は、各 PE に割り当てられた全セル C/P 分の通信量となる。そのため、同じ物理条件かつ同じサイズの MD シミュレーション実行で同じ PE 数を使用する場合は、サイクリック分割法の通信量はブロック分割法よりも増える。サイクリック分割法は、各 PE の担当するセルがシミュレーション空間中に分散しているために、自動的に静的な計算負荷の平均化を行えることが大きな利点である。本稿では、計算負荷が一樣な場合を扱うため、サイクリック分割法の優位性が出ないので、サイクリック分割法は扱わないこととする。

3. 領域分割の実行時間予測モデル

3.1 モデル化の方針

本稿の目的は、分割法どうしの比較であるため、パラメータをなるべく少なくするように制限を加えて議論する。また、並列計算機にはメモリの形式の観点からは共有メモリ型と分散メモリ型があるが、共有メモリ型であっても代表的なメッセージ通信ライブラリである Message Passing Interface (MPI)¹¹⁾ をサポートしている場合が多いので、本稿では分散メモリ型のプログラムを基本とする。また、近年はゼロコピー通信など、通信の高速化もさかんに行われているが、多くの並列計算機環境を包含するために、本稿ではブロック通信を仮定する。そこで、以下の条件のもとに定式化を行う。

- セル数 C は PE 数 P で割り切れる数とする。
- PE の結合関係は等方性があり、PE 数 P は、十分大きな数とする。すなわち表 1 中の使用 PE 数を満たす数であり、 $P = p^n > P_t$ ($n = 1, 2, 3$) である。
- 並列プログラム中で行う通信は、広域通信と局所通信に分けられ、局所通信は 1 対 1 のメッセージ通信を使用するものとする。
- 全処理時間は次式で表せるものとする。

$$\begin{aligned}
 (\text{全処理時間}) = & (\text{計算時間}) \\
 & + (\text{局所通信時間}) \\
 & + (\text{広域通信時間}) \quad (10)
 \end{aligned}$$

計算時間は計算を行っている時間であり、主に相

相互作用の計算時間である。広域通信は、特に空間全体の物理量を計算する際に必要であり、各 PE の持つ数値の総和、最大値、最小値を求める。局所通信は、粒子の再分配や相互作用計算で使われる。

- 分子のシミュレーション空間中での分布は一様であるものとし、どのセルも計算時間は同じである。次に、式 (10) の各項を議論する。

3.2 計算時間

領域分割法の計算複雑度は $O(N)$ かつ $O(C)$ であり、領域の分割法に依存せず、 C 個のセルを P 個の PE を使用して計算するときの 1 PE あたりの計算負荷は同じである。そのため、計算時間は次式で表せる。

$$\frac{C}{P}T_c. \quad (11)$$

式 (11) で T_c は 1 セルあたりの計算時間である。 T_c は数値積分の方法および相互作用の計算量によって変化する。さらに T_c は、PE の性能、OS、コンパイラ、最適化の程度、そのプログラム開発者のプログラミング技術などの実装・実行環境の影響を受ける。本稿ではシミュレーションを実行するエンドユーザの立場から、計算機の内部構造には立ち入らずに、実装・実行環境の影響も含めて実測値から T_c を外挿する。

3.3 広域通信時間

MD シミュレーションで行う広域通信は、特に空間全体の物理量を計算する際に必要であり、各 PE の持つ数値の総和、最大値、最小値を求める。まず PE ごとに総和などを求め、広域通信によって使用 PE 全体での総和を求める。広域通信については、1 回の通信時間を T_g 、通信回数を G とすれば、シミュレーション中の広域通信時間は

$$GT_g \quad (12)$$

で評価できる。広域通信時間はどのドメインを使用しても同じである。

3.4 局所通信時間

3.4.1 メッセージ通信時間定義式

ここでは、1 回のメッセージ通信に要する全通信時間を次式で定義する。

$$T_s + W_t T_t \quad (13)$$

T_s は通信を開始するための処理を行う時間（通信スタートアップ時間）、 T_t は 1 ワードあたりの転送時間、 W_t は転送ワード数である。本稿ではセルを単位として通信量を評価するので、

$$W_t = (\text{データを交換するセル数})W_{cell} \quad (14)$$

である。ここで、 W_{cell} は 1 セルあたりのワード数である。

3.4.2 直接通信と間接通信

MD で行う局所通信の実装方法には、直接通信と間接通信がある。直接通信では、分子のデータを必要とする相手ノードと直接にメッセージ通信を行う。間接通信は、格子結合の近傍関係を用いて、相手ノードに送るデータを近傍ノードが中継して送る方法である。このとき、相互作用を計算するべき組合せのセルのデータが近傍ノードに集まる場合があるので、その場合は近傍ノードで相互作用計算を行うと、四角柱ドメインと立方体ドメインの通信回数および通信量を最小限にすることができる⁵⁾。ただし、ドメイン表面のセル、ドメイン内部のセル、および他 PE に所属するセルの 3 種類に分けた相互作用計算手順が必要であるため、実装が複雑になることが欠点である。いずれの実装法を用いた場合でも通信量は同程度であり、間接通信の利点は通信回数を削減できることである。本稿では文献 5) の手法は採用せず、各セルの相互作用計算はそのセルを含むドメインを割り当てた PE 上で必ず行うものとして、間接通信の通信時間を導出する。

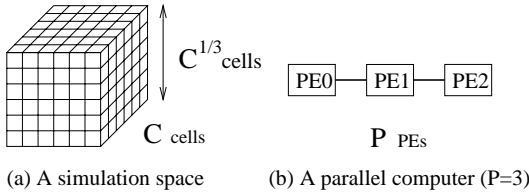
3.4.3 全周囲通信と半周囲通信

2.2.3 項で述べたように、領域分割法のメッセージ通信では結合関係にあるすべての PE と行う通信（全周囲通信）と、結合関係にある PE の半分と行う通信（半周囲通信）がある。全周囲通信は分子の再分配で行い、半周囲通信は、相互作用計算に必要な分子データを交換するときと、分子間相互作用を計算した後で反作用を交換するときに行う。直接通信では、(全周囲通信時間) = 2(半周囲通信時間) であるが、間接通信では、通信をまとめることによって全周囲通信は 2 回の半周囲通信よりも通信回数と通信量を削減できるので、(全周囲通信時間) \leq 2(半周囲通信時間) である。本稿では議論を簡単にするため、間接通信での全周囲通信は半周囲通信を 2 回行うものとして、間接通信の通信時間を導出する。以下で導出する通信時間は全周囲通信 1 回分（間接通信の場合は半周囲通信 2 回分）の通信時間である。

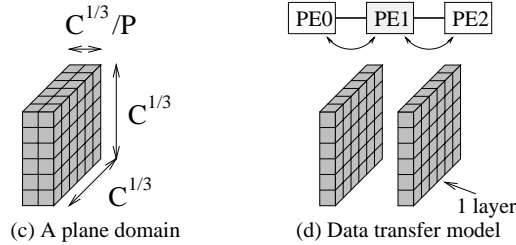
3.4.4 各ドメイン形状の局所通信時間

平面ドメイン

図 5 に平面ドメインを用いる場合の全周囲通信手順を示す。平面ドメインでは、シミュレーション空間が図 5(a) のように C 個のセルに分割されて図 5(b) に示す P 個の PE に割り当てられるとき、各ドメインは図 5(c) に示した形状になる。各 PE は、近傍の 2 PE と 1 層分のセルのデータを交換する。たとえば図 5 中の PE1 は、図 5(d) に示すように、1 層の $C^{1/3} \times C^{1/3}$ セル分のデータを PE0 と PE2 との間で交換する。そ



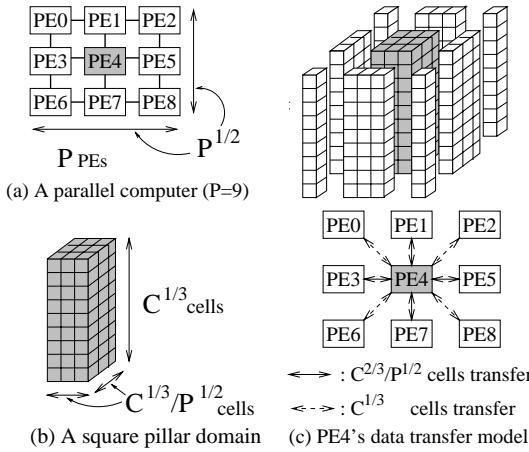
(a) A simulation space (b) A parallel computer (P=3)



(c) A plane domain (d) Data transfer model

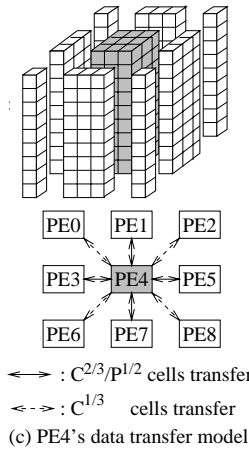
図 5 平面ドメインの局所通信手順

Fig. 5 Procedures for local communication with plane domain.



