

CP-PACS における空間分割法による分子動力学法シミュレーション

松原正純† 板倉憲一† 朴泰祐

本稿では、超並列計算機 CP-PACS 上で空間分割法による分子動力学法 (MD) シミュレーションを実行し、その性能評価並びに分子分割法との比較検討を行なう。メッシュ系ネットワークを持つ並列計算機における MD シミュレーションでは、そのノード間通信パターンの制約からブロック分割に基づく空間分割法が一般的に採用され、負荷分散のために処理が複雑化する場合が多い。これに対し、CP-PACS では広域通信に強いというネットワーク特性を活かし、サイクリック分割による自然な負荷分散が実現でき、256 ノードを用いた実測によりこれを確認した。

また、CP-PACS における分子分割法による MD シミュレーションの問題点であった、メモリ容量の制約に関しても、空間分割法が有効であることを示す。実測の結果、対象とする分子数と必要メモリ量の関係から、最適な問題分割アルゴリズムがノード台数と分子数に依存して決まることも明らかになった。この結果、64 MB/ノードという比較的少量のメモリで、256 ノードを用いて 6700 万分子の液体アルゴンのシミュレーションが約 150 秒/ステップで行なえることがわかった。

Molecular Dynamics simulation with Spatial Decomposition method on CP-PACS

MASAZUMI MATSUBARA,† KEN'ICHI ITAKURA†
and TAISUKE BOKU†

In this paper, we introduce an Molecular Dynamics (MD) simulation based on spatial decomposition method on CP-PACS massively parallel processor. Generally on MPP system with mesh/torus network, block mapping algorithm for spatial decomposition is used due to its data transfer characteristics. On this method, the algorithm may be complicated to keep load balancing. On CP-PACS, however, we can utilize its powerful wide area communication feature to realize natural load balancing based on cyclic mapping. We confirmed this effect on MD simulation with 256 nodes.

In addition, we show this method is also effective from the view point of required memory amount compared with the particle decomposition method. It was shown that the suitable method can be determined by the number of moleculars and available memory capacity. Using our spatial decomposition algorithm, we can handle 67 million molecular problem with 256 nodes each of which has only 64 MB of main memory, in speed of about 150 sec/step.

1. はじめに

分子動力学法 (Molecular Dynamics: 以下 MD) シミュレーションとは、物理法則に従って運動する粒子の集合体が位相空間中に描く軌跡を計算することにより、実験物理学などでは得られない微視的な物質の性質を調べる手法である。これまでも様々な並列計算機上で MD シミュレーションの研究がなされてきたが、それは $10^6 \sim 10^7$ 程度の分子数で実時間にして高々数十ナノ秒のシミュレーションであった。しかし、実際には 10^9 程度の分子について数秒のシミュレーションが

行なえることが望まれている。このようにシミュレーション規模が大きくなると、実行時間のみでなく、メモリ容量がボトルネックとなってくる。

本研究では、空間分割法を採用することでこの問題を解決する。さらに超並列計算機 CP-PACS (Computational Physics by Parallel Array Computer System) の強力な通信性能を活かし、空間分割にサイクリック・マッピングを適用することにより、ブロック・マッピングによる空間分割の欠点である計算負荷の不均衡の解消を図る。

2. 分子動力学法

以下では本研究における MD のシミュレーション方法を述べる。

† 筑波大学 電子・情報工学会
Institute of Information Sciences and Electronics, University of Tsukuba

2分子間に働く力は、簡略化したポテンシャル関数によって与える。ここでは(1)式で表されるレナード・ジョーンズの2体間ポテンシャル¹⁾を用いる。

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

r は分子間距離、 ϵ 、 σ は物質によって異なる定数である。 N 分子でのシミュレーションでは、 $(N-1)$ 個の分子対について相互作用の和をとることで各分子に加わる力が求められる。

