

## 鎖片割り当てドメイン分割法を用いた 直鎖分子の並列分子動力学法シミュレーション

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

分子動力学法を用いて直鎖分子のシミュレーションを行なうためには、単原子分子で用いるような  $N$  体間相互作用の計算と、直鎖に沿った相互作用の計算の両方を効率良く行なう必要がある。これまで行なわれた直鎖分子の並列シミュレーションでは主に、シミュレーション空間を分割してプロセス要素に割り当てるドメイン分割法が用いられてきた。しかし、直鎖分子のドメイン分割法では連続するモノマーを検索する必要があり、このモノマー検索時間が全体の処理時間を増加させる。本稿ではドメイン分割法において、連続するモノマーの検索コストを削減するために鎖片割り当てドメイン分割法を提案し、並列計算機 T3E 上に実装してその並列処理性能を詳細に検討する。

## Chain-distributed Domain Decomposition Method for Parallel Molecular Dynamics Computer Simulations of Polymers

Ryoko Hayashi Susumu Horiguchi

School of Information Science  
Japan Advanced Institute of Science and Technology

This paper addresses parallel molecular dynamics simulations of polymers. Polymer simulations requires multi-particle interactions as well as  $N$ -body interactions. Many researchers use domain decomposition method for polymer MD simulation. However, domain decomposition method requires much searching time in connected monomers for polymer simulation. Thus we propose chain-distributed domain decomposition method which assigns connected pieces of monomers to PEs. Parallel polymer simulations based on chain-distributed domain decomposition method have been implemented on a parallel computer T3E and compared parallel simulation efficiency with the conventional domain decomposition method. The simulation results show that the chain-distributed domain decomposition method improves parallel simulation time by achieving the quick search for connected monomer.

### 1 はじめに

分子動力学法 [1](MD) は、物理や化学、材料科学の分野で重要性を増しているコンピュータ・シミュレーションの手法である。計算機の高速化にともなって MD は種々の分子を扱うことが可能となり、電気的に中性な単原子分子だけでなく、水分子や生体高分子のシミュレーションも行なわれている。特に並列計算機の発達によって、蛋白質のような巨大分子まで扱われはじめて [2]。本稿では、古くから理

論的に扱われて材料としても重要な、3次元空間中の直鎖分子を扱う並列 MD シミュレーションについて報告する。

直鎖分子はモノマーが直線状に連なった分子である。直鎖分子は、相互作用の形式という観点からは、巨大分子と単原子分子の中間的なモデルと見なすことができる。この直鎖分子を扱う MD の並列化に関する研究が近年注目されている。直鎖分子は、長い分子ほどシミュレーションに際して多くの分子を扱う必要があるため、計算量の増加が大きな問題であ

る。そこで計算量を小さくするために、Rigby-Roe モデル [3] のように、分子間の相互作用には短距離相互作用を使用する。直鎖分子を扱う MD の並列化に関する研究においても、そのほとんどは短距離相互作用を使用する。

直鎖分子を扱う並列 MD シミュレーションにおいては、シミュレーション空間を分割してプロセッサ要素に割り当てるドメイン分割法 (DDM)[4][5] が用いられてきた。Esselink らは分子内の相互作用計算を DDM に組みこみ、50 モノマーを結合した 200 分子の直鎖分子シミュレーションを行なった [6]。Brown らは DDM を用いて 100 モノマーを結合した 640 分子の直鎖分子シミュレーションを行なった [7]。しかしこれらの研究では、モノマー数による計算時間変化や PE 数の拡張性について十分に検討されていない。林と堀口は DDM と分子分割法 (CD) を用いた直鎖分子の並列 MD シミュレーションを実装し、使用 PE 数、全モノマー数、分子の長さを変化させた処理時間を比較した [8]。その結果、使用 PE 数およびモノマー数の増加に対して DDM が CD よりも高い性能を得られることを示した。一方で、DDM は CD よりも分子内の相互作用に大きな計算時間を要することを指摘した。

