

## 短距離並列分子動力学法シミュレーションにおける 動的負荷分散法の性能評価

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

並列計算機上で行う分子動力学法シミュレーションは、材料設計の重要な手段の一つとして期待されている。短距離相互作用が働く分子動力学法の有効な並列化手法の一つは、シミュレーションを行う空間を分割し、プロセッサ要素に割り当てるドメイン分割法である。しかしドメイン分割法では、計算負荷の不均衡が並列処理効率を低下させる。筆者らはこれまでに、ドメイン分割法で用いるセルを単位とした計算負荷移動による動的負荷分散法を提案している。本稿では動的負荷分散法の効果を並列計算機 T3E 上に実装し、その有効性について詳しく検討する。シミュレーション実行結果と理論的な計算負荷平均化領域との関係を比較し、理論的に計算負荷平均化性能が予想可能であることを示す。

## Performance Evaluation of Dynamic Load Balancing on Short-range Parallel Molecular Dynamics Simulations

Ryoko Hayashi Susumu Horiguchi

School of Information Science

Japan Advanced Institute of Science and Technology

This paper addresses ability of dynamic load balancing method for parallel Molecular Dynamics simulations. Domain Decomposition Method is one of superior parallelization methods of Molecular Dynamics simulations. However, it has a problem of computational load imbalance. To solve this problem, we have proposed a dynamic load balancing method (DLB). In this paper, parallel performances are discussed by implementation of DLB on a parallel computer, T3E. Furthermore, MD simulations with several densities are compared with theoretical upper bound of DLB. As the result, the theoretical upper bound can estimate actual efficiency.

### 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ける物質・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や原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ている [2][3][4]。ドメイン分割法は、相互作用の影響範囲が小さい短距離 MD における、高速な並列化手法の一つである [2][5]。しかし、分子がシミュレーション空間中に不均一に分布する場合には、ドメイン分割法では各 PE の計算負荷に不均衡が生じて並列化効率が著しく低下することが大きな問題である。

2 次元空間のドメイン分割法では、1 次元方向にシミュレーション空間を分割して 1 次元トラス結合の PE に割り当てる場合について、PE の担当する領域の境界線を移動する動的負荷分散法が提案され、高速化が行われている [6][7]。一方、3 次元空間の MD シミュレーションでは多数の PE を使用する 경우가多く、一般に PE 間の近傍関係がより複雑である。そのため、PE 間の近傍関係を保存したまま計算負荷を移動することが困難である。

著者らは 3 次元空間の MD シミュレーションにおいて PE 間の近傍関係を保存するために、「固定分配セル」を導入した動的負荷分散法 (Dynamic Load Balancing: DLB) を提案し、並列計算機 CM-5 上に実装してその効果を示した [8][9]。固定分配セルは移動する計算負荷の量、移動方向に制限を加えるの

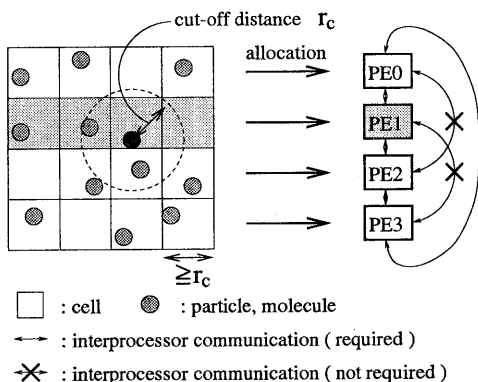


図 1: ドメイン分割法

で、DLB の計算負荷平均化性能の限界を定式化して評価した [9]。本稿では、提案した DLB を並列計算機 T3E[10] 上へ実装し、DLB の有効性を確認する。また、複数の MD シミュレーションの実行によって DLB の計算負荷平均化性能の限界を評価する。さらに、定式化した計算負荷平均化性能の限界と比較して理論式の有効性を検討する。

本稿の構成は以下の通りである。2 章では MD シミュレーション、ドメイン分割法および DLB の概要を示す。3 章では DLB を使用した DLB ドメイン分割法による並列 MD シミュレーションを並列計算機 T3E 上へ実装した結果を示す。4 章では、理論的な計算負荷の平均化性能と実装で得られた平均化性能を比較し議論する。5 章はまとめである。