MDシミュレーションでは、分子数 N が大きくなると分子対の数が急激に増大し、特に工夫を施さなければ、全実行時間の大半を相互作用の計算に使われてしまう。そこで、分子間相互作用の計算コストを縮小するために、精度を確かめた上で特定の分子間距離以上の相互作用をカットする手法を用いる。

レナード・ジョーンズ・ポテンシャルのように、分子間距離が増大すると相互作用の大きさが急速に0に近づくポテンシャルでは、固定距離でのカットが有効となる。(1)式によると、 $r = 2.5\sigma$ の時に約 $-1.63 \times 10^{-2}\epsilon$ となり十分0に近づくので、ここではカットオフ距離として 2.5σ を用いる。

(1)式を用いてニュートンの運動方程式を解くわけだが、実際には式を差分化し、短い時間刻み幅 Δt ごとに運動方程式を解く。本研究では、次の(2)、(3)式で表されるverletの速度形式¹⁾と呼ばれるアルゴリズムを用いる。

$$r_i^{n+1} = r_i^n + v_i^n \Delta t + \frac{1}{2m} F_i^n (\Delta t)^2 \quad (2)$$

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \frac{1}{2m} (F_i^{n+1} + F_i^n) \Delta t \quad (3)$$

r_i^n 、 v_i^n 、 F_i^n はそれぞれステップ n における分子 i の位置、速度、力を表す。初期値 r_i^0 、 v_i^0 を与えて、時間発展的に計算を繰り返すことにより、各タイムステップにおける位置と速度が次々に求められる。

シミュレーションは単純化のために立方体のドメインを想定してその中で行なう。その際、ドメインの壁と分子との相互作用を無視できるように、周期境界条件を用いて擬似的に無限に大きい体積空間を作る。また、分子間の相互作用は、最近接鏡像法に従って計算する。

3. CP-PACS

本節では、本研究に用いる超並列計算機CP-PACSについて説明する。

CP-PACS²⁾はMIMD処理方式の分散メモリ型並列計算機で、2048台のPU(計算専用プロセッサ)と128台のIOU(入出力プロセッサ)、計2176台のノードから構成されている。

ノードプロセッサには、Hewlett-Packard社のPARISC1.1アーキテクチャに基づくRISCプロセッサに

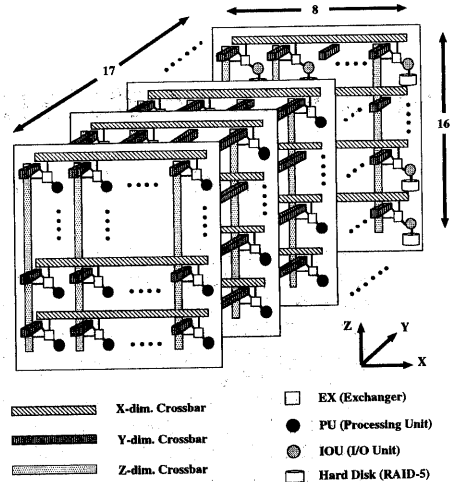


図1 CP-PACSの構成図

VVP-SW (Pseudo Vector Processor based on Slide-Windowed registers) 機構を付加したものを使用している。このプロセッサはクロック周波数は150MHzで動作し、理論ピーク性能は300MFLOPSである。主記憶容量は64MBである。ライトスルー/ダイレクトマップ方式の2レベルキャッシュを用い、容量は1次が命令用・データ用共に16KB、2次が命令用・データ用共に512KBである。

ノード間の相互結合網には、3次元ハイバクロスバネットワーク(Hyper-Crossbar Network:以下HXB)を採用している。3次元HXBは3次元直交座標上の各格子点にノードを配置し、各次元方向のノードをクロスバスイッチ(XB)で結合したネットワークである。ノード番号が2次元以上異なるノード間では、エクスチェンジャ(EX)と呼ばれる小規模なクロスバスイッチにより、複数の次元のXBを経由してデータを交換する。また、メッセージ転送はwormholeルーティングを採用しており、ネットワーク中でのメッセージ間のデッドロックを回避するため、固定ルーティング方式を用いている。ネットワークの最大転送スループットは1リンク当たり300MB/secである。HXBでは、隣接転送だけでなく、多くの一斉転送についても無衝突で通信できる⁵⁾。

