

Title	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
Author(s)	林, 亮子
Citation	
Issue Date	1998-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	none
URL	http://hdl.handle.net/10119/859
Rights	
Description	Supervisor:堀口 進, 情報科学研究科, 博士

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

林 亮子

北陸先端科学技術大学院大学

1998 年 1 月 16 日

論文の内容の要旨

電子計算機の発達にともない、コンピュータ・シミュレーションなどの大規模科学技術計算は、先端科学技術分野において重要な役割を果たすようになってきている。特に多数のプロセッサ要素からなる並列計算機は、膨大な計算能力と巨大な記憶領域を有しており、大規模科学技術計算の基盤技術として期待されている。しかし、科学技術計算を並列計算機上に実装する並列化手法には様々な問題がある。本論文では分子の運動を模擬するシミュレーション手法、分子動力学法 (MD) を用いた大規模シミュレーションの並列化を行なう。

MD は、物理や化学、材料科学の分野で重要なシミュレーション手法である。MD は様々な分子を扱うことができるが、特に巨大分子は、並列計算機上で行なう並列 MD シミュレーションによってしか扱うことができない。巨大分子を扱う並列 MD シミュレーションにおいては、一般性を持った並列処理時間の評価式、計算負荷の平均化や分子内相互作用の並列化の重要な問題がある。本論文ではプロセッサ間通信時間に着目し、並列化手法の一つであるドメイン分割法を用いたシミュレーションの並列処理時間を定式化する。そして、並列処理時間の評価式により、メッセージ通信型並列計算機に最適なドメイン形状を定められることを明らかにする。ドメイン分割法において計算負荷を平均化する場合、プロセッサ要素の規則的な近傍関係を保存する必要がある。本論文では、プロセッサ要素の近傍関係を保存する固定分配セルの概念を導入した動的負荷分散法を提案し、計算負荷の平均化効果を詳しく議論する。分子内相互作用が働く直鎖高分子の並列 MD シミュレーションでは、モノマーを検索する手順を導入したドメイン分割法を用いる。しかしモノマー検索時間がシミュレーション実行時間を増加させるため、連続したモノマー (鎖片) 単位の割り当てによって検索時間を短くする鎖片割り当てドメイン分割法を提案し、その評価を行なう。

本論文で得られた結果を以下に述べる。本論文で定式化したシミュレーション実行時間評価式を用いて、これまで明らかではなかった各ドメイン形状の最適な範囲を示した。最適ドメイン形状は、並列計算機上での実験結果と一致した。固定分配セルを用いた動的負荷分散法は、これまで困難であった 3 次元 MD シミュレーションの計算負荷平均化を、プロセッサ要素の近傍関係を規則的に保ったまま行なうことができた。鎖片割り当てドメイン分割法は直鎖高分子の MD シミュレーションのモノマー検索時間を削減し、通常用いられるドメイン分割法よりもシミュレーション全体の実行時間を削減することができた。

キーワード： 超並列計算機、分子動力学法、プロセッサ間通信時間、動的負荷分散法、直鎖高分子