## 2 並列分子動力学法シミュレーションの動的負荷分散法

### 2.1 分子動力学法

本稿で扱う MD シミュレーションは古典 MD と呼ばれ、各分子に働く力を分子間相互作用から計算してニュートンの運動方程式に代入し、数値積分を行うことにより時間刻み (タイムステップ) ごとの各分子の位置と速度を計算する。分子間相互作用は多くの場合、分子間距離に依存するポテンシャル関数で定義する。本稿では、このポテンシャル関数に Lennard-Jones 型ポテンシャル、

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

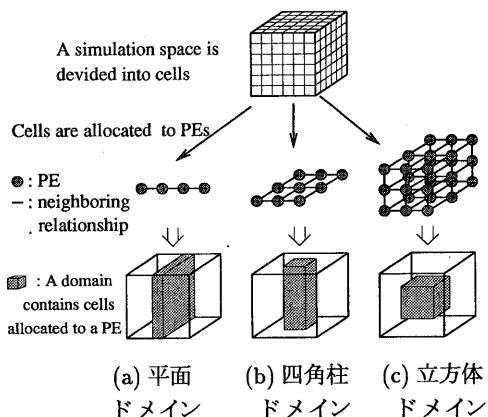


図 2: 3 次元 MD シミュレーションの 3 種類のドメイン形状

を使用する。式中の  $r$  は分子間距離である。 $\epsilon$  はポテンシャルの極小値の絶対値、 $\sigma$  は分子の直径を表し、物質によって異なる定数である。Lennard-Jones 型ポテンシャルでは分子間距離が増大すると相互作用の大きさが急速に零に近づくため、「力の切断距離」 $r_c$  を導入し、 $r_c$  以上離れた分子間では相互作用を零として力の計算時間を短縮する。この操作を「力の切断」と呼び、MD では広く用いられている。

### 2.2 ドメイン分割法

ドメイン分割法は、短距離相互作用の働く MD シミュレーションの並列化手法の一つである [2]。 $N$  個の分子を  $P$  個の PE を用いて計算するとき、計算複雑度を  $O(N/P)$  にすることができる。

ドメイン分割法の概要を示す。図 1 は、ドメイン分割法を 2 次元空間の MD シミュレーションに適用した例である。図 1 では正方形のセルを使用して、セルの大きさを力の切断距離  $r_c$  よりも大きく定める。そして 1 次元トーラス結合の 4PE を使用し、1 行のセルを 1 つのドメインとして PE に割り当てる。セルの大きさが  $r_c$  よりも大きいため、分子間相互作用を計算するべき分子の組み合わせは、各セル自身と 8 近傍セル中に含まれる。そのため、図 1 では各 PE は 2 近傍の PE とだけデータを交換すればよい。3 次元空間のシミュレーションの場合はセルは立方体とし、セルの大きさを力の切断距離よりも大きく定める。このとき、各セル自身と 26 近傍セル中の分子を

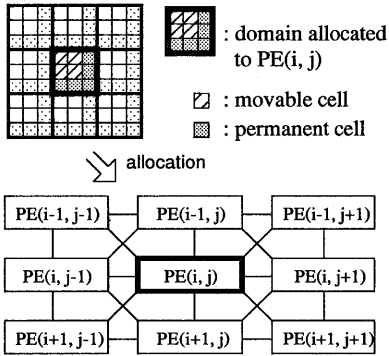


図 3: 固定分配セルとプロセッサ要素へのセルの割り当て

参照すれば、相互作用の計算に必要な分子の組み合わせが得られる。

3次元空間のMDシミュレーションにドメイン分割法を適用する際、図2に示すような3つのドメイン形状が可能である。我々は文献[4]および文献[5]における最適なドメイン形状に関する議論により、図2(b)に示す四角柱ドメインを使用する。四角柱ドメインでは、使用するPE間で仮想的に2次元メッシュ結合網(仮想結合網)をつくり、シミュレーション空間を2次元で分割したドメインをPEに割り当てる。このとき、ドメインおよびPEは8近傍関係を持つ。