(a) A parallel computer (P=9)

(b) A square pillar domain



(c) PE4's data transfer model

図 6 直接通信を用いた四角柱ドメインの局所通信手順

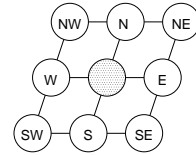
Fig. 6 Procedures for direct local communication with square pillar domain.

のため、平面ドメインの通信時間 T_m^p は次式で表せる。

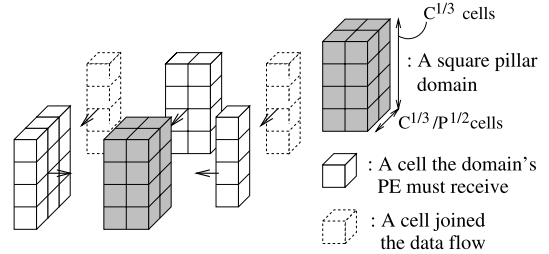
$$T_m^p = 2T_s + 2C^{2/3}W_{cell}T_t. \quad (15)$$

四角柱ドメイン（直接通信）

図 6 に、四角柱ドメインおよび直接通信を使用する場合の局所通信手順を示す。四角柱ドメインを用いて、図 6(a) のような並列計算機が C 個のセルを扱う際には、ドメインは図 6(b) のような形になる。このとき図 6(c) に示すように、PE4 は $C^{2/3}/P^{1/2}$ セルを PE1, PE3, PE5, PE7 と交換し、 $C^{1/3}$ セルを PE0, PE2, PE6, PE8 と交換する。そのため、四角柱ドメインの通信時間の通信時間 T_m^{s-d} は次式で表せる。



(a) 着目する PE と、その PE にセルを送る PE との関係 (a) Relationships among a PE and its neighboring PEs.



Path	Communication directions	Number of cells to be transferred
1.	↙ backward	$C^{2/3}/P^{1/2}$
2.	→ right	$(C^{1/3}/P^{1/2}+1)C^{1/3}$
3.	← left	$C^{1/3}$

(b) セル移動の模式図（半周囲通信） (b) An illustration of half-neighbor data exchange.

図 7 間接通信を用いた四角柱ドメインの局所通信手順 Fig. 7 Procedures for indirect local communication with square pillar domain.

$$T_m^{s-d} = 8T_s + 4\left(\frac{C^{2/3}}{\sqrt{P}} + C^{1/3}\right)W_{cell}T_t. \quad (16)$$

四角柱ドメイン（間接通信）

図 7 に四角柱ドメインおよび間接通信を用いる場合の局所通信手順の一例を示す。ここで注目する PE とその近傍の PE との関係を図 7(a) に、図 7(b) に間接通信の模式図を示す。3.4.3 項で述べたように、本稿では半周囲通信を基本として扱い、全周囲通信は半周囲通信を 2 回行うものとするため、図 7(b) では半周囲通信の手順を示す。今着目する PE は図 7(a) の中央の PE であり、近傍の 8 PE を東西南北（図 7(a) 中では W, E, S, N）の方角で表現する。四角柱ドメインを用いる場合、間接通信では 3 回の通信パスで 3 個の PE とのみ通信を行って半周囲通信が可能である。以下に半周囲通信の手順を述べる。

パス 1 PE は PE-N からドメインが境界面で接触しているセルを受け取る。
 パス 2 PE は PE-W からドメインの接触しているセルを受け取る。このとき、パス 1 で PE-W が PE-NW から受け取ったセルの一部をあわせて PE-W から受け取る。そのセルは、図 7(b) 中左上の点線で描いたセルであり、着目している PE のドメ

表 2 間接通信を用いた四角柱ドメインの局所通信の内容と通信量 (半周囲通信)
 Table 2 The number of cells and the PE assigned the cells ordinary in indirect local communication with half-neighbor square pillar domain.

バス	通信相手	直接送られたセル数	仲介して送られたセル		
			セル数	元の PE	元の PE から通信相手 PE までの移動経路
1	N	$C^{2/3}/P^{1/2}$	0		
2	W	$C^{2/3}/P^{1/2}$	$C^{1/3}$	NW	NW→W (バス 1)
3	E	0	$C^{1/3}$	NE	NE→E (バス 1)

インの角が接触するセルである。

パス 3 PE は PE-E からセルを受け取るが、これは PE-E がもともと持っているセルではなく、パス 1 で PE-NE から PE-E に送られたセルの一部である。これらのセルも、ドメインの角の部分が接触しているセルであり、図 7 (b) 中右上の点線で描いたセルである。

これまで述べた、各通信バスでの通信相手、データを交換するセル数、セルの移動経路を表 2 にまとめた。表 2 中の「直接送られたセル数」と「仲介して送られたセル」の「セル数」の総和が図 7 (b) 中のセル数である。図 7 (b) から得られる半周囲通信の通信回数と通信量を 2 倍することにより、間接通信による四角柱ドメインの局所通信時間 T_m^{s-i} は次のように定式化できる。

$$T_m^{s-i} = 6T_s + 4 \left(\frac{C^{2/3}}{\sqrt{P}} + C^{1/3} \right) \times W_{cell} T_t. \tag{17}$$

立方体ドメイン (直接通信)

図 8 に立方体ドメインおよび直接通信を使用した場合の局所通信手順を示す。C セルのシミュレーション空間において立方体ドメインを使用するときは、図 8 (a) のように結合している各 PE は、図 8 (b) に示した形状の立方体ドメインを持つ。各 PE は図 8 (c) に示すように、 $C^{2/3}/P^{2/3}$ セルを 6 ノードと交換し、 $C^{1/3}/P^{1/3}$ セルを 12 ノードと交換し、1 セルを 8 ノードと交換する。このことから、立方体ドメインを使用したときの通信時間 T_m^{c-d} は次式で表せる。

$$T_m^{c-d} = 26T_s + \left(6 \left(\frac{C}{P} \right)^{2/3} + 12 \left(\frac{C}{P} \right)^{1/3} + 8 \right) \times W_{cell} T_t. \tag{18}$$

立方体ドメイン (間接通信)

図 9 に立方体ドメインおよび間接通信を用いる場合の局所通信手順の一例を示す。ここで注目する PE とその近傍の PE との関係を図 9 (a) に、図 9 (b) に間接通信の模式図を示す。そして、各通信バスでの通信相手、データを交換するセル数、セルの移動経路を表 3 にまとめた。四角柱ドメインの間接通信と同様

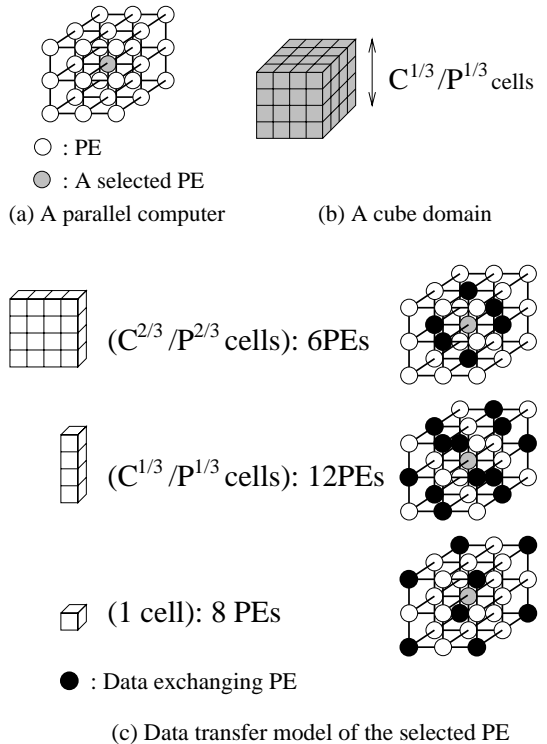


図 8 直接通信を用いた立方体ドメインの局所通信手順
 Fig. 8 Procedures for direct local communication with cube domain.