本稿では、分子内の相互作用の計算時間を削減するためにモノマーの結合関係を考慮した DDM、鎖片割り当てドメイン分割法 (CDDDM) を提案する。さらに、直鎖分子の並列 MD シミュレーションを並列計算機 T3E[9] 上に実装し、有効性について議論する。本稿の構成は以下の通りである。第 2 節では本稿で用いた直鎖分子モデルを示す。第 3 節では DDM と CDDDM の概要を述べる。第 4 節では並列 MD シミュレーションを並列計算機 T3E 上に実装した結果を示し、実行時間について議論する。第 5 節はまとめである。

## 2 直鎖分子モデル

本稿では、直鎖分子として Rigby-Roe モデル [3] を用いる。これは、アルカンに適用するモデルであり、 $\text{CH}_2$  および  $\text{CH}_3$  を表す球体のモノマーがばねで結合されたものである。Rigby-Roe モデルの概要を図 1 に示す。相互作用は以下に示す 4 つの相互作用の総和である。

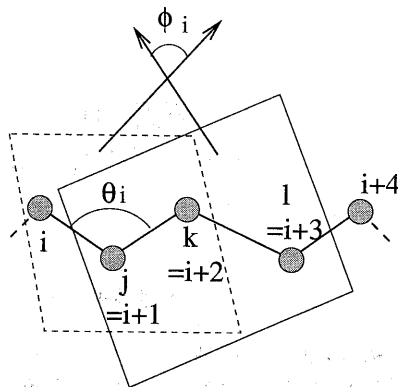


図 1: Rigby-Roe モデルの概要

表 1: Rigby-Roe モデルのパラメータ (抜粋)

	無次元化量	絶対量
$l_0$	0.4	0.152 nm
$k_b$	$10^4$	$3.46 \times 10^7 \text{ J nm}^{-2} \text{ mol}^{-1}$
$\cos \theta_0$	-0.3333	-0.3333
$k_\theta$	$10^3$	$5 \times 10^5 \text{ J mol}^{-1}$
$k_\phi$	18	$9000 \text{ J mol}^{-1}$
$a_0$	1	1
$a_1$	1.3100	1.3100
$a_2$	-1.4140	-1.4140
$a_3$	-0.3297	-0.3297
$a_4$	2.8280	2.8280
$a_5$	-3.3943	-3.3943
$\Delta t$	0.005	$1.01 \times 10^{-14} \text{ second}$

### 1. 2 体力 (C-C 結合ポテンシャル)

$$E_{b,i} = \frac{1}{2} k_b (l_i - l_0)^2. \quad (1)$$

$l_i$  はモノマー  $i$  とモノマー  $j$  間の結合の長さであり、 $l_0$  は安定な結合の長さである。

### 2. 3 体力 (C-C-C 結合角ポテンシャル)

$$E_{\theta,i} = \frac{1}{2} k_\theta (\cos \theta_i - \cos \theta_0)^2. \quad (2)$$

$\theta_i$  はモノマー  $i, j, k$  のなす結合角であり、 $\theta_0$  は安定な結合角である。

### 3. 4 体力 (ねじれポテンシャル)

$$E_{\phi,i} = k_{\phi} \sum_{n=0}^5 a_n \cos^n \phi_i \quad (3)$$

$\phi_i$  はモノマー  $i, j, k, l$  のなすねじれの角度である。 $\phi_i$  は 2 面角で、図 1 中のモノマーの番号付けに従って次式のように定義する。

$$\phi_i = \cos^{-1} \frac{(\mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{r}_{kj}) \cdot (\mathbf{r}_{kj} \times \mathbf{r}_{lk})}{|\mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{r}_{kj}| \cdot |\mathbf{r}_{kj} \times \mathbf{r}_{lk}|} \quad (4)$$