### 2.3 固定分配セルを用いた動的負荷分散法

DLBは、セルの再分配、すなわち近傍PE間でセルを移動することによって計算負荷移動を行う。セルの再分配に際しては、PE間通信のオーバーヘッドを最低限にするために、仮想結合網を保存する必要がある。仮想結合網の規則性を保存しながらセルの再分配を行うために、「固定分配セル」を定義する。

四角柱ドメインの長軸に垂直な断面中での固定分配セルの定義、および四角柱ドメインを9PEに割り当てた状態を図3に示す。図3中の $PE(i, j)$ はPEのアドレスを示す。ドメインの断面中で1行分のセルおよび1列分のセルを固定分配セルとし、それ以外のセルを可動セルとする。可動セルは、セルの再分配によって、他のPEに移動可能である。一方、固定分配セルは他のPEに移動せず、各PEは割り当てられたドメインの固定分配セルの計算をシミュレーションの最後まで担当する。

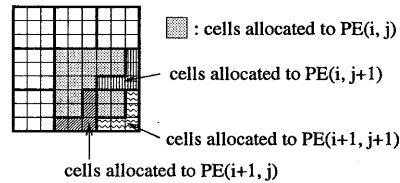


図 4: プロセッサ要素が担当可能な最大数のセル

固定分配セルが仮想結合網の規則性を保存する簡単な例を図4に示す。図4は、 $PE(i, j)$ が $PE(i, j+1)$ 、 $PE(i+1, j)$ 、 $PE(i+1, j+1)$ から全ての可動セルを受けとった状態であり、 $PE(i, j)$ は担当可能な最大数のセル(最大担当空間)を持っている。この状態でもPEの8近傍関係は保存されている。このようにDLBでは、仮想結合網を保存しながら計算負荷を平均化することができる。しかし、図4の状態であっても $PE(i, j)$ の計算負荷が9PE中で最小であるときは、これ以上の計算負荷の平均化はできない。固定分配セルを用いたDLBでは、可動セルの数とセル再分配の方向に制限があるために、計算負荷の平均化性能には限界(計算負荷平均化限界)がある。

## 3 動的負荷分散法の性能評価

### 3.1 並列処理環境

動的負荷分散法の性能評価のために、1ノードあたり1PEを持つ128ノードの分散メモリ型並列計算機であるT3Eを使用した。T3EはPEにDECchip 21164(300MHz, 600MFLOPS, 1200 MIPS)を使用している。DECchip 21164はそれぞれ8KBのデータキャッシュと命令キャッシュ、および96KB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2.8GB/secondである。

並列MDシミュレーションの実装には、プログラミング言語FORTRAN90にメッセージ通信ライブラリMPI(Message-Passing Interface)を併用し、SPMD型処理を行った。本稿で用いる実行時間は、MPIのMPLWTIME関数を使用して計測した。ドメイン分割法とDLBドメイン分割法の違いは計算負荷移動のサブルーチンを使用するかどうかのみであり、全く同一のソースプログラムを使用している。

### 3.2 並列MDシミュレーションの物理条件

本稿で扱う MD シミュレーションでは、分子間相互作用に Lennard-Jones 型ポテンシャルを使用する。Lennard-Jones 型ポテンシャルのパラメータにはアルゴンを模擬する数値を用い、無次元化した力の切断距離  $r_c^*$  は 2.5 を使用する。物理系は分子の数  $N$ 、シミュレーション空間の体積  $V$ 、および全エネルギー  $E$  を保存する。全エネルギーは運動エネルギーと位置エネルギーの和であるが、位置エネルギーが変化するために運動エネルギーも変化し、温度が一定にならない。そのため温度は 50 タイムステップごとに無次元化温度  $T_{ref}^*$  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。1 タイムステップの時間刻み  $\Delta t$  は 0.064 無次元化時間で、境界は周期境界条件とした。初期状態では、分子の位置は規則的である。