に、表 3 中の「直接送られたセル数」と「仲介して送られたセル」の「セル数」の総和が図 9 (b) 中のセル数である。

3.4.3 項で述べたように、本稿では全周囲通信は半周囲通信を 2 回行うものとするため、図 9 (b) では半周囲通信の手順を示す。今着目する PE は図 9 (a) 下層の中央の PE であり、四角柱ドメインと同様に、近傍の 8 PE を東西南北 (図 9 (a) 中では W, E, S, N) の方角で表現する。立方体ドメインでは、PE が 3 次元トラス結合なので、半周囲通信では、注目する PE を含む層の 1 つ上の層または 1 つ下の層の PE とも通信する。図 9 の半周囲通信では注目する PE を含む層と 1 つ上の層で通信をするものとする。注目する PE

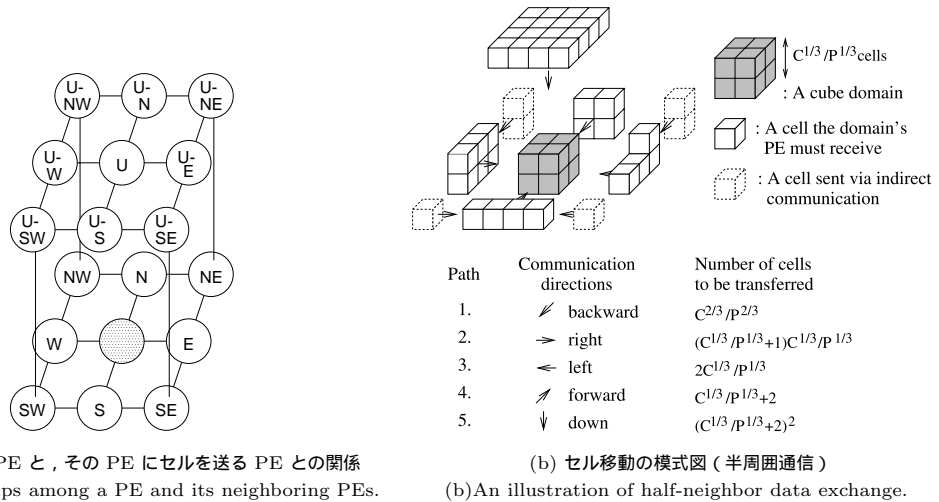


図 9 間接通信を用いた立方体ドメインの局所通信手順
 Fig. 9 Procedures for indirect local communication with cube domain.

表 3 間接通信を用いた立方体ドメインの局所通信の内容と通信量 (半周囲通信)
 Table 3 The number of cells and the PE assigned the cells ordinary in indirect local communication with half-neighbor cube domain.

パス	通信相手 PE	直接送られたセル数	仲介して送られたセル		
			セル数	元の PE	元の PE から通信相手 PE までの移動経路
1	N	$C^{2/3}/P^{2/3}$	0		
2	W	$C^{2/3}/P^{2/3}$	$C^{1/3}/P^{1/3}$	NW	NW→W (パス 1)
3	E	$C^{1/3}/P^{1/3}$	$C^{1/3}/P^{1/3}$	NE	NE→E (パス 1)
4	S	$C^{1/3}/P^{1/3}$	1	SW	SW→S (パス 2)
			1	SE	SE→S (パス 3)
5	U	$C^{2/3}/P^{2/3}$	$C^{1/3}/P^{1/3}$	U-N	U-N → U (パス 1)
			$C^{1/3}/P^{1/3}$	U-W	U-W → U (パス 2)
			$C^{1/3}/P^{1/3}$	U-E	U-E → U (パス 3)
			$C^{1/3}/P^{1/3}$	U-S	U-S → U (パス 4)
			1	U-NW	U-NW→U-W (パス 1), U-W → U (パス 2)
			1	U-NE	U-NE→U-E (パス 1), U-E → U (パス 3)
			1	U-SW	U-SW→U-S (パス 2), U-S → U (パス 4)
			1	U-SE	U-NE→U-S (パス 3), U-S → U (パス 4)

の直上の PE は「U」とし、その近傍 PE は方角の前に U-をつけて表すものとする。なお、図 9(a) では、図が繁雑になるので U と中央の PE、U-N と N、U-E と E、U-W と W、U-S と S の結合を省略した。

立方体ドメインを用いる場合、間接通信では 5 回の通信パスで 5 個の PE とのみ通信を行って近傍 PE のうち半分とデータを交換する半周囲通信が可能である。この半周囲通信手順を述べる。

パス 1 PE は PE-N からドメインが境界面で接触しているセルを受け取る。

パス 2 PE は PE-W からドメインが境界面で接触しているセルを受け取る。このとき、パス 1 で PE-W が PE-NW から受け取ったセルの一部を

あわせて PE-W から受け取る。それらのセルは、図 9(b) 中左上の点線で描いたセルであり、着目している PE のドメインの辺が接触するセルである。

パス 3 PE は PE-E からセルを受け取るが、パス 2 と同様に、PE-E が持っているセルに加えてパス 1 で PE-NE から PE-E に送られたセルのうち、着目しているドメインの辺が接触しているセル (図 9(b) 中右上の点線で描いたセル) を送る。また、パス 3 で PE-E から直接受け取るセルは、着目している PE が計算に使うセルではなく、下層の PE が計算に必要とするため、着目している PE が仲介して下層の PE に送るセルである。

表 4 各ドメイン形状の局所通信時間の理論式
Table 4 Theoretical formulae of local communication with domain decomposition method.

ドメイン形状	直接通信による通信時間	間接通信による通信時間
平面ドメイン	$T_m^p = 2T_s + 2C^{2/3}W_{cell}T_t$ (15)	(なし)
四角柱ドメイン	$T_m^{s-d} = 8T_s + 4\left(\frac{C^{2/3}}{\sqrt{P}} + C^{1/3}\right)W_{cell}T_t$ (16)	$T_m^{s-i} = 6T_s + 4\left(\frac{C^{2/3}}{\sqrt{P}} + C^{1/3}\right)W_{cell}T_t$ (17)
立方体ドメイン	$T_m^{c-d} = 26T_s + \left(6\left(\frac{C}{P}\right)^{2/3} + 12\left(\frac{C}{P}\right)^{1/3} + 8\right)W_{cell}T_t$ (18)	$T_m^{c-i} = 10T_s + \left(6\left(\frac{C}{P}\right)^{2/3} + 16\left(\frac{C}{P}\right)^{1/3} + 12\right)W_{cell}T_t$ (19)

パス 4 PE は PE-S からセルを受け取るが、これらのセルはすべて、自分では使わず、下層 PE に送るセルである。パス 4 でも、以前のパスで PE-SW および PE-SE から PE-S が受け取ったセルをあわせて受け取るが、これは下層 PE のドメインが頂点で接触しているセルである。パス 4 で PE-SW から受け取るセルは、図 9 (b) 中左下の点線で描いたセルであり、PE-SE から受け取るセルは、図 9 (b) 中右下の点線で描いたセルである。パス 5 PE は PE-U から、ドメインの上面を構成しているセルが面、辺、頂点で接触しているすべてのセルを受け取る。これらのセルは、以前のパスで PE U が U-N, U-W, U-E, U-S から受け取ったセルである。

図 9 (b) で得られる通信回数と通信量を 2 倍して、間接通信による立方体ドメインの局所通信時間 T_m^{c-i} は次のように定式化できる。

$$T_m^{c-i} = 10T_s + \left(6\left(\frac{C}{P}\right)^{2/3} + 16\left(\frac{C}{P}\right)^{1/3} + 12\right) \times W_{cell}T_t. \quad (19)$$

3.5 最適分割法の決定

3.5.1 総実行時間

最適なドメイン形状を決定するため、シミュレーションの 1 タイムステップあたりの実行時間 T_{ex} を推測する。局所通信、広域通信、計算時間を考慮して、 T_{ex} は次式で表せる。

$$T_{ex} = 2T_m + GT_g + \frac{C}{P}T_c. \quad (20)$$

ここで局所通信は、図 2 中の局所通信を行う各手順ごとに、以下のように評価した。

分子の再分配：全周囲通信, T_m

分子のデータ交換：半周囲通信, $T_m/2$

反作用交換：半周囲通信, $T_m/2$

この T_m には、使用するドメイン形状（平面ドメイン、四角柱ドメイン、立方体ドメイン）、使用する通

信形態（直接通信、間接通信）に応じて、3.4.4 項で得た $T_m^p, T_m^{s-d}, T_m^{s-i}, T_m^{c-d}, T_m^{c-i}$ を代入すればよい。式 (15) から式 (19) の右辺を表 4 にまとめて示した。式 (20) では、 T_m の項のみが分割法に依存して変化する。そのため、 $T_m^p, T_m^{s-d}, T_m^{s-i}, T_m^{c-d}, T_m^{c-i}$ のうちで最小値が得られる分割法が、最適な分割法である。そして、表 4 の式の差分から、各ドメイン形状が最適となるシミュレーション条件を予測することができる。

3.5.2 直接通信での最適ドメイン形状

前項で得られた各ドメイン形状の通信時間を比較し、各ドメイン形状が最適となる条件を明らかにする。 $f_1(C, P)$ を直接通信での四角柱ドメインの局所通信時間 T_m^{s-d} と平面ドメインの局所通信時間 T_m^p の差とする。 $f_1(C, P)$ は $C^{1/3}$ の二次式と見なすことができるので、次のように因数分解できる。

$$f_1(C, P) = T_m^p - T_m^{s-d}, \\ = a_1(C^{1/3} - \alpha_1)(C^{1/3} - \beta_1). \quad (21)$$