CP-PACSのノード間通信プロトコルは、リモートDMA転送と呼ばれる。これは、送信側・受信側共にユーザの仮想アドレス空間の一部を物理メモリ上に固定的に割り当ておき、それらのメモリ間でデータ転送を行う高速通信方式である。異なったノード上の、ユーザ空間同士で直接データ転送を行うため、カーネルとユーザ空間との間でのデータコピーが発生せず、ネットワークのスループットを最大限に発揮することができる。

4. 並列化手法

本節では、MDシミュレーションの並列化手法について述べる。並列化の方法としては、処理の分割の方法から空間分割法と分子分割法の2つに大別できる。以下にそれぞれの概念を説明する。

4.1 空間分割法 (ブロック分割)

空間分割法の中でも一般的な、各ノードが1セル分の情報しか持たないブロック分割について説明する。

空間分割法は、ドメインをメッシュ状に分割して各ノードに割り当てる方法である。各ノードは割り当てられた部分空間(セル)の中に存在する分子についてのみ、運動の計算を行なう。そして計算した結果、分子がセル外に飛び出した場合は、その2つのセル間、即ち2ノード間で分子の受渡しが行なわれる。

空間分割法が必要となるノード間通信は、主に下の2種類に分けられる。

- 相互作用計算時の自分のセルの外にある分子の位置情報の参照
- 分子がセルを出入りすることによる分子の受渡し
ここでセルの一边の長さを分子間相互作用のカットオフ距離より長くすれば、相互作用計算時の通信を大幅に限定することができる。特に、メッシュ型のノード間ネットワークを持つ並列計算機や、HXBを持つCP-PACSでは、3次元空間をそのままマッピングすることができるので、どちらの通信も隣接ノード間通信となり、非常に有効である。

ところが、空間分割法ではノード毎の計算負荷が変動する可能性が指摘されている³⁾。特に低温、低密度の物理状態のシミュレーションを行なった場合、分子が空間で局所的に集中する可能性がある。したがって、空間分割法では如何に動的負荷分散を行なうかが問題となってくる⁴⁾。

4.2 分子分割法

分子分割法では、分子の位置を考慮せず各ノードに均等な数の分子を配置する。各ノードは自分が持つ分子についての運動を計算する。ノード間での分子の移動はない。

分子分割法が必要となるノード間通信は、主に下の1種類だけである。

- 相互作用計算時の自分以外のノードが持つ分子の位置情報の参照

分子分割法では、位置に関わらず分子をノードに分配することができ、さらにシミュレーション中にも各ノードで処理を行なう分子数は固定される。よって、自然に計算負荷を分散することができ、空間分割法のような問題は生じない。

ただし、この分割方法では自ノードが持つ分子の近隣分子がどのノードにあるか特定することができないため、分子間相互作用のカットオフを行なうためには

PU0	PU1	PU0	PU1
PU2	PU3	PU2	PU3
PU0	PU1	PU0	PU1
PU2	PU3	PU2	PU3

図2 サイクリック分割

全ノード間でデータ交換を行なう必要がある。

以上のように、両方法とも長所短所がある。CP-PACSでは大規模かつ大域的なデータ転送をその強力な通信性能でカバーできるため、計算負荷が均等に分散できる分子分割の方が向いていると考えられる⁶⁾。しかし、この方法では全ノード間で分子の位置情報を交換するため、各ノードには $O(N)$ の通信領域が必要となる。したがって、シミュレーション規模が大きくなるとメモリ不足になることが予想される。一方、空間分割法は、隣接セル間とだけデータ交換を行えば良いので、通信領域を小さく保つことができる。