1 つのテストケースとして、分子が時間とともに集中する状態を人為的に作り出すため、無次元化温度  $T_{ref}^* = 0.722$  で無次元化数密度  $\rho^* = 0.256$  の物理状態を用いる。無次元化温度の定義 [1] によると、 $T_{ref}^* < 1.0$  のとき、大部分の分子の運動エネルギーはポテンシャルの極小値の深さよりも小さい。このとき大部分の分子は、他の分子のポテンシャルの引力部分の極小点に位置すると、そのまま引力部分にとどまる。一方無次元化数密度  $\rho^* = 0.256$  は、最大の無次元化密度 (面立方格子の密度  $\rho_{fcc}^* = 1.41$  程度) よりも小さい。そのためここで用いた物理条件では、分子を規則的に配置した初期状態から離れると、分子の集中が起こる。

### 3.3 シミュレーション実行結果

DLB の効果を調べるため、従来のドメイン分割法を用いたシミュレーションと DLB ドメイン分割法によるシミュレーションを実装した結果が図 5 である。図 5 中の量は次の通りである。

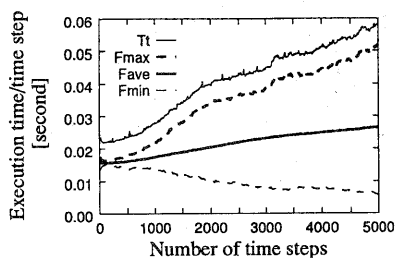
**Tt** 1 タイムステップの並列処理時間

**Fmax** 36PE における最大の相互作用計算時間

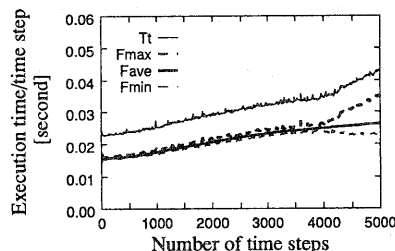
**Fave** 36PE における平均の相互作用計算時間

**Fmin** 36PE における最小の相互作用計算時間

各タイムステップで同期をとることから、ドメイン分割法と DLB ドメイン分割法のどちらも Tt は Fmax に依存して変化する。図 5(a) で、ドメイン分割法の



(a) ドメイン分割法の実行時間の内訳



(b) DLB ドメイン分割法の実行時間の内訳

図 5: 1 タイムステップの実行時間の内訳 (36PE,  $m = 3$ ,  $N = 27000$ ,  $C = 5832$ ,  $T_{ref}^* = 0.722$ ,  $\rho^* = 0.256$ )

Fmax と Fmin の差は、タイムステップが進むに従って増大している。これは、多くの分子が少数の PE に集中して計算負荷が不均一になったことを示す。それに対して図 5(b) 中に示した DLB ドメイン分割法では、Fmax と Fmin の差は、4000 タイムステップまでは小さく、一定に保たれている。これは、DLB が計算負荷を平均化していることを示す。また、ドメイン分割法と DLB ドメイン分割法のどちらも Fave はゆるやかに増加している。これは、密度の集中が起こって全体として計算量が増加し、実行時間が増加することを示す。図 5(a) と図 5(b) の Tt を比較すると、図 5(b) の Tt の方が小さく、DLB ドメイン分割法が実行時間を削減していることがわかる。

## 4 平均化可能な計算負荷集中度

### 4.1 理論性能

固定分配セルを用いた DLB は、計算負荷平均化性能に限界がある。そこで、DLB ドメイン分割法が有効である計算負荷集中の大きさを理論的に評価した。平均化可能な計算負荷集中を定式化する議論の詳細は文献 [9] に述べたので、ここでは結果のみを示

す。  $P$  個の PE が  $N$  個の分子を含む  $C$  セルを計算するものとする。セルの形状は立方体であり、セルの一边の大きさは  $r_c^*$  に等しい。シミュレーション空間全体で分子を含まないセルは  $C_0$  個であり、残りの  $C - C_0$  個のセルは、全て  $N/(C - C_0)$  個の分子を含む。さらに、シミュレーション空間は立方体であるものとし、シミュレーション空間の一边のセル数  $C^{1/3}$  および仮想結合網の一边の PE 数  $P^{1/2}$  は整数であるものとする。このとき、平均化可能な計算負荷集中の上界は次式で表せる。

$$f(m, n) = \frac{3(m-1)^2}{m^2(n-1) + 3n(m-1)^2} \geq \frac{C_0}{C}. \quad (2)$$