$\beta_1 \leq \alpha_1$ とし、 a_1, α_1 , および β_1 を表 5 に示す。 $f_1(C, P) < 0$ のとき、 $T_m^p < T_m^{s-d}$ であることから、平面ドメインは四角柱ドメインよりも通信時間を小さくできる。 $f_1(C, P) < 0$ となるのは $\beta_1 < C^{1/3} < \alpha_1$ の範囲であるが、 β_1 は負であり、定義から $0 < C^{1/3}$ なので $f_1(C, P) < 0$ となる範囲は $0 < C^{1/3} < \alpha_1$ である。一方 $f_1(C, P) > 0$ のとき、 $T_m^p > T_m^{s-d}$ であることから、四角柱ドメインは平面ドメインよりも通信時間を小さくできる。 $f_1(C, P) > 0$ となるのは $C^{1/3} < \beta_1$ または $\alpha_1 < C^{1/3}$ の範囲であるが、 $\beta_1 < 0$ および $0 < C^{1/3}$ より、 $f_1(C, P) > 0$ となる範囲は $\alpha_1 < C^{1/3}$ である。

$f_2(C, P)$ を立方体ドメインの局所通信時間 T_m^{c-d} と四角柱ドメインの局所通信時間 T_m^{s-d} の差 $T_m^{c-d} - T_m^{s-d}$, $f_3(C, P)$ を平面ドメインと立方体ドメインとの局所通信時間の差 $T_m^{c-d} - T_m^p$ とする。これらは

表 5 直接通信による通信時間の因数分解結果
($\lambda = T_s/(W_{cell}T_t) > 0$)

Table 5 Factorized communication time for direct communication ($\lambda = T_s/(W_{cell}T_t) > 0$).

$f_1(C, P)$, $P \geq 9$	$f_1(C, P) = a_1(C^{1/3} - \alpha_1)(C^{1/3} - \beta_1)$ $a_1 = 2\left(1 - 2/\sqrt{P}\right)W_{cell}T_t > 0$
	$\alpha_1 = \frac{1+\sqrt{D_1}}{1-2/\sqrt{P}} > 0$ $\beta_1 = \frac{1-\sqrt{D_1}}{1-2/\sqrt{P}} < 0$ $D_1 = 1 + 3\lambda(1 - 2/\sqrt{P}) > 1$
$f_2(C, P)$, $P \geq 27$	$f_2(C, P) = a_2(C^{1/3} - \alpha_2)(C^{1/3} - \beta_2)$ $a_2 = 2(2P^{1/6} - 3)W_{cell}T_t/P^{2/3} > 0$
	$\alpha_2 = \frac{-(P^{1/3}-3)+\sqrt{D_2}}{2P^{1/6}-3} P^{1/3} > 0$ $\beta_2 = \frac{-(P^{1/3}-3)-\sqrt{D_2}}{2P^{1/6}-3} P^{1/3} < 0$ $D_2 = (P^{1/3} - 3)^2 + (4 + 9\lambda)(2P^{1/6} - 3) > 0$
$f_3(C, P)$, $P \geq 27$	$f_3(C, P) = a_3(C^{1/3} - \alpha_3)(C^{1/3} - \beta_3)$ $a_3 = -2(P^{2/3} - 3)W_{cell}T_t/P^{2/3} < 0$
	$\alpha_3 = \frac{3+\sqrt{D_3}}{P^{2/3}-3} P^{1/3} > 0$ $\beta_3 = \frac{3-\sqrt{D_3}}{P^{2/3}-3} P^{1/3} < 0$ $D_3 = 9 + 4(1 + 3\lambda)(P^{2/3} - 3) > 9$

$f_1(C, P)$ と同様にして、次のように因数分解できる。

$$\begin{aligned} f_2(C, P) &= T_m^{s-d} - T_m^{c-d}, \\ &= a_2(C^{1/3} - \alpha_2)(C^{1/3} - \beta_2), \quad (22) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f_3(C, P) &= T_m^{c-d} - T_m^p, \\ &= a_3(C^{1/3} - \alpha_3)(C^{1/3} - \beta_3). \quad (23) \end{aligned}$$

ただし $\beta_2 \leq \alpha_2, \beta_3 \leq \alpha_3$ とする。 $f_2(C, P), f_3(C, P)$ の因数分解の結果を表 5 に示す。ここで α_2 および α_3 はつねに正であり、 β_2 および β_3 はつねに負である。 $f_1(C, P)$ と同様にして、 $f_2(C, P)$ と $f_3(C, P)$ の符号の議論から各ドメインの通信時間の比較ができる。 $f_1(C, P), f_2(C, P)$ と $f_3(C, P)$ の因数分解結果から、各ドメイン形状の最適範囲を決定することができる。たとえば、 $f_1(C, P)$ によって平面ドメインが四角柱ドメインよりも局所通信時間を小さくできる範囲が分かり、 $f_3(C, P)$ によって平面ドメインが立方体ドメインよりも通信時間を小さくできる範囲が分かるので、この 2 つの範囲を同時に満たす範囲が平面ドメインの最適範囲である。この手順を用いて得られる 3 つのドメイン形状の最適範囲を次に示す。

表 6 CM-5 のパラメータ

Table 6 Parallel computational parameter for CM-5.

通信スタートアップ時間	T_s	1.21×10^{-3} 秒
データ転送時間	T_t	3.23×10^{-6} 秒 /word
広域通信	T_g	0.00 秒 (測定不能)
1 セルあたりの計算時間	T_c	0.586 秒

平面ドメイン $0 < C^{1/3} < \alpha_1$ かつ $0 < C^{1/3} < \alpha_3$
 四角柱ドメイン $\alpha_1 < C^{1/3}$ かつ $0 < C^{1/3} < \alpha_2$
 立方体ドメイン $\alpha_2 < C^{1/3}$ かつ $\alpha_3 < C^{1/3}$

次に、 α_1, α_2 および α_3 の内容を議論する。表 5 中の α_1, α_2 および α_3 の数式を見ると、 α_1, α_2 および α_3 の変数は T_s, T_t, W_{cell}, P である。このうち W_{cell} は 1 セルあたりのワード数であって、MD シミュレーションの物理条件によって決まり、本稿の場合は $W_{cell} = 30$ である。 T_s と T_t は使用する計算機環境によって決まる。すなわち、 T_s と T_t を決定すると α_1, α_2 および α_3 は P のみに依存し、使用する並列処理環境での各ドメイン形状の最適範囲が $P - C^{1/3}$ 空間で得られることが分かる。

α_1, α_2 および α_3 に通信パラメータの数値を代入し、並列計算機 CM-5 で直接通信を使用した場合のドメイン形状の最適範囲を明らかにする。表 6 に CM-5 の通信パラメータ T_s と T_t 、および広域通信パラメータ T_g と 1 セルあたりの計算時間 T_c を示す。表 6 の通信パラメータ T_s と T_t の数値を代入し、 α_1, α_2 および α_3 を $P - C^{1/3}$ 空間上での曲線 $C^{1/3} = \alpha_1, C^{1/3} = \alpha_2, C^{1/3} = \alpha_3$ として表した図を図 10 (a) に示す。さらに、 $P - C^{1/3}$ 空間上での各ドメインの実装可能範囲を図 10 (b) に示す。これら 2 つの図を合成すると、各ドメインの最適範囲である図 11 が得られる。

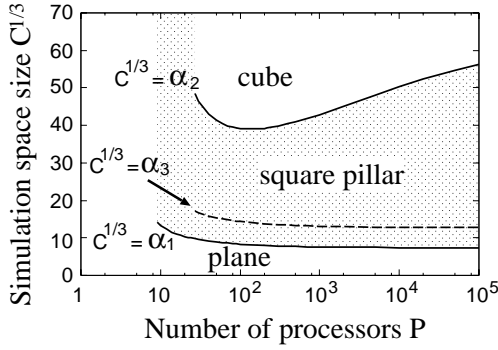
図 11 に直接通信を使用する場合の最適ドメイン形状の範囲を示す。図 11 中の各ドメインの領域は以下の 2 種類の領域を含む。

- そのドメイン形状だけが実装可能な領域
- 複数のドメイン形状が可能であり、そのドメイン形状が最適である領域

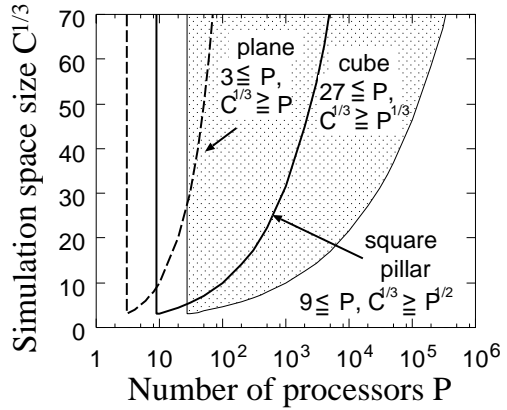
図 11 によると、平面ドメインは、小規模の並列計算機を利用する際に最適であり、四角柱ドメインは中規模の並列計算機上で中規模のシミュレーションを行う際に最適であることが分かる。また、立方体ドメインは超並列計算機上で大規模シミュレーションに適していることが分かる。

3.5.3 間接通信での最適ドメイン形状

平面ドメインの局所通信時間式と四角柱ドメインおよび立方体ドメインの間接通信による局所通信時間式



(a) CM-5 の通信パラメータから求めた $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ (直接通信, $W_{cell} = 30$)
 (a) $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ estimated from communication parameters on CM-5 (direct communication, $W_{cell} = 30$)



(b) 各ドメイン形状の実装可能な範囲
 (b) Available range for each domain shape.