本研究では、空間分割法の一つであるサイクリック分割を行なうことにより、ブロック分割の欠点として挙げられた計算負荷の不均衡を是正する。

5. サイクリック分割

サイクリック分割では、ドメインをより細かく分割して図2のようにサイクリックにセルをノードに割り付ける。即ち、各ノードは複数セルの情報を受け持つことになる。空間を十分小さいセルに分割すれば、例えば分子が局所的に集中していたとしても計算負荷の分散が可能である。したがって、サイクリック分割はブロック分割の欠点を補うことができる。

ブロック分割の場合は、分子間相互作用のカットオフを行なうことにより、ブロック(セル)がある程度大きければ通信を隣接転送のみに限定することができる。しかし、サイクリック分割ではセルが細くなるため、相互作用の計算には、隣接するセルだけではなく、より遠方にあるセルの情報も必要になる。つまり、大域的な転送が必要となる。メッシュ/トーラスといったネットワークでは、このような広域に及ぶ一斉転送を行なおうとするとメッセージの衝突が生じてしまうため、サイクリック分割は不向きであると言える。それに対し、HXBでは広域に及ぶ一斉転送の多くを無衝突で行なえるため、特に問題はない。

また、サイクリック分割では、ブロック分割に比べて通信量及び通信領域が増大することが予想される。そこで、本研究では、図2の大枠で囲った部分(以降

ではサブドメインと呼ぶことにする)を単位とし、その単位ごとに処理することにより通信領域を減らす。

サイクリック分割を用いたMDシミュレーションの各タイムステップでは、以下の処理を行なう。

- (1) 分子間相互作用の計算 (Force)
- (2) 差分方程式の求解
- (3) セル間での分子移動 (Move)

中でも特に分子間相互作用の計算、そしてセル間での分子移動が実行時間の大部分を占め、それぞれノード間通信を必要とする。以降ではこの2つの処理で行なう通信について述べる。

5.1 分子間相互作用の計算

本研究では、全対全転送を用いて各ノードがサブドメイン内の全てのセルを持つようにし、そして送られてきたセルの中から自ノードが持つセルとの距離がカットオフ距離以下のセルのみを選択するようにする。このように、自ノードが持つセルの情報が必要としているノードに対して転送するのではなく、全ノード間でデータ交換を行ない、そして各ノードが必要なセルの情報のみを選択するようにすることによって、通信パターンを単純化することができる。CP-PACSではバタフライ転送を適用すると無衝突で全対全転送を行なえ、ノード台数を P とすると通信時間を $O(\log_2 P)$ に抑えることができる。

また、全対全転送を行なうため通信領域が大きくなると考えられるが、サブドメイン単位で処理を行なうので、サブドメイン数を D とすると通信領域サイズを $O(N/D)$ に抑えることができる。

5.2 セル間での分子移動

通信パターンが複雑になるのを避けるために、本研究では分子の移動は隣接セル間とだけ生じるように、タイムステップを調節することにする。しかし、元々タイムステップは十分に小さいため、ほとんどの場合この調整は問題とならない。

隣接セル間との分子移動に限定することによって、必要となる通信パターンは隣接転送だけで済む。3次元空間の場合は隣接する26セルに対してpoint-to-point転送を繰り返すことでそのセル外に飛び出した分子を移動することができる。この通信をサブドメインの数だけ繰り返せば、分子移動が全て完了する。

6. 性能評価及び考察

本研究では、サイクリック分割によるMDシミュレーションプログラムを作成し、CP-PACSに実装した。プログラムはFortran90で記述し、通信は全てリモートDMA転送を使用した。本節では、CP-PACS上に実装したMDシミュレーションの性能評価及び考察を行なう。

本測定では、単原子液体の液体アルゴンをエネルギー一定の分子動力学法でシミュレートする。特に断らな

表1 セル・サイズの評価

#Particles per Cell	Move		Force	
	all	comm	all	comm
256	0.02647	0.01971	13.09780	1.80486
32	0.04517	0.02497	2.15169	0.47664
4	0.35987	0.22796	6.23099	0.99096