式 (2) 中の  $m$  と  $n$  は定式化のために導入したパラメータであり、以下のような意味を持つ。

$m$ : 四角柱ドメインの底面の一边の長さ。  $m \geq 2$  である。

$n$ : 最大担当空間における分子を含まないセルの集中度。  $n = (\text{最大担当空間中での分子を含まないセルの割合}) / (C_0/C)$  で定義し、  $n \geq 1$  である。

式 (2) は使用 PE 数  $P$  に依存しない。

## 4.2 実効性能

定式化で得られた DLB の理論的な計算負荷平均化性能と、並列 MD シミュレーションの実行から得られた DLB の計算負荷平均化性能を比較する。分子の入らないセルの集中度  $n$  と分子の入らないセルの割合  $C_0/C$  の関係を表す  $n-C_0/C$  空間を定義する。文献 [9] に述べたように、MD シミュレーションを実行して得られる各タイムステップの  $n$  および  $C_0/C$  を  $n-C_0/C$  空間に表すと、  $C_0/C$  がタイムステップとともに増加するために、  $n-C_0/C$  空間中で下から上へ移動する軌跡を描く。そしておおまかには、計算負荷平均化限界点から下では計算負荷の平均化が可能であって MD シミュレーションの実行時間が一定であり、計算負荷平均化限界点から上では MD シミュレーションの実行時間が増加する。

4 種類の密度を用いた MD シミュレーションを 10 回 (5 種類の初期状態を各 2 回) ずつ実行し、求めた計算負荷平均化の限界点を  $n-C_0/C$  空間中に示したのが図 6 である。図 6 では、限界点に最小二乗法を適用して決定した限界曲線および  $f(m, n)$  も示した。限界点は変動が大きいため、図 6 には限界点の誤

表 1: 平均化可能な計算負荷集中度の理論的な上界と MD シミュレーション実行による限界曲線

	$f(m, n)$	限界曲線	限界曲線/ $f(m, n)$
$m=2$	$\frac{3}{7n-4}$	$\frac{1.35}{7n-4}$	0.45
$m=3$	$\frac{4}{7n-3}$	$\frac{2.38}{7n-3}$	0.60
$m=4$	$\frac{27}{43n-16}$	$\frac{18.8}{43n-16}$	0.70

差範囲を示した。図 6(a) は  $m = 2$ 、すなわち四角柱ドメインの底面の大きさが 2 セルである場合であり、図 6(b) は  $m = 3$ 、図 6(c) は  $m = 4$  の場合である。

図 6 ではいずれの場合も限界点は上界  $f(2, n)$ 、  $f(3, n)$  および  $f(4, n)$  を満たし、限界曲線も上界を満たす。限界曲線は  $f(2, n)$ 、  $f(3, n)$  および  $f(4, n)$  と同じ関数型を使用して求めたが、この限界曲線は、限界点と良く適合している。したがって、理論的な上界から実際の MD シミュレーション実行時の限界曲線を評価することができる。また MD シミュレーションにおける分子の密度が大きくなると、限界点は  $n-C_0/C$  空間中で左上から右下へ移動することがわかる。

$f(m, n)$ 、限界曲線の具体的な数式、およびそれらのおおよその比を表 1 にまとめた。表 1 に示したように、限界曲線はいずれも  $f(m, n)$  の 50% から 70% 程度であり、計算負荷平均化限界が上界の半分程度であって、DLB の実際の性能は上界の半分程度であることがわかる。また、限界曲線と  $f(m, n)$  の比は  $m$  が大きくなるほど増加し、より上界に近い性能を実現することがわかる。