図 10 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ と各ドメインの実装可能範囲

Fig. 10 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ and available area for each type of domain.

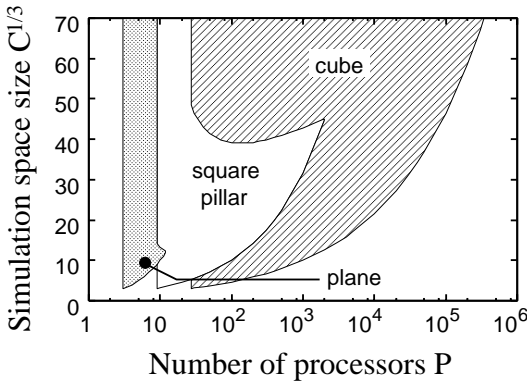


図 11 CM-5 上での各ドメイン形状の最適範囲 (直接通信, $W_{cell} = 30$)
 Fig. 11 Optimal area for each shape of domain on CM-5 (direct communication, $W_{cell} = 30$).

を用いて、間接通信による通信時間についても直接通信と同様に通信時間差 $f_1^i(C, P), f_2^i(C, P), f_3^i(C, P)$ を定義できる。なお、間接通信での式や定数には、直接通信との区別のため上付き添字「 i 」を付けるものとする。間接通信の $f_1^i(C, P), f_2^i(C, P), f_3^i(C, P)$ を因数分解した結果を表 7 に示す。間接通信においても α_1^i, α_2^i および α_3^i はつねに正であり、 β_1^i, β_2^i および β_3^i はつねに負である。そして直接通信と同様に $\alpha_1^i, \alpha_2^i, \alpha_3^i$ を用いて各ドメインの最適範囲が得られる。
 平面ドメイン $0 < C^{1/3} < \alpha_1^i$ かつ $0 < C^{1/3} < \alpha_3^i$
 四角柱ドメイン $\alpha_1^i < C^{1/3}$ かつ $0 < C^{1/3} < \alpha_2^i$
 立方体ドメイン $\alpha_2^i < C^{1/3}$ かつ $\alpha_3^i < C^{1/3}$

間接通信についても、直接通信と同様に最適ドメインの範囲を求め、図 12 に示す。図 12 によると、間接通信を使用する場合においても直接通信の場合と同様

表 7 間接通信による通信時間の因数分解結果

$$(\lambda = T_s / (W_{cell} T_t) > 0)$$

Table 7 Factorized communication time for indirect communication ($\lambda = T_s / (W_{cell} T_t) > 0$).

$f_1^i(C, P),$	$\alpha_1^i = \frac{1 + \sqrt{D_1^i}}{1 - 2/\sqrt{P}} > 0$
$P \geq 9$	$\beta_1^i = \frac{1 - \sqrt{D_1^i}}{1 - 2/\sqrt{P}} < 0$
	$D_1^i = 1 + 2\lambda(1 - 2/\sqrt{P}) > 1$
$f_2^i(C, P),$	$\alpha_2^i = \frac{-(P^{1/3} - 4) + \sqrt{D_2^i}}{2P^{1/6} - 3} P^{1/3} > 0$
$P \geq 27$	$\beta_2^i = \frac{-(P^{1/3} - 4) - \sqrt{D_2^i}}{2P^{1/6} - 3} P^{1/3} < 0$
	$D_2^i = (P^{1/3} - 4)^2 + 2(3 + \lambda)(2P^{1/6} - 3) > 0$
$f_3^i(C, P),$	$\alpha_3^i = \frac{4 + \sqrt{D_3^i}}{P^{2/3} - 3} P^{1/3} > 0$
$P \geq 27$	$\beta_3^i = \frac{4 - \sqrt{D_3^i}}{P^{2/3} - 3} P^{1/3} < 0$
	$D_3^i = 16 + 2(3 + 2\lambda)(P^{2/3} - 3) > 16$

に立方体ドメインが超並列計算機上での大規模シミュレーションに適し、四角柱ドメインは中規模の並列計算機上で中規模のシミュレーションを行う際に最適である。

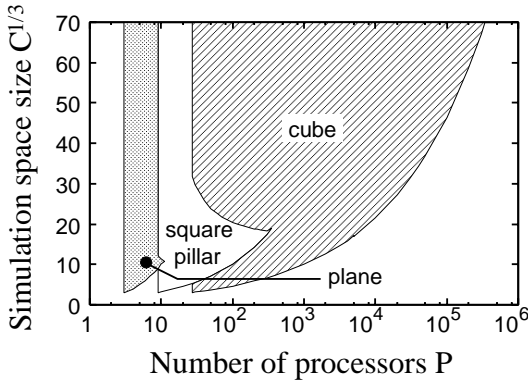


図 12 CM-5 上での各ドメイン形状の最適範囲 (間接通信, $W_{cell} = 30$)

Fig. 12 Optimal area for each shape of domain on CM-5 (indirect communication, $W_{cell} = 30$).

3.5.4 直接通信と間接通信の比較

直接通信の局所通信時間式と間接通信の局所通信時間式を比較する。式 (16) と式 (17) によると、四角柱ドメインでは通信スタートアップ時間を削減でき、通信量は間接通信と直接通信で同じである。そのため四角柱ドメインではつねに間接通信が通信時間を削減できる。立方体ドメインでは、式 (18) と式 (19) のそれぞれの第 1 項を比較すると、間接通信によって通信スタートアップ時間を半分以下に削減できることが分かる。一方、式 (18) と式 (19) のそれぞれの第 2 項によると間接通信によって通信量が増大する。(18) - (19) > 0 の場合に間接通信によって通信時間を削減可能であることから、次式が得られる。

$$\frac{4T_s}{W_{cell}T_t} - 1 > \left(\frac{C}{P}\right)^{1/3}. \quad (24)$$

式 (24) は、間接通信によって通信時間を削減可能な立方体ドメインの大きさの範囲を示す。ここで、 $W_{cell} = \rho^* r_c^3$, $\rho^* \leq 1.41$ であることから $W_{cell} \leq 22$ ($r_c^* = 2.5$) または $W_{cell} \leq 60$ ($r_c^* = 3.5$) である。たとえば並列計算機 CM-5 では、表 6 から分かるように $T_s/T_t \simeq 300$ である。そのため $r_c^* = 3.5$ の場合でも $19 \geq (C/P)^{1/3}$ の範囲で間接通信の方が通信時間を小さくできる。つまり、かなり大きいサイズのドメインまで間接通信の方が通信時間を小さくでき、多くの並列 MD シミュレーションはこの条件を満たすので、CM-5 上では、多くの場合に間接通信によって通信時間を削減可能である。

間接通信は、直接通信に比較して通信スタートアップ時間を削減できるため、立方体ドメインでは、より小さいシミュレーション空間サイズの方に最適範囲が広がることが予想される。実際に図 11 と図 12 を比

較すると、立方体ドメインと四角柱ドメインの最適範囲の境界が $P - C^{1/3}$ 空間中で下方に移動して、立方体ドメインの最適範囲は、より小さいシミュレーション空間サイズの方に広がっている。

4. メッセージ通信型計算機上の最適ドメイン形状

4.1 並列計算機環境

本稿では、2 種類の並列計算機 CM-5 と T3E で最適ドメイン形状を評価した結果を示す。以下は各計算機の概要である。

CM-5 の概要

CM-5 は 64 PE を持つ並列計算機で、PE に SPARC microprocessor (浮動小数点演算ユニット, 32 MHz, 22 MIPS, 4.2 MFLOPS) を使用し、1 PE に 4 基のベクトルユニット (1 基あたり 16 MHz, 32 MFLOPS) を持つ分散メモリ型計算機で、理論最大性能は 8 GFLOPS である。結合網は fat tree であり、各 PE は tree の葉にあたる。そのため任意の 2 PE 間で、PE による中継をしないで通信することができる。ここでは FORTRAN の並列拡張言語 CM Fortran に CMMD メッセージ通信ライブラリを併用し、MIMD 型処理を行った。本稿では CMMD のタイマ関数を用いて処理時間を測定し、その busy 時間を CM-5 上での処理時間の実測値としている。