### 4. N 体力 (Lennard-Jones 型ポテンシャル)

$$E_{Nbody,in} = 4\epsilon \left[ \left( \frac{r^*}{r_{in}} \right)^{12} - \left( \frac{r^*}{r_{in}} \right)^6 \right], \quad \tau_{in} \leq \tau_c \quad (5)$$

$$E_{Nbody,in} = 0.0, \quad \tau_{in} > \tau_c \quad (6)$$

$r_{in}$  はモノマー  $i$  とモノマー  $n$  の距離であり、別の分子に属するモノマーの組みあわせと同一分子に属するうちで 3 つ以上のモノマーを隔てたモノマーの組みあわせ (図 1 中の  $i$  と  $i+4$  以降のモノマーの組みあわせ) に適用する。Rigby らがこのモデルを提案した際は  $\tau_c = 1.5r^*$  ( $r^*$  はモノマーの直径) を使用していた [3]。Esselink らは N 体力の切断距離に  $\tau_c = 2.5r^*$  を使用している [6]。Brown らは  $\tau_c = 2^{1/6}r^* \simeq 1.12r^*$  を使用している [7]。ここでは  $\tau_c = 1.5r^*$  を使用する。

相互作用の表式中の各パラメータには文献 [3] の数値を用いる。主要なパラメータの数値を表 1 に挙げる。以後上記 (1), (2), (3) をあわせて鎖相互作用と称する。N モノマーを扱う MD シミュレーションでは、鎖相互作用の計算複雑度は  $O(N)$  である。N 体力の計算複雑度は、力の切断距離を使用する場合でも、分子間距離計算の組み合わせ数から  $O(N^2)$  である。DDM を使用するとき、N 体力の計算複雑度は  $O(N)$  である [5]。

## 3 並列化手法

### 3.1 ドメイン分割法

DDM は、シミュレーションを行なう空間を分割して PE に割り当てる並列化手法である。2 次元 MD シミュレーションを例として、DDM の概要を図 2 に示す。DDM では、計算する空間を N 体力の力の

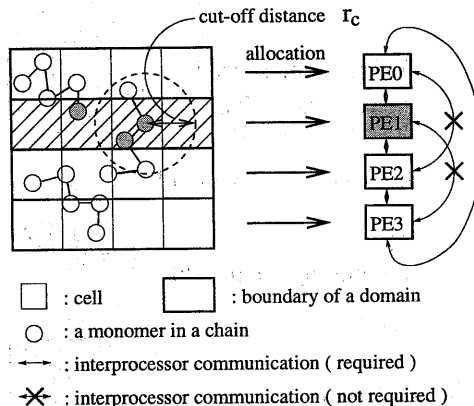


図 2: ドメイン分割法の概要

切断距離  $r_c$  程度の大きさを持つ正方形 (3 次元 MD シミュレーションでは立方体) の「セル」に分割し、複数のセルを空間的にまとめてドメインを構成する。このとき、ドメイン相互の近傍関係が、ドメインを割り当てた PE 相互の近傍関係になる。モノマー間の相互作用を計算する際に PE 間でモノマーのデータを交換するが、DDM では、各 PE は近傍関係にある PE とのみ通信すればよく、交換するのはドメイン表面のセルに属するデータのみである。そのため DDM は、モノマー間距離の計算を削減することができ、N 体力を効率良く計算することができる。

DDM で直鎖分子の並列 MD シミュレーションを行なう場合、一般には複数の PE が同一分子に属するモノマーを持つ。そのため鎖相互作用を計算する際に、連続するモノマーを探す必要がある。ただし 2 体力のパラメータを参照すると、連続する 2 つのモノマー間距離は、事実上力の切断距離を越えないことがわかる。すなわち、各モノマーと直接結合するモノマーは、近傍セル中に必ず存在する。そのため、直鎖分子の MD シミュレーションにおいても、DDM を使用することができる。

本稿では Brown らの方法 [7] と同様に、連続するモノマーを探索するための分子のデータとして、分子の番号と、分子内の順番を加えた。各 PE は自分の持つ分子の番号リストをつくり、分子の位置データを交換する PE 間通信の際に、近傍ドメイン中の全モノマーのうち自分の持つ分子に属するデータを取得する。各 PE は、自分の持つモノマーが図 1 および式 (1)~式 (3) 中の  $i$  番目に相当する場合のみ、鎖