い限り各測定結果は、無次元単位で時間刻み0.064、系の平均温度2.53、そしてカットオフ距離 2.5σ という条件の下での結果である。

今回の測定では、256台までのノードを用いた。

6.1 セル・サイズ

まず始めに、最も効率的なセル・サイズについて考察する。256ノードを用いた100万分子のシミュレーションを行なった結果、シミュレーション1タイムステップ当たりの実行時間の内訳は表1のようになった。表中のMoveはセル間の分子移動、Forceは分子間相互作用の計算に要した時間である。allとはその処理全体の実行時間(sec)、commはその処理中の通信時間(sec)である。このForceとMoveを足したものが、シミュレーション1タイムステップに要する時間とはほぼ等しい。また、各ノードはセル内の平均分子数が256の時は16セル、32分子の時は128セル、4分子の時は1024セルをそれぞれ担当する。

相互作用のカットオフ計算は、最終的には1分子に対しその分子のカットオフ範囲に入ったセル内の全分子とのチェックになるため、セルを大きくすると1セル当たりの分子数が増加してカットオフ計算量が増大する。よって、セル内の平均分子数が256の場合は、Forceに時間がかかる。また、セルを大きくするとセル内の分子数に不均衡が生じる。したがって、負荷の軽いノードは内部処理が終了と他のノードよりも早く通信処理に入って、他のノードからのデータ転送を待つため、Forceの通信時間が増大する。

反対に、セルを小さくすると1セル内の分子数は減り、負荷分散がし易くなる。しかし、カットオフ計算は最初にセル間で行なってから分子間で行なうようにしているため、セルが小さ過ぎると最初のセル間でのカットオフ計算のコストが極端に増大してしまう。この結果、カットオフ計算全体としてもコストが増加する。また、細かい通信が増えるため、通信時間も増え、さらにセル間での分子移動数も増える。これが1セル当たりの平均分子数が4の場合である。

今回の測定では、1セル当たりの平均分子数が32の場合が最もバランスがとれており、全実行時間が最短となった。そこで以降の測定では、セル内の平均分子数が32になるようにセル・サイズを定める。

6.2 実行時間の内訳

シミュレーション規模により、内部処理、通信の割合がどのように変わるかを見るために、1タイムステップの実行時間の内訳を調べる。表2に256ノ

表2 実行時間の内訳

#Particle	Move		Force		Total	
	all	comm	all	comm	all	comm
2048	0.00066	0.00036	0.00595	0.00224	0.00808	0.00402
16384	0.00074	0.00036	0.03311	0.00802	0.03880	0.01324
131072	0.00507	0.00242	0.26611	0.07301	0.27437	0.07802
1048576	0.04517	0.02497	2.15169	0.47664	2.20663	0.50468
8388608	0.35159	0.17049	18.05750	3.64497	18.52160	3.81737
67108864	2.73380	1.36986	145.88400	25.88930	149.67400	27.26460

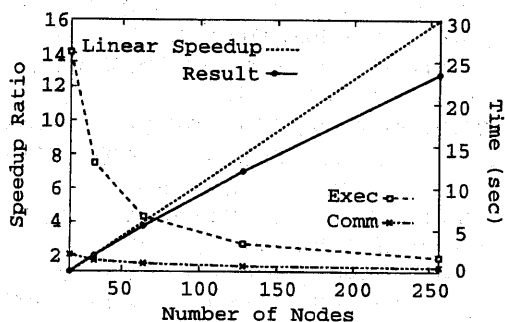


図3 台数効果

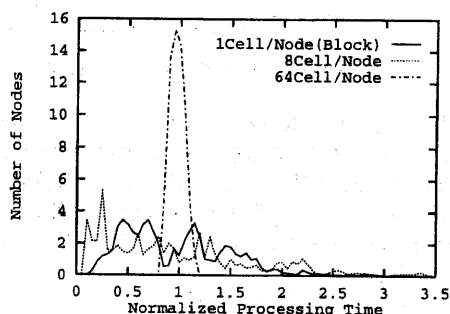


図4 負荷分散状況

ド, 2048 ~ 6.7×10^7 分子での測定結果を示す。Total は1タイムステップを実行するのに要した全実行時間で、Force; Move 以外の処理の時間も含まれている。