T3E の概要

T3E は 128 ノードを持ち、PE に DECchip 21164 (300 MHz, 600 MFLOPS, 1200 MIPS) を使用した分散メモリ型計算機である。DECchip 21164 はそれぞれ 8 KB のデータキャッシュと命令キャッシュ、および 96 KB の 2 次キャッシュを持つ。結合網は 3 次元トラス型であり、通信性能はノードあたり実効 2.8 GB/second である。プログラムには、FORTRAN90 にメッセージ通信ライブラリ MPI (Message-Passing Interface) を併用し、MIMD 型処理を行った。本稿で用いる T3E の実行時間は、MPI の MPLWTIME 関数を使用して計測した。

T3E の通信パラメータを表 8 に、最適ドメイン範囲を図 13 に示す。T3E では T_s は T_t の 300 倍程度であり、CM-5 の T_s と T_t の割合と同程度である。そのため、T3E 上の最適ドメイン範囲は CM-5 と同様である。本稿では基本的な性能評価を CM-5 で行い、T3E での結果は、CM-5 の結果が他の計算機でも適用できることを確認するために検討する。そのため、T3E の通信パラメータは局所通信に関するもののみを示し、理論予測と実測との比較結果も直接通信に関

表 8 T3E の通信パラメータ

Table 8 Communication parameter value on T3E.

通信スタートアップ時間	T_s	5.79×10^{-5} 秒
データ転送時間	T_t	1.72×10^{-7} 秒/word

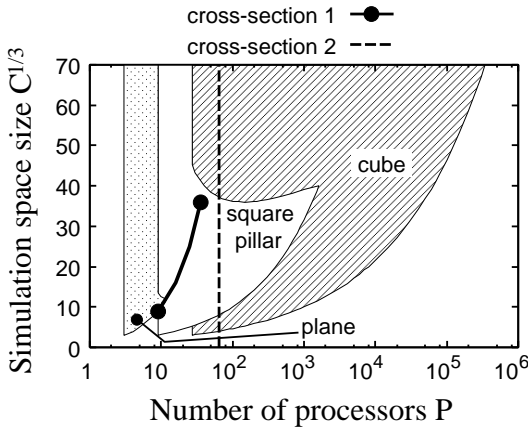


図 13 T3E 上での各ドメイン形状の最適範囲および最適ドメイン形状を確認するための 2 つの断面 (直接通信, $W_{cell} = 30$)
 Fig. 13 Optimal area for each shape of domain on T3E and two cross sections for comparing theoretical optimum and experimental optimum (direct communication, $W_{cell} = 30$).

するもののみを示した。

4.2 シミュレーション条件

シミュレーションの物理条件は, PE ごとの計算負荷を均等に近づけるという観点から, 参考文献 1) で用いられているものうち高温の条件を用いた。無次元化温度 $T_{ref}^* = 2.53$ および無次元化密度 $\rho^* = 0.636$ である。距離は, 分子の直径を単位として無次元化でき, 力の切断距離は $r_c^* = 2.5$ とした。このとき $N_{cell} = r_c^{*3} \rho^* \approx 10$ より $W_{cell} = 3N_{cell} = 30$ である。レナード・ジョーンズポテンシャルの定数にはアルゴンの数値を用いた。系は分子の数 N , 体積 V , エネルギー E を一定に保ち, 温度は 50 タイムステップごとに T_{ref}^* に補正する。数値積分にはベルレの速度形式¹⁾を使用した。積分の微小時間 Δt を 0.064 とする。格子点上に分子を配置し, 初期位置とする。このときセルに含まれる分子の数は均等ではないが, シミュレーションが進むに従って, セルに含まれる分子の数は均等に近づく。

4.3 最適ドメイン形状決定法の CM-5 上での性能評価

最適ドメイン形状の決定法を評価するため, 図 11 および図 12 中にそれぞれ 2 つの断面をとり, これらの断面上で 2 つのドメイン形状を用いた通信時間 T_m

を CM-5 上で計測し, 比較した。使用した断面は図 14 に示した。表 6 を検討した結果, CM-5 上では T_c が T_s と T_t よりも大きく, MD シミュレーションのプログラムを用いた通信時間の計測は困難であった。そのため T_m を計測するために局所通信のみを行うプログラムを用いた。

断面 1: 平面ドメインと四角柱ドメインの比較

直接通信 平面ドメインと四角柱ドメインを比較するため, 図 14(a) 中の断面 cross-section 1 上で T_m を計測した結果を図 15(a) に示す。図 14(a) によると, 2 つのドメインの最適領域の境界は, 点 ($P = 9, C^{1/3} = 9$) と ($P = 16, C^{1/3} = 16$) の間にある。図 15(a) によると四角柱ドメインは図 14(a) と同様に, P と $C^{1/3}$ が点 ($P = 16, C^{1/3} = 16$) よりも大きい領域で通信時間を削減することができ, 理論予測と実測はほぼ一致する。

間接通信 図 14(b) 中の断面 cross-section 1 上で計測した平面ドメインと四角柱ドメインの通信時間 T_m を図 15(b) に示す。図 14(b) によると, 2 つのドメインの最適領域の境界は, 点 ($P = 9, C^{1/3} = 9$) と ($P = 16, C^{1/3} = 16$) の間にある。図 15(b) によると四角柱ドメインは図 14(b) と同様に, P と $C^{1/3}$ が点 ($P = 16, C^{1/3} = 16$) よりも大きい領域で通信時間を削減することができ, 理論予測と実測はほぼ一致する。

直接通信と間接通信の比較 3.4 節の議論によると, 直接通信と間接通信の違いは, 四角柱ドメインの局所通信時間の通信スタートアップ時間への依存性のみである。図 15 の (a) と (b) を比較すると, 通信時間は直接通信と間接通信で同程度であり, 通信方式の違いよりも使用ドメイン形状の違いからくる通信時間の違いの方が大きい。

断面 2: 四角柱ドメインと立方体ドメインの比較

直接通信 図 14(a) 中の断面 cross-section 2 上で計測した四角柱ドメインと立方体ドメインの T_m を図 16(a) に示す。図 14(a) では, 2 つのドメインの最適領域の境界は点 ($P = 64, C^{1/3} = 40$) 付近である。図 16(a) では 2 つのドメインの通信時間の大小関係が逆転する点は, 図 14(a) と同様に点 ($P = 64, C^{1/3} = 40$) 付近であり, 理論予測と実測はほぼ一致する。図 16(a) によると, 四角柱ドメインと立方体ドメインはどちらも大小関係が逆転した後の通信時間の増加は小さく, 2 つのドメインでほとんど変わらない。

間接通信 図 14(b) 中の断面 cross-section 2 上で計

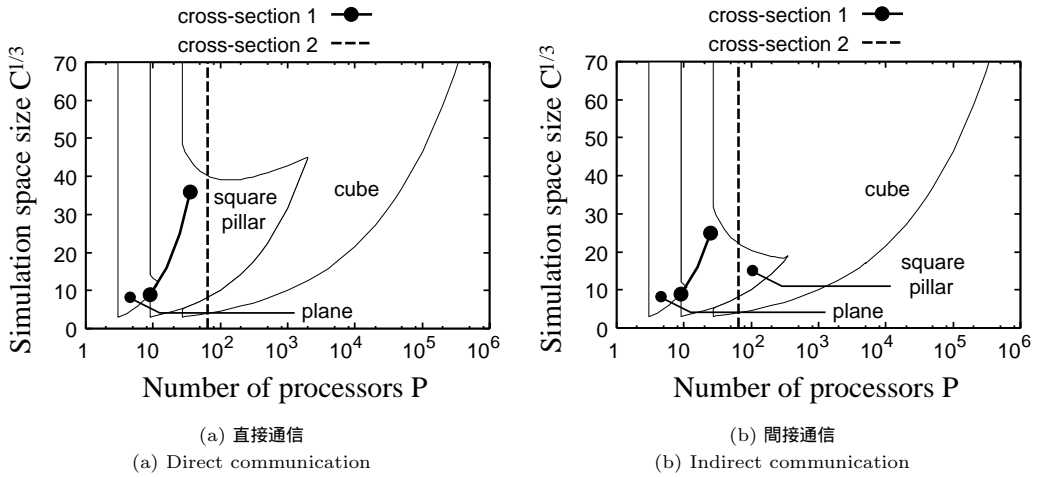


図 14 CM-5 上で最適ドメイン形状を確認するための 2 つの断面 ($W_{cell} = 30$)
 Fig. 14 Two cross sections for comparing theoretical optimum and experimental optimum on CM-5 ($W_{cell} = 30$).