## 5 まとめ

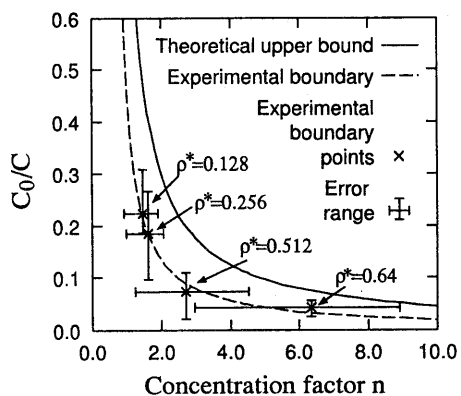
本稿では、固定分配セルを用いた動的負荷分散法による DLB ドメイン分割法の計算負荷平均化性能について議論した。DLB ドメイン分割法を並列計算機 T3E 上に実装した結果、DLB ドメイン分割法は高い計算負荷平均化効果を得ることができた。さらに計算負荷の平均化可能な範囲を詳細に議論するため、分子の密度を変化させたシミュレーションを複数行つて、計算負荷の平均化可能な範囲を詳細に調べた。その結果、T3E においては理論的な上界の約 0.5 ~ 0.7 倍が実際の計算負荷平均化の限界であることがわかった。

## 謝辞

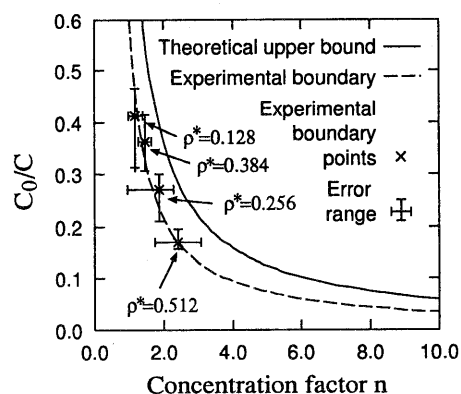
本研究の一部は文部省科学研究費補助金によって行われた。

## 参考文献

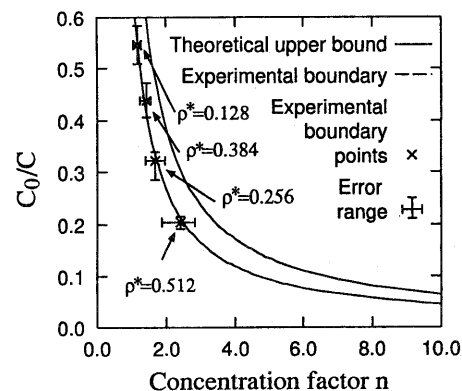
- [1] Heermann, D. W.: “シミュレーション物理学”, シュプリンガー・フェアラーク東京 (1990).
- [2] D. M. Beazley, P. S. Lomdahl, N. Grønbech-Jensen, R. Giles, and P. Tamayo: *Parallel Algorithms for Short-range Molecular Dynamics*, Annual Reviews in Computational Physics, Vol. 3, World Scientific, pp. 119-175 (1995).
- [3] 松原正純, 板倉憲一, 朴泰佑: 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, 情報処理学会論文誌, Vol. 40, No. 5, pp. 2172-2182 (1999).
- [4] 林亮子: “巨大分子の超並列分子動力学法シミュレーションに関する研究”, 博士論文, 北陸先端科学技術大学院大学 (1998).
- [5] R. Hayashi and S. Horiguchi: Domain Decomposition Scheme for Parallel Molecular Dynamics Simulation, *Proceedings of HPC Asia '97*, pp. 595-600 (1997).
- [6] F. Brugué, S. L. Fornili: Concurrent molecular dynamics simulation of spinodal phase transition on transputer arrays, *Computer Physics Communications*, Vol. 60, pp. 31-38 (1990).
- [7] G. A. Kohring: Dynamic load balancing for parallelized particle simulations on MIMD computers, *Parallel Computing*, Vol. 21, pp. 683-693 (1995).
- [8] 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 JSPP '96 論文集, Vol. 96, pp. 81-88 (1996).
- [9] 林亮子, 堀口進: 固定分配セルを用いた動的負荷分散法による並列分子動力学法シミュレーション, 情報処理学会論文誌, Vol. 40, No. 5, pp. 2152-2162 (1999).
- [10] Cray Research, Inc.: *CRAY T3E Fortran Optimization Guide* (1996).



(a)  $m = 2$



(b)  $m = 3$



(c)  $m = 4$

図 6: 計算負荷の平均化可能な  $C_0/C$  の上界と並列 MD シミュレーションから得られた計算負荷平均化限界点 (16PE)