

三次元空間における粒子衝突とクラスターにおける イベントリストの効率化

Reduction of the Priority Queue for Paul's $O(1)$ Algorithm

野口耀介

志田晃一郎

Yosuke Noguchi

Koichiro Shida

東京都市大学大学院 工学研究科 情報工学専攻

Graduate School of Research Division in Engineer, Tokyo City University

東京都市大学 知識工学部 情報科学科

Faculty of Knowledge Engineering, Tokyo City University

1. はじめに

MD(分子動力学)は様々な分野で活用されており、効率化は重要な課題となっている.

MD(分子動力学)の分野ではイベントリスト(プライオリティーキュー)を用いる手法と、時間刻みを用いる手法が存在する.ハードコアポテンシャルな粒子を使用する際は主にイベントリストを用いる手法が使用されており,ソフトコアポテンシャルな粒子を使用する際は主に時間刻みを用いる手法が使用されている.本研究ではイベントリストを効率化することでシミュレーションの高速化させる事を目的としている.イベントリストはシミュレーションの計算処理に関わるデータ(衝突時刻や粒子番号など)が格納されており,物理シミュレーションにおける予定表の役割を担っているため計算処理に大きな影響力を持っており効率化させることでシミュレーションを高速化させることが出来る.文献[1]の Paul の手法では,図.1 の様にイベントリストが木構造と複数の配列から構成されており,直近の衝突に関しては木構造に格納し残りをいくつかの配列に格納する.この際、木構造と配列

の大きさを統一することで計算量を $O(1)$ まで抑えることが出来ている.

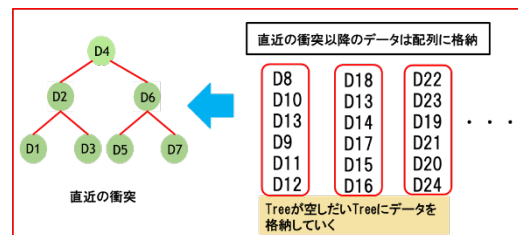


図.1 Paul のイベントリスト

文献[2]Shida_Anzai の手法では図.2 の様にイベントリストが配列で構成されており,本来予測されるすべての衝突をイベントリストに格納する所を一定数格納するだけに留めている.

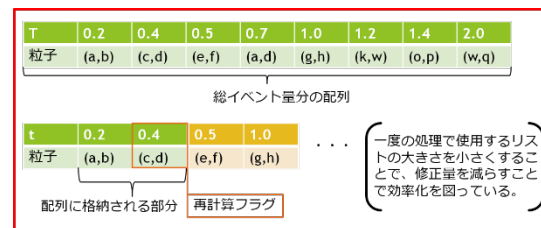


図.2 Shida_Anzai のイベントリスト

イベントリストはイベント毎にデータの修正が必要となるため使用するイベントリストに格納されているデータの数が多量イベント毎の修正量も多くなる,また頻繁に修正が行われるため一番初めにイベント

リストに格納されたデータの中でも終盤に格納されたデータが実際に実行されるケースは稀である。そのため実行される確率の低いデータを初めから切り捨てることで修正に必要な膨大な計算を削減することができ、また使用する配列の領域も抑えることが出来るため使用するメモリが削減され速度の向上につながる。終盤のデータの内に実行可能なデータが含まれていることがあり、その際はそのデータについて再計算する必要があるが配列の大きさを n にすることで再計算のコストを抑えることが出来る。

2. 提案手法

提案手法は図.3の様に従来手法である Paul の手法に Shida_Anzai の手法を適用させた形になっており、イベントリストの構造は木構造と配列を合わせた形で直近のいくつかの衝突データは木構造に格納し残りの衝突データを配列に格納する。この際すべてのデータを格納するのではなくすべての衝突データを時間でソートした後、衝突順から一定量のデータをイベントリストに格納し残りのデータは切り捨てる。

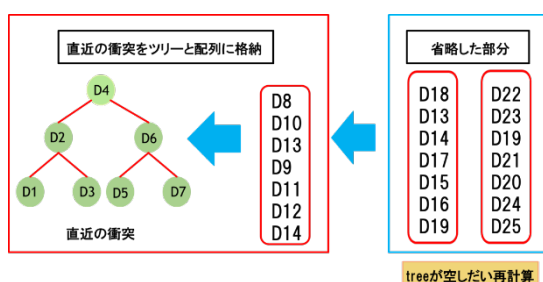


図.3 提案手法のイベントリスト

これによりオーバーヘッドとメモリの使用量削減による高速化が望める。

今回の実験の条件として粒子数 20000 個、計算回数 100000 回を仮定したイベントリストのみの簡易的なプログラムで行った。

3. 結果

従来の Paul の手法と比較して高速化が図.4より確認できた。

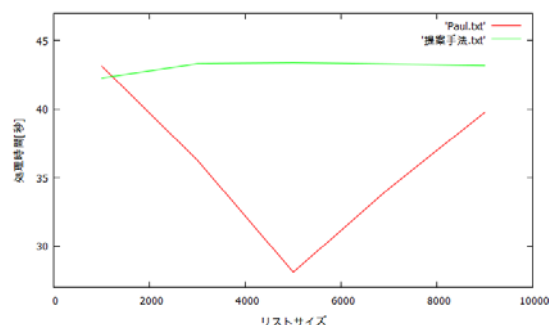


図.3 結果比較

Paul の手法と比較して全体的に高速化できている事がグラフから取れる。5000 の時点が最も高速化が出来ており、再計算と修正にかかる時間の最も少なかったと言える。実験のパラメータや修正と再計算にかかる時間は違ってくるため最も効率的なイベントリストは修正に時間が掛かる実験ほど左にずれ、再計算に時間が掛かる実験ほど右にずれると考えられる。

4. まとめと課題

Paul の手法に Shida_Anzai の手法を適用することでオーバーヘッドとメモリの使用量を削減しシミュレーションの高速化を図った。簡易的なプログラムだけでなく実際の物理シミュレーションを利用し検討する。参考文献

[1]Paul,G.Acomplexity $O(1)$ priority queue for event driven molecular dynamics simulations. Journal of Computational Physics 221(2007),615-625.

[2]K.Shida and Y.Anzai, Reduction of the event-list for molecular dynamic simulation, Computer Physics Communications,69(1992),317-329