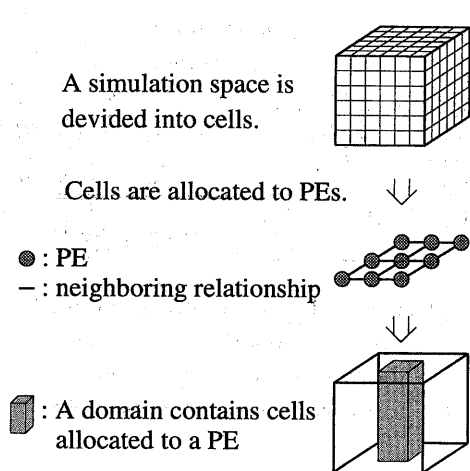


図 3: 四角柱ドメインの概要

相互作用を計算する。鎖相互作用の計算では、各モノマーに連結したモノマーを検索して一覧表をつくり、必要なデータを参照する。

DDM では複数のドメイン形状が可能である。本稿では文献 [5] の結果を踏まえ、シミュレーションの規模と近傍関係の簡単さを考慮して、図 3 に示した四角柱ドメインを使用する。これは、3 次元立方体のシミュレーション空間を 2 つの次元で分割し、仮想的な 2 次元トーラス結合網に割り当てたものである。ここでは四角柱ドメインの長軸方向での断面は正方形とし、使用 PE 数は整数の 2 乗個に限るものとする。

DDM を用いたときは、厳密には PE ごとの計算負荷および実行時間は一定ではない。各タイムステップの終わりに、物理量を計算する目的で全 PE 間で同期を取ることから、1 タイムステップの実行時間は相互作用計算の実行時間の最大値に依存する。そのため、本稿で用いる実行時間の数値は、使用 PE 中での最大の実行時間である。

### 3.2 鎖片割り当てドメイン分割法

DDM の問題点は、連続するモノマーの検索コストが大きいためである。検索コストを削減するため、本稿では連続するモノマーをまとめた鎖片割り当てドメイン分割法 (CDDDM) を提案する。CDDDM の概要を図 4 に示す。直鎖分子を  $m$  モノマーごとに区切って鎖片とし、鎖片の中心にあたる  $m/2 + 1$  番目

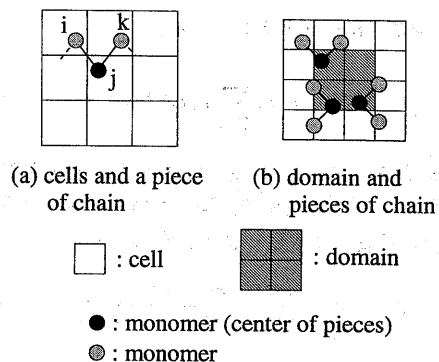


図 4: 鎖片割り当てドメイン分割法の概要

のモノマーが所属するセルを、その鎖片が所属するセルとする。図 4(a) では鎖片の長さは 3 モノマーであり、モノマー  $j$  が存在するセルに、モノマー  $i, j, k$  は所属する。

CDDDM では、鎖相互作用を計算するため、鎖片単位で連結関係を調べる。Rigby-Roe モデルのように 4 体力を考慮する直鎖分子モデルでは、 $m \leq 3$  であれば、各鎖片に連結する鎖片を一個を検索することで鎖相互作用を計算することができる。Esselink は、4 体力をなすモノマーが力の切断距離大の球体中に存在することを示した [6]。この結果を踏まえて本稿では鎖片の長さを 4 モノマーとした。

図 4(a) 中でモノマー  $i$  とモノマー  $j$  が位置するセルが異なるように、CDDDM では、所属するセルからはみ出すモノマーが存在する。そのため、各セルに実際に位置するモノマーの表を作成し、 $N$  体力計算の際に参照する必要がある。また、PE の担当する空間という観点からは、図 4(b) に示すように各 PE は各ドメインの周囲に 1 セル分ずつの範囲に存在するモノマーを持つ可能性がある。そのため、相互作用計算を目的としたデータ交換時に、本来他 PE に所属するセル中のモノマーのデータを、そのセルを持つ PE および相互作用計算に必要な PE に送る必要がある。四角柱ドメインの底面の大きさが 4 セル以上であるとき、各 PE が持つドメイン外のモノマーを必要とする PE は必ず近傍 PE であり、通信回数は DDM と同じである。各セルに実際に位置するモノマーの表を作成する必要があるため、CDDDM では本来所属するべきセルの番号を各モノマーに付随したデータとする。