表より、Total 時間は線形に増えているのが分かる。これは、ノード台数が等しい場合は、内部処理時間、通信時間共 $O(N)$ だからである(それぞれのオーダーについては後述)。したがって、より大規模なシミュレーションについても容易に実行時間の見積りを立てることができる。

また、通信時間が全実行時間の20%以上を占めているのが分かる。これはサイクリック分割にしたため、

- セル間の分子移動が頻繁に起こる
- 全対全転送を行なっている

ということに加えて、各処理をサブドメイン単位で行なっているため、通信が細粒度になっていることが原因として挙げられる。

6.3 台数効果

ノード台数を増やすことによる速度向上率を測定する。図3に、100万分子のシミュレーションを16~256ノードで行なったときの速度向上率(Result)を示す(16ノードの場合を1とする)。縦軸左側の目盛が速度向上率を表す。また、同図上に1タイムステップ当たりの内部処理時間(Exec)、通信時間(Comm)も示す。縦軸右側の目盛が実行時間を表す。

ノード台数が倍になると内部処理時間はほぼ半分になっているが、通信時間はそれほど減っていない。全対全転送に関して言えば総データ転送量はどのノード台数でも変わらない。しかし、ノード台数が増えるほ

ど通信回数は減って、通信一回当たりの粒度が粗くなる。よって、通信スループットが上がるのでノード台数が増えると少しずつ通信時間が短くなるが、ある程度の通信スループットまで達すると飽和状態になり通信時間は一定になると考えられる。

これは、台数効果の妨げになっているので、全対全転送ではなく point-to-point 転送による実装を行ない、それとの比較を行なう必要がある。

6.4 計算負荷の分散

次に、サイクリック分割によりどの程度計算負荷を分散できているかを調べる。MDシミュレーションでは、低温低圧時に分子が局所的に集中することが知られているので、本測定では温度0.722、分子密度0.256とし、64ノードで16384分子のシミュレーションを行なった。また、シミュレーションは2000タイムステップ行ない、十分に分子が偏っている状態になった1600~2000タイムステップについてタイムステップ毎に記録を採った。測定結果を図4に示す。グラフの横軸は、1タイムステップ当たりの内部処理時間を平均内部処理時間によって正規化してある。

図中の“1Cell/Node”は要するにブロック分割のことである。“1Cell/Node”では良い負荷分散は行なえていないが、“64Cell/Node”は非常に良い負荷分散が行なえているのが分かる。このことから、十分に細かいセルに分割したならば、サイクリック分割は良い負荷分散を行なえることが実測によっても示せた。ただし、“8Cell/Node”の結果を見ると、全く負荷が分散されていない。内部処理時間の標準偏差を

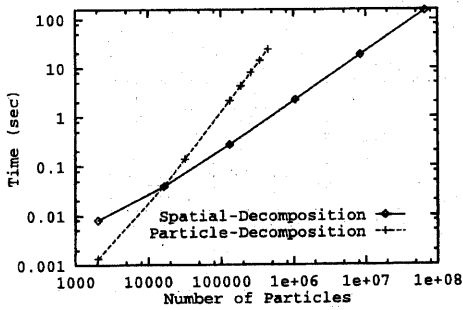


図5 空間分割法と分子分割法の比較 (256 ノード)

求めると, “1Cell/Node” は 0.52, “8Cell/Node” は 0.72, そして “64Cell/Node” は 0.07 となっており, “8Cell/Node” は “1Cell/Node” より計算負荷の不均衡が増大している. 計算負荷の分散を考慮に入れた最適なセル・サイズについては, さらなる検討が必要であると思われる.

6.5 分子分割法との比較

サイクリック分割と分子分割法との性能の比較を行なう. なお, 分子分割法による MD シミュレーションプログラムも, CP-PACS の特性を活かしたチューニングが施されている⁶⁾. 各分子数におけるシミュレーション 1 タイムステップの実行時間を図 5 に示す.