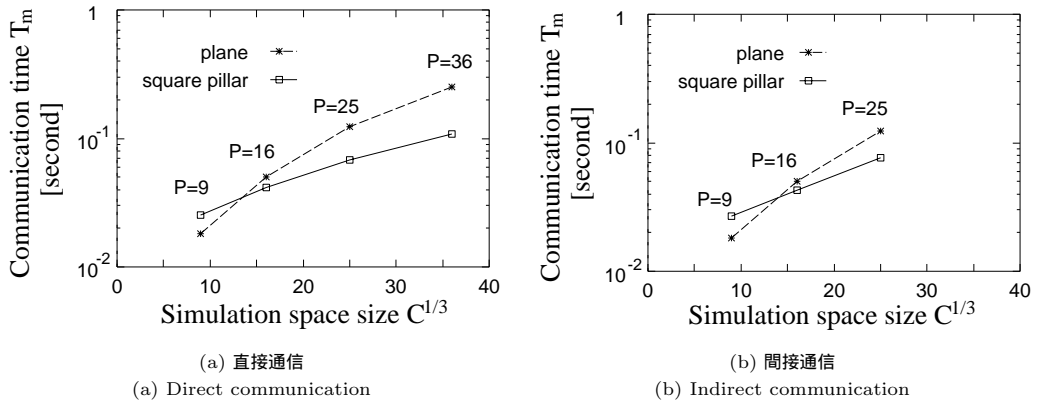


図 15 平面ドメインと四角柱ドメインの CM-5 上での局所通信時間
 Fig. 15 Local communication time of plane domain and square pillar domain on CM-5.

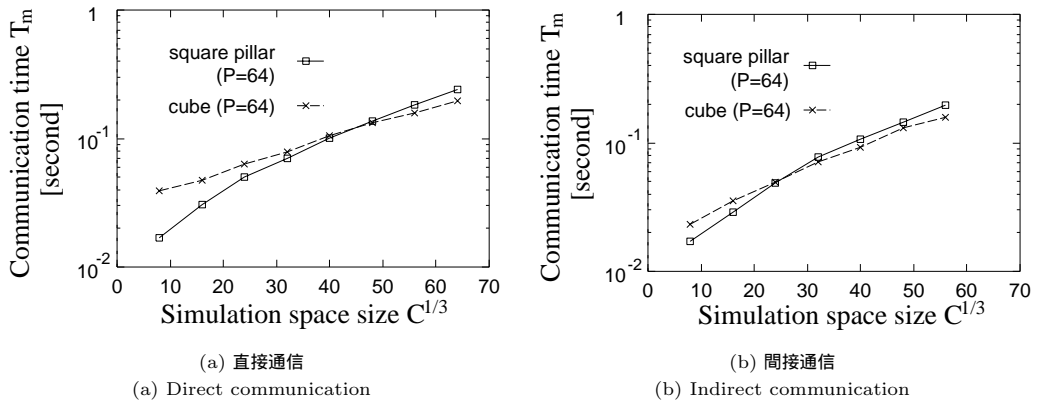


図 16 四角柱ドメインと立方体ドメインの CM-5 上での局所通信時間
 Fig. 16 Local communication time of square pillar domain and cube domain on CM-5.

測した立方体ドメインと四角柱ドメインの T_m を図 16 (b) に示す．図 14 (b) では、2つのドメインの最適領域の境界は点 ($P = 64, C^{1/3} = 24$) 付近である．図 16 (b) では2つのドメインの通信時間の大小関係が逆転する点は、図 14 (b) と同様に点 ($P = 64, C^{1/3} = 24$) 付近であり、理論予測と実測はほぼ一致する．間接通信においても四角柱ドメインと立方体ドメインはどちらも大小関係が逆転した後の通信時間の増加は小さく、2つのドメインでほとんど変わらない．

直接通信と間接通信の比較 図 16 の (a) と (b) を比較すると、 $C^{1/3}$ が小さい範囲では、間接通信は立方体ドメインの通信時間を大きく削減することができる．間接通信を用いた立方体ドメインと四角柱ドメインの通信時間は、直接通信の四角柱ドメインと同程度である．

MD シミュレーション全体の実行時間

図 17 に、これまで各ドメインを比較した PE 数とセル数の組合せでの、MD シミュレーションの実行時間を示す．表 6 から、本稿で用いた物理条件で MD シミュレーションを CM-5 で実行すると、全処理時間で計算時間が占める割合は通信時間よりも大きいことが予想されていた．実際に図 17 では全体に、ドメイン間での実行時間差は小さい．平面ドメインと四角柱ドメインを 9 PE と 16 PE で比較した左上の2つの線は、通信時間の比較結果では通信時間差が大きかったため、図 17 でも比較的明確に差が出ている．一方、四角柱ドメインと立方体ドメインを比較した右下の2つの線では、通信時間の比較結果同様に、ほとんど差がない．すなわち、本稿の議論を用いて、MD シミュレーションを実行する際の最適分割法を予測可能であった．

分割法の違いは通信時間の違いとなって現れるため、計算時間と通信時間の比率に応じて、分割法の違いが全処理時間に及ぼす効果は変化する．今回利用した CM-5 および実行したプログラムでは、CPU 性能に比較して通信が高速であったため、分割法の違いの効果は大きく現れなかった．計算性能・通信性能比と分割法の違いの効果の関係は、今後の課題として、引き続き検討する．

4.4 T3E 上での最適ドメイン形状

CM-5 の場合と同様に、図 13 に示した $P - C^{1/3}$ 空間中に最適ドメイン領域をまたがる2つの断面を設定し、それぞれの断面上で通信時間 T_m を計測して2つのドメイン形状を比較した．図 13 中の断面 cross-section 1 上で平面ドメインと四角柱ドメインの T_m を計測した結果を図 18 に示す．図 13 によると、2つの

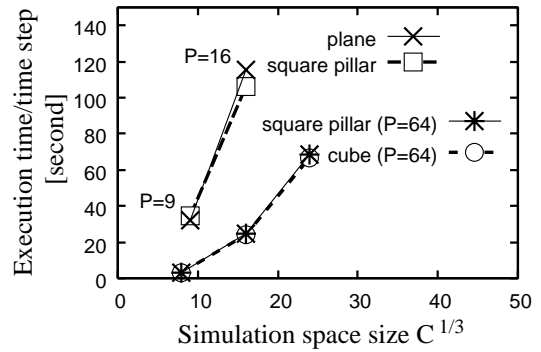


図 17 CM-5 上でのシミュレーションの実行時間（直接通信, $T_{ref} = 2.53, \rho = 0.636$ ）

Fig. 17 Converted execution time of simulation on CM-5 (Direct communication, $T_{ref} = 2.53, \rho = 0.636$).

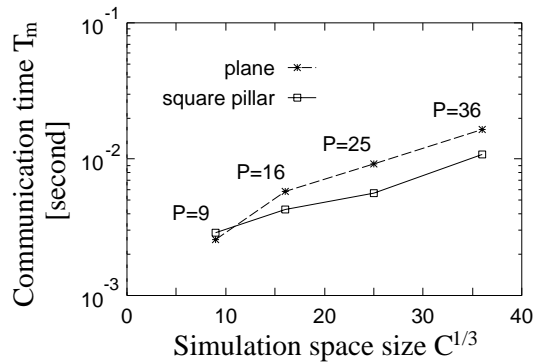


図 18 直接通信を用いた平面ドメインと四角柱ドメインの T3E 上での通信時間

Fig. 18 Direct local communication time of plane domain and square pillar domain on T3E.

ドメインの最適領域の境界は、点 ($P = 9, C^{1/3} = 9$) と ($P = 16, C^{1/3} = 16$) の間にある．図 18 では四角柱ドメインは図 14 (a) と同様に、 P と $C^{1/3}$ が点 ($P = 16, C^{1/3} = 16$) よりも大きい領域で通信時間を削減することができ、理論予測と実測はほぼ一致する．

図 13 中の断面 cross-section 2 上で立方体ドメインと四角柱ドメインの T_m を計測した結果を図 19 に示す．図 13 では、2つのドメインの最適領域の境界は点 ($P = 64, C^{1/3} = 32$) と ($P = 64, C^{1/3} = 40$) の間にある．図 19 では2つのドメインの通信時間の大小関係が逆転する点は、おおむね図 13 と同様に点 ($P = 64, C^{1/3} = 40$) 付近であり、理論式により、最適ドメインの変化を予測できている．図 19 によると、四角柱ドメインと立方体ドメインはどちらも大小関係が逆転した後の通信時間の増加は小さく、2つのドメインでほとんど変わらない．T3E 上でも CM-5 上と同様に、理論的に得られた最適ドメイン形状と実際の

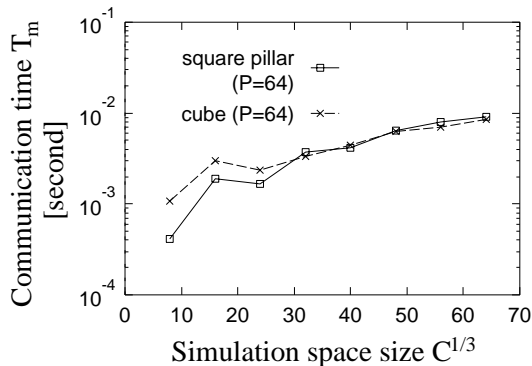


図 19 直接通信を用いた四角柱ドメインと立方体ドメインの T3E 上での通信時間

Fig. 19 Direct local communication time of square pillar domain and cube domain on T3E.

