審査の結果の要旨

氏 名 蓬来 祐一郎

並列計算環境は比較的安価に構築可能なクラスタ・グリッドをはじめとしてより身近になりつつあるが、それを構成する計算機の計算性能・通信性能・ネットワークトポロジーは多様化している。このため、このようなヘテロな並列計算環境でよりよい性能を出すには、これら計算機の不規則性、不均一性からくる問題に対処しなければならない。本論文では、このような並列計算の持つ課題について、メッセージ通信による並列化を行った分子動力学法を対象に研究を行っている。また、不規則な粒子の分布をもったシミュレーションでは、領域ごとに計算負荷が大きく異なり、従来の分子動力学法では、このような不均一性、不規則性を含んだ問題の負荷分散はほとんど考慮されて来なかった。これに対し、本論文では、そのような不規則な問題に対しても高い並列性を保つ研究を行っている。

分子動力学法は反復計算を行い、各反復では粒子への力の計算を行った後、更新された粒子の位置もしくは力の情報を通信するが、各々の力の計算の順序に依存関係はない。このような場合の並列化手法としては、全プロセスが全粒子の位置情報の複製を持つ粒子分割法などの手法と、データを分割して持つ空間分割法などの手法に大別される。本論文では、この2つの並列化手法について、通信時間の削減のためにそれぞれ異なるアプローチの手法の研究を行っている。一つは全プロセスが複製を持つ手法で用いられる集団通信の最適化、もう一つは、小セルによる空間分割法を用いた場合のデータ割り当てによる隣接通信の最適化である。本論文は、全8章で構成されており、2章、3章、4章は粒子分割法における通信の最適化手法について述べられ、5章、6章、7章で空間分割法における通信の最適化手法について述べられている。

まず1章では、並列分子動力学法の研究の背景と動機について述べ、分子動力学法において通信が並列化効 率を下げる要因となっていることを説明している。2章では、ヘテロなネットワーク環境における集団通信 の研究の背景と既存研究の問題点について述べられ、提案手法との比較を行っている。3章では、木構造型 ネットワークのモデル化を行い、ネットワークの対称性を考慮し、効率的に point-to-point の通信による Broadcast の最適スケジュールを探索するアルゴリズムを提案している。このモデルでは、単純な store and forward モデルとは違い、ルータやハブのような中継ノードが考慮されている点、通信のパイプライン化を通 信の競合を避けて行える点で従来のスケジューリング手法から大きく改善されている。4章では、提案アル ゴリズムにより最適化されたブロードキャストを実際のヘテロな並列計算機環境上で実験を行い、モデルと 提案手法の有効性を確認している。また、分子動力学法において集団通信の一部に用いた場合など、メッセ ージサイズが大きい場合に特にその有効性が示されている。5章では、空間分割法の研究の背景と従来のマ ッピング手法の問題点について述べられており改善すべき点を挙げている。6章では、通信量の見積りを正 確に行うために並列計算のデータ依存関係を計算グラフとして定義し、ネットワークの不均一な性能を考慮 したグラフマッピング手法を提案し、詳細を説明している。また、分子動力学法データのマッピングを計算 する実験により、既存手法からの優位性を示している。 7 章では、実機上で提案するマッピング手法と既存 の手法を比較し最大 60%程度の通信時間の削減が可能であることを示し、提案したモデルとアルゴリズムの有 効性を示している。また、粒子分割法、空間分割法による局所性の違う問題に対する通信所要時間の特性の 違いについて論じ、両手法の有効なデータ、不得手なデータについて定性的に論じている。8章では、研究 の総括をし、通信が不均一なネットワークにおいて、ネットワークを適切に考慮した通信が大きく通信性能 を改善可能であることについて論じている。

以上、本論文は、ヘテロなネットワークで結ばれたクラスタ環境において、従来、通信時間が大きく並列 効果を上げることが困難であった分子動力学法などの応用に対し、それらの性能を大幅に改善する手法を提 案したものである。

よって本論文は博士(情報理工学)の学位請求論文として合格と認められる。