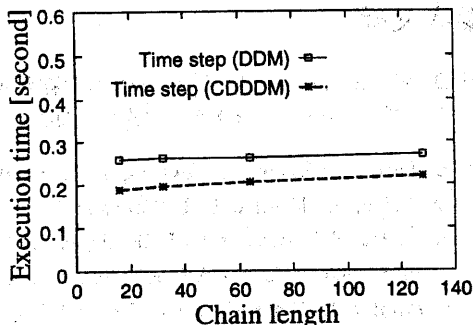


図 5: ドメイン分割法と鎖片割り当てドメイン分割法の分子の長さを変化させた1タイムステップの実行時間(全モノマー数 32768, 16PE 使用, 無次元化温度 4.0, 密度 0.256)

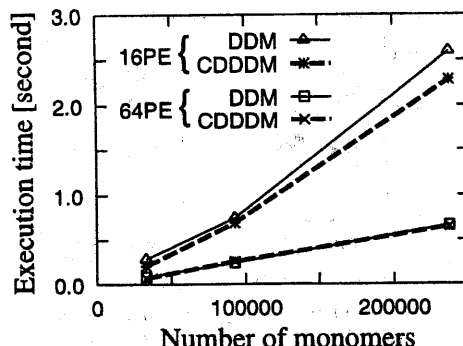


図 6: 分子分割法, ドメイン分割法, および鎖片割り当てドメイン分割法を用いた1タイムステップの実行時間(1分子 64 モノマー, 無次元化温度 4.0, 密度 0.256)

## 4 並列処理性能

### 4.1 並列計算環境

本稿では, 128PE の並列計算機 T3E[9] 上に実装を行なった. T3E は PE に DECchip 21164(300MHz, 600MFLOPS, 1200 MIPS) を使用した分散メモリ型並列計算機である. 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. 実装には, FORTRAN90 にメッセージ通信ライブラリ MPI(Message-Passing Interface) を併用し, MIMD 型処理を行なった. 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.

### 4.2 分子の長さとお処理時間

分子の長さを変化させたときの 1 タイムステップの実行時間を, CDDDM と DDM で比較する. モノマー数を固定し, 分子の長さを変化させた 1 タイムステップの実行時間を図 5 に示した. CDDDM と DDM のどちらも分子の長さには依存せず, モノマー数が一定ならば実行時間はほとんど一定である. 図 5 の結果では, CDDDM は DDM の計算時間を 20% 程度削減することができた.

### 4.3 プロセッサ数およびモノマー数と処理時間

次に, 分子の長さを固定して全モノマー数を変化させ, 16PE を使用した場合と 64PE を使用した場合の 1 タイムステップの実行時間を図 6 に示す. DDM と CDDDM はどちらも, モノマー数の増加に対しては線形程度の実行時間増加であり, 64PE を使用した場合は 16PE を使用した場合の 1/3 ~ 1/4 程度に実行時間を削減できる. DDM と CDDDM を比較すると, 16PE を使用した場合には CDDDM は実行時間を削減できるが, 64PE を使用した場合はほとんど同様の実行時間である.

### 4.4 処理時間の内訳

DDM と CDDDM の実行時間の内訳の概要を図 7 に示す. 図 7(a) は 16PE を使用した場合, 図 7(b) は 64PE を使用した場合の内訳である. 図 7 中の量は次の通りである.

- N-body force 体力計算の実行時間
- chain force 鎖相互作用計算の実行時間
- search monomer モノマー検索の実行時間
- others その他の処理の実行時間

図 7(a) によると, CDDDM はモノマー検索の実行時間を削減することにより, 全体の実行時間を削減している. ただし, 鎖相互作用計算の実行時間と N 体力計算の実行時間はわずかに増加している. 図 7(b) によると, 64PE を使用した場合に CDDDM が実行時間を削減できなかった理由は, CDDDM の N 体力計算の実行時間が増加してモノマー検索の実行時間削減の効果を打ち消したためであることがわかる.