分子分割法では, タイムステップ毎に各分子は他の $(N-1)$ 分子とのカットオフ計算を行なう必要がある. 図 5 で用いたプログラムでは, 一般に bookkeeping 法と呼ばれる手法を用いているので数十タイムステップに一回全分子とのカットオフ計算を行なえば良いが, 計算量のオーダーとしては $O(N^2/P)$ で変わらない. 一方, 空間分割法はカットオフ距離に従ってカットオフ計算を行なうべきセル及びセル数が一意に決まる. 分子密度が同じならば, 1 セル内の平均分子数はセル・サイズによって固定なので, 一分子当たりのカットオフ計算量は総分子数によらず常に一定である. 従って, カットオフ計算量は $O(N/P)$ である.

分子数が少ない場合は, 粒度の細かい通信が多い空間分割法の方が 1 タイムステップ当たりの実行時間が長くなっているが, 上述のカットオフ計算量が少ないことから分子数が増えるほど空間分割法の方が良い結果を示している.

さらに, 分子分割法では $O(N)$ の通信領域サイズが必要なに対して, 空間分割法ではサブドメイン数を D とすると通信領域サイズは $O(N/D)$ で済む. 図中の 6.7×10^7 分子の場合は, 8192 個のサブドメインに分けているため, データ領域 28.7MB に対して通信領域は 0.8MB でしかない. したがって, メモリ消費量に関しても空間分割法の方が優れている.

7. おわりに

本研究では, 超並列計算機 CP-PACS 上で空間分割法による分子動力学法シミュレーションを行なうプログラムを作成し, その性能評価を行なった.

その結果, 空間分割法では通信領域を最小に抑えることができるため, 分子分割法では実行できない大規模なシミュレーションも行なえた. さらに, メッシュ/トラス・ネットワークでは衝突が起きてしまうような大域的な一斉転送も CP-PACS の HXB 上では無衝突で行なえるため, サイクリック分割を採用することができ, この結果計算負荷の分散も図れた. ただし, この負荷分散についてはさらなる検討が必要である.

台数効果については, 通信がボトルネックとなって線形なスピードアップよりは多少落ちている. 全対全転送を point-to-point 転送に置き換えた場合の測定も行ない, その比較を行なう必要がある.

今回の実験により, CP-PACS のように大域通信に強い並列計算機を用いた場合, 分子分割法と空間分割法が持つ実行時間と必要メモリ量のトレードオフにより, ノード台数と分子数の関係から, 最適なアルゴリズムが異なることが明らかになった.

今後の課題として,

- 長距離相互作用, 多原子分子間ポテンシャル等を採り入れたさらに深いシミュレーション実験

- 通信の最適化
- 負荷分散の考察

などが挙げられる.

謝辞 CP-PACS を利用する機会を与えて下さった筑波大学計算物理学研究センターの関係者各位に感謝します. なお, 本研究の一部は科学研究費補助 (奨励 A09780234) によるものである.

参考文献

- 1) 小澤 哲, 篠嶋 妥 訳: 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) 岩崎 洋一, 中澤 喜三郎ほか: 計算物理学と超並列計算機 — CP-PACS 計画 —, 情報処理, vol.37, No.1, pp.10-42 (1996).
- 3) D.M.Beazley, P.S.Lomdahl: *Message-passing multi-cell molecular dynamics on the Connection Machine 5*, Parallel Computing 20, pp.173-195, (1994)
- 4) 林 亮子, 堀口 進: 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, JSPP'96 論文集, pp.81-88, (1996).
- 5) 松原 正純ほか: 超並列計算機 CP-PACS のネットワーク性能評価, 情報処理学会研究報告. HPC67-10, pp.55-60, (1997).
- 6) 服部 正樹ほか: 超並列計算機 CP-PACS における分子動力学法シミュレーション, 情報処理学会研究報告. HPC66-2, pp.7-12, (1997).