

## 「研究紹介と計算機環境」

東北大学大学院工学研究科量子エネルギー工学専攻

博士課程後期3年 鈴木 求 (すずき もとむ)

今年度のサイバーサイエンスセンター利用相談室の金曜日の利用相談員を担当させていただくことになりました鈴木求と申します。博士1年から利用相談員を担当させていただき、今年度で3年目となります。主に並列計算機の使い方や Fortran、C、MPI プログラムについて担当しています。

私の研究室はスタッフ1名、大学院生6名、学部生3名の計10名の研究室です。研究室の専門分野は原子炉物理というもので、あまり馴染みの少ない分野かも知れませんが、主に原子力発電所などで使用されている原子炉の中性子輸送を対象とする分野です。原子炉の内部では非常に広いエネルギー範囲で中性子が存在しています。この中性子が物質と衝突することで核反応が起き、その際の発熱を利用することで発電を行います。この過程の中で中性子をいかに効率よく利用するかが非常に重要で、私の研究室ではシミュレーションや実験から中性子の挙動を把握するための解析技術や計測技術などの開発・研究に取り組んでいます。シミュレーションではできるだけ厳密に計算できるように様々な方法が取り組まれていますが、最も高精度な解析として存在するのはモンテカルロ法を用いた解析です。モンテカルロ法は元々、中性子の物質中における挙動を追いかけるためにフォン・ノイマンにより考案された手法です。このモンテカルロ法を用いることで、空間、時間、エネルギーの変数に対して近似を用いることなく計算が可能となり、物理現象に近い状態を解析することが可能となるのです。しかし、この計算方法は乱数を用いた統計的処理を行うため統計誤差が生じてしまい、誤差を小さくするためには多くの計算時間を要します。加えて中性子のようなミクロスケールの粒子を原子炉といった数メートルの体系で追いかけるため、計算体系も複雑になり計算時間も膨大になります。このようなモンテカルロ計算には、日本やアメリカの研究所が開発した計算コードを利用し計算を行っており、MPI や PVM を用いた並列計算が利用できます。これらの計算コードは並列化効率やベクトル化効率が高く、並列計算を用いることで大幅に計算時間を短縮することが可能です。

私の研究では、加速器駆動システム (ADS) という新型原子炉を対象としたプログラムの開発と解析を行っています。ADS は加速器と未臨界原子炉、核破砕ターゲ

ットを組み合わせたハイブリッドシステムです。加速器から陽子ビームを入射し、核破砕ターゲットで核破砕反応を起こし中性子を発生させ、この中性子を利用して原子炉を駆動します。原子炉にはマイナーアクチニドが燃料として用いられており、駆動と同時に核変換処理が行われます。ADS は高い核変換効率と固有の安全性を持っていることから高レベル放射性廃棄物の核変換処理を行う有効な手段として研究が行われているものです。ここでは日本原子力研究開発機構で開発されている重イオン輸送統合コードシステム PHITS[1]を用い、Fig.2 に示すような ADS 炉心モデルに対して、1.5GeV の陽子ビームが入射した場合の計算を行い、炉心中心断面における陽子分布 (Fig.3) と核破砕反応により発生した中性子分布 (Fig.4) を示しています。PHITS コードもモンテカルロ法を用いた計算コードで MPI を用いた並列計算が可能です。私はこのような計算コードを用いて ADS の非定常解析を行うプログラムの開発を行っています。主に Linux 上で Fortran や C 言語を用い、ADS の核特性から発熱までをシミュレートするための中性子輸送・熱流体の連成プログラムの開発を行っており、センターの大型並列計算機によくお世話になっています。

私の研究室では Table1 に示すような計 8 台の計算機環境で計算を行っています。膨大な計算を行うには並列計算が必要となり、すぐに CPU が不足してしまうことや、大容量のメモリを必要とする計算 (1CPU で 2GB 程度使用する計算) の場合は 1 つのジョブで計算機を占有してしまうといった理由から、大規模計算を行う人は並列計算機を利用することにしています。

サイバーサイエンスセンターの並列計算機は結論から言うと非常に速いです。当然のことですが、研究室の環境ではできない環境で利用することができるからです。ここでは計算速度が速い理由を考えてみました。(裏打ちできる証拠はないのでこれが正当な理由かどうかは確かではないですが。)

1 つ目の理由は「並列数が多い」ことです。並列計算機では最大 64 の並列計算が利用可能です。並列化効率が高いプログラムならば非常に高速に処理することができます。研究室単位でこれだけの並列計算を可能にするクラスタリング PC を用意するのは、購入金額、電気代、管理の手間を考えると非常に大変です。並列効率が高いプログラムであればあるほど非常に有効なものだと考えられます。

2 つ目は「Itanium2 プロセッサを利用できる」ことです。Itanium2 のクロック数は 1.6GHz と近年の CPU から見ると大した数字ではないのですが、L3 キャッシュを 24MB 持っており、ベンチマークを取ると数 GFLOPS もの性能を出します[2]。

Table2 に最近の Intel 製の上位 CPU にあたる Core2 シリーズと比較をしてみました。Core2 シリーズを見るとコア 1 個あたり 3MB のキャッシュを持っていますが、Itanium2 は 4 倍程度のキャッシュが利用可能ということになります。つまり 1 度により多くのデータをキャッシュに上げることができるメリットが生まれ、処理を高速に行うことが可能になると考えられます。他にも多くの要因があると思いますが、こういった理由から Itanium2 が早いものと考えられます。