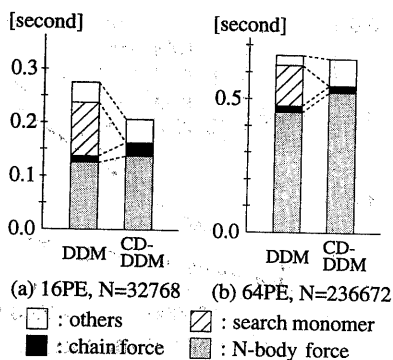


図7: 鎖片割り当てドメイン分割法とドメイン分割法を用いた1タイムステップの実行時間の内訳(1分子64モノマー, 無次元化温度4.0, 密度0.256)

## 5 おわりに

本稿では, 直鎖分子を扱う並列MDシミュレーションを実装し, 実行時間を比較した. ドメイン分割法を用いた直鎖分子の並列MDシミュレーションでは, N体力を効率良く計算する手法だけではなく, 鎖相互作用を効率良く計算する手法を組みあわせる必要がある. 本稿では, 鎖片を単位とするPEへの割り当てをドメイン分割法に組み合わせた鎖片割り当てドメイン分割法を提案し, 処理効率を検討した. その結果, 鎖片割り当てドメイン分割法は鎖相互作用を効率良く計算できることがわかった. しかし鎖片割り当てドメイン分割法は, N体力の処理時間が増加する欠点がある.

今回用いた力の切断距離は単原子分子の場合に比べて小さいものであり, 材料科学の実用上は力の切断距離を大きくする必要がある. このとき, N体力計算の実行時間が増加すると同時に, 鎖片に属するモノマー数を大きくすることができると予想される. また, 鎖片を利用して効率良くN体力計算を行なうことが課題である. 今後は力の切断距離と鎖片の長さの関係, 鎖片の長さを実行時間の関係について考察する予定である.

## 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なわれた.

## 参考文献

- [1] D. W. Heermann. “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] H. Sato, Y. Tanaka, H. Iwama, S. Kawakika, M. Saito, K. Morikami, T. Yao and S. Tsutsumi. Parallelization of AMBER Molecular Dynamics Program for the AP1000 Highly Parallel Computer. In *Proceedings Scalable High Performance Computing Conference SHPCC-92*, pp. 113–120, 1992.
- [3] D. Rigby and R. J. Roe. Molecular dynamics simulation of polymer liquid and glass. i. glass transition. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 87, No. 12, pp. 7285–7292, December 1987.
- [4] D. M. Beazley, P. S. Lomdahl, N. Grønbech-Jensen, R. Giles, and P. Tamayo. *Parallel Algorithms for Short-range Molecular Dynamics*, Vol. 3 of *Annual Reviews in Computational Physics*, pp. 119–175. World Scientific, 1995.
- [5] R. Hayashi and S. Horiguchi. Domain Decomposition Scheme for Parallel Molecular Dynamics Simulation. In *Proceedings of HPC Asia '97*, pp. 595–600, 1997.
- [6] K. Esselink and P. A. J. Hilbers. Efficient Parallel Implementation of Molecular Dynamics on a Toroidal Network. Part II. Multi-particle Potentials. *Journal of Computational Physics*, Vol. 106, pp. 108–114, 1993.
- [7] D. Brown, J. H. R. Clarke, M. Okuda, and T. Yamazaki. A domain decomposition parallel processing algorithm for molecular dynamics simulations of polymers. *Computer Physics Communications*, Vol. 83, pp. 1–13, 1994.
- [8] 林亮子, 堀口進. 直鎖高分子の並列分子動力学法シミュレーション. 情報処理学会研究報告 97-HPC-66, Vol. 97, No. 37, pp. 13–18, 1997.
- [9] Cray Research, Inc. *CRAY T3E Fortran Optimization Guide*, 1996.