最適ドメイン形状はおおむね一致した。

4.5 考 察

本章で得られた結果を概観すると、局所通信において通信スタートアップ時間が大きい計算機では、以下のような傾向がある。

- PE 数とセル数が小さい場合、ドメイン形状ごとの通信時間の違いが大きい。特に、平面ドメインと四角柱ドメインとの差は明確である。このような場合は、最適ドメイン形状を利用した方が通信時間を削減できる。
- PE 数とセル数が大きい場合は四角柱ドメインか立方体ドメインを利用するが、両者の実測の通信時間差は小さかった。このような場合は、シミュレーション実行に都合のよい方のドメイン形状を利用すればよい。たとえば、通信時間が実行時間全体に占める割合が小さい場合で、全体の実行時間を削減したい場合には、ある程度の通信時間の増加を容認して、立方体ドメインを利用して多くの PE を使用することも考えられる。
- 間接通信は、特に小さいシミュレーションサイズで立方体ドメインを利用するときに、通信時間削減効果が高い。

類例研究と本稿で得られた結果を比較する。本稿の議論に最も近い議論を行っているのは、文献 6) である。文献 6) では、Appendix A で 1 次元分割（本稿の平面ドメインに相当する）、2 次元分割（本稿の四角柱ドメインに相当する）および 3 次元分割（本稿の立方体ドメインに相当する）で、ドメインを囲むセル数を比較する議論を行っている。これは本稿での通信量の議論と同等であるが、通信時間のモデル化を行わずにセル数のみの議論を行っているため、最終的には

PE に割り当てたセル数が無限大での結果を議論して、3 次元分割が最適となることを示している。また、PE の作る仮想結合網が非等方的な場合も考慮して 3 つの分割形態の表面セル数比を求めたことが、文献 6) の特徴である。

一方本稿では通信時間のモデル化を行い、文献 6) で得られている「大規模シミュレーションで PE 数が大きい場合は 3 次元分割が最適である」という定性的な結果に加えて中規模のシミュレーション、中規模の並列計算機上では 2 次元分割が最適となることを示し、さらに定量的に各分割法の最適範囲を示したことが特徴である。しかし、本稿では分割法を等方的なものに限定することで議論を簡単に行っているため、四角柱ドメインで四角柱の断面を長方形にした場合や、立方体ドメインでドメインを立方体でなく直方体にした場合を扱うことができない。これは今後の課題として検討したい。また、関連する文献を網羅したレビューの 1 つは文献 2) だが、この文献ではブロック分割法での最適分割形態にまでは言及していない。

5. ま と め

本稿では、メッセージ通信型並列計算機全般に適用可能な PE 間通信時間の理論式に基づき、領域分割法のシミュレーション実行時間を定式化した。領域分割法では、特にブロック分割でのドメイン形状の違いを比較した。ブロック分割でのドメイン形状の違いは PE 間通信時間に現れるため、通信時間に関する議論から、シミュレーション空間の大きさと使用 PE 数に対する最適ドメイン形状を決定した。そして 2 つのメッセージ通信型並列計算機、CM-5 と T3E 上で最適ドメイン形状を理論的に求め、各ドメイン形状による通信時間の実測値から得られる最適ドメイン形状と比較した。その結果、どちらの並列計算機上でも最適ドメイン形状の実測と理論予測が一致し、理論的なシミュレーション実行時間評価式を用いて最適ドメイン形状を決定できることが分かった。

各ドメインの最適なシミュレーション領域について検討した結果、局所通信において通信スタートアップ時間がデータ転送時間よりも大きい場合には、平面ドメインは少数の PE を使用する際に適し、四角柱ドメインは中規模の並列計算機上で中規模のシミュレーションを行うために適していることが分かった。また立方体ドメインは、局所通信時間がドメインの大きさのみに依存するため、特に超並列計算機上で大規模シミュレーションを行う際には最適であることが分かった。ただし、立方体ドメインと四角柱ドメインの実際

の通信時間差は小さいので、シミュレーション実行に都合のよい方を使うことができる。

さらに、各 PE が全近傍 PE と直接通信する直接通信と、通信の一部を他の近傍 PE の中継によって行う間接通信とを比較した。その結果、特に立方体ドメインを小さいシミュレーション空間に適用する際に、間接通信が効果的であることが分かった。また、サイクリック分割とブロック分割を比較し、ブロック分割での議論をサイクリック分割に拡張できることを示した。

領域分割法での最適な分割法に関しては、これまでは一般的な並列計算機上で使用できる評価式がなく、定性的な議論または経験によって使用する分割法を決定していた。本稿で示した最適ドメイン決定法と簡単な通信時間測定によって、任意のメッセージ通信型計算機環境での最適な分割法を決定することができる。

MD の応用上はたんぱく質などの生体分子が近年重要性を増している。本稿では短距離相互作用のみを対象としたが、生体分子では、クーロン力などの長距離相互作用が支配的である。長距離相互作用でもマルチステップ法などでは領域分割を利用して、近傍領域と遠方を分けて計算するため、本稿の議論が応用できるものと考えられる。今後は本稿の議論を長距離相互作用に拡張したい。

謝辞 本研究の一部は文部省科学研究費補助金および北陸先端科学技術大学院大学助手研究奨励金によって行われた。関係各位に感謝する。

参 考 文 献

- 1) Heermann, D.W.: 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) Beazley, D.M., Lomdahl, P.S., Grønbech-Jensen, N., Giles, R. and Tamayo, P.: Parallel Algorithms for Short-range Molecular Dynamics, *Annual Reviews in Computational Physics*, Vol.3, pp.119–175, World Scientific (1995).
- 3) Tamayo, P., Mesirov, J.P. and Boghosian, B.M.: Parallel Approaches to Short Range Molecular Dynamics Simulations, *Proc. Supercomputing '91*, pp.462–470 (1991).
- 4) Beazley, D.M. and Lomdahl, P.S.: Message-passing multi-cell molecular dynamics on the Connection Machine 5, *Parallel Computing*, Vol.20, pp.173–195 (1994).
- 5) Brown, D., Clarke, J.H.R., Okuda, M. and Yamazaki, T.: A domain decomposition parallel processing algorithm for molecular dynam-

ics simulations of polymers, *Computer Physics Communications*, Vol.83, pp.1–13 (1994).

- 6) Pinches, M.R.S., Tildesley, D.J. and Smith, W.: Large Scale Molecular Dynamics on Parallel Computers Using the Link-cell Algorithm, *Molecular Simulation*, Vol.6, pp.51–87 (1991).
- 7) Hayashi, R. and Horiguchi, S.: Domain Decomposition Scheme for Parallel Molecular Dynamics Simulation, *Proc. HPC Asia '97*, pp.595–600 (1997).
- 8) Thinking Machines Corporation: *Connection Machine CM-5 Technical Summary* (1992).
- 9) Frontier 利用者の会 (編): 北陸先端科学技術大学院大学情報科学センター 利用の手引, 第 1 版, 情報科学研究科 テクニカルメモランダム IS-TM-94-0002M, 北陸先端科学技術大学院大学 (1994).
- 10) Cray Research, Inc.: *CRAY T3E Fortran Optimization Guide* (1996).
- 11) Gropp, W., Lusk, E. and Skjellum, A.: *Using MPI*, The MIT Press (1996).

(平成 16 年 5 月 20 日受付)

(平成 16 年 9 月 7 日採録)



林 亮子 (正会員)

1993 年東北大学理学部物理学科卒業。1998 年北陸先端科学技術大学院大学情報科学研究科博士後期課程修了。1998 年 4 月より北陸先端科学技術大学院大学情報科学研究科

助手。物理シミュレーションの並列化手法およびその応用、可視化、大規模シミュレーション支援環境の研究に従事。IEEE Computer Society, 日本応用数理学会各会員。



堀口 進 (正会員)

1976 年東北大学工学部通信工学科卒業。1981 年東北大学大学院工学研究科博士課程修了, 工学博士。現在, 東北大学大学院情報科学研究科教授。1986~1987 年米国 IBM トーマスワトソン研究所研究員。1992~2004 年北陸先端科学技術大学院大学情報科学研究科教授。画像処理, 並列計算機, 並列処理ならびにネットワークの研究に従事。IEEE Computer Society シニア会員, IEICE, IASTED 学会各会員。