3 つ目は「大容量メモリ、高速通信環境」です。並列計算機では最大で 512GB のメモリが利用可能です。64CPU で単純に考えると 1CPU あたり 8GB の利用ができるのです。研究室のクラスタリングではこれだけのメモリを利用することは困難です。せいぜいスワップを利用することになり、遅延が発生してしまいます。また、研究室や一般的なネットワークでは、100Mbps もしくは 1Gbps です。センター内では高速通信が可能で、数 Gbps の環境が用意されています。また、GFS (Global File System) と呼ばれる高速なファイルシステムを用いています。そのため複数ノードを用いる MPI プログラムのような場合、MPI 通信時や HDD アクセスに対して非常に高速な通信が可能であるためこういった環境下で利用できることは計算速度の向上につながると考えられます。そのため、研究室の計算機環境では I/O ウェイトやスワップが発生し遅延が生じてしまうような大規模メモリの計算における大容量の計算出力もセンターの設備だとスムーズに作業することができるのです。

色々と言いましたが、自分の関連分野からではありませんが利用相談員として並列化処理やクラスタリング、プログラミングなどについて微力ながらお役に立てればと思っています。どうぞよろしくお願いいたします。

Table 1 研究室の計算機環境

Architecture	CPU	Memory
x86_64	QuadCore Xeon3.00GHz x2	16GB
x86_64	Xeon 3.40GHz x2	4GB
x86_64 (x2)	Xeon 3.00GHz x2	4GB
IA64 (x2)	Itanium2 1.66GHz x2	16GB
IA32	Pentium4EE 3.4GHz	2GB
IA32	Xeon 2.80GHz x2	2GB

Table 2 CPU の比較

CPU	コア数	クロック数	FSB	L2 or L3 キャッシュサイズ
Itanium2	2	1.6GHz	400MHz	24MB
Core2Duo (E8400)	2	3.0GHz	1333MHz	6MB
Core2Extreme (QX9770)	4	3.2GHz	1600MHz	12MB

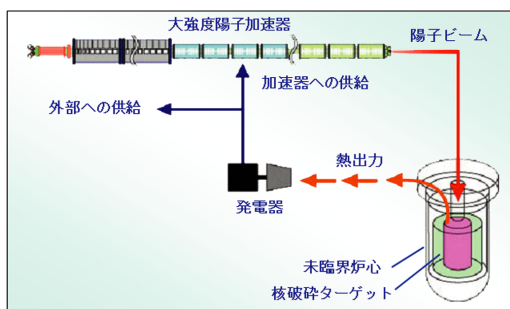


Fig.1 加速器駆動システム (ADS) の概念図

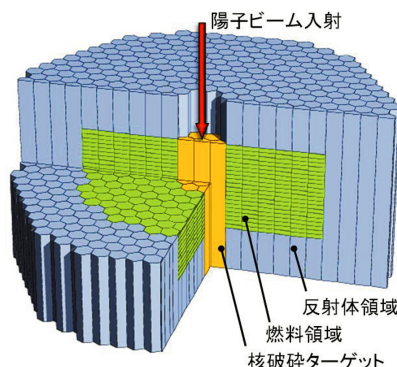


Fig.2 ADS 計算モデル

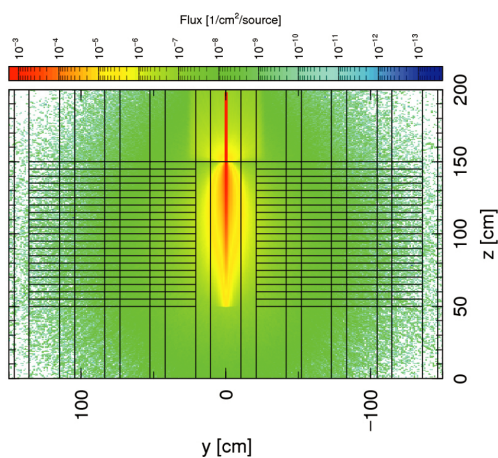


Fig.3 陽子分布の計算結果

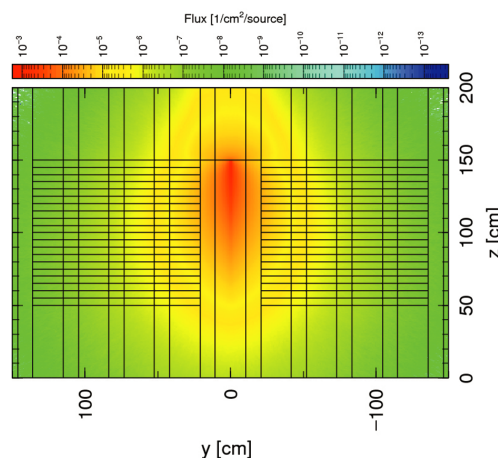


Fig.4 中性子分布の計算結果

[1] H. Iwase, K. Niita, T. Nakamura, "Development of general purpose particle and heavy ion transport Monte Carlo code", J. Nucl. Sci. Technol., 39[11], 1142 (2002).

[2] 小野敏、大泉健治、伊藤英一、岡部公起、小林広明、“新並列コンピュータシステムについて”、SENAC Vol.40、No.1、(2007)