

## 粒子輸送モンテカルロ・コードの並列処理

5E-8

## — MCNP コードの並列化 —

川崎 琢治, 樋口 健二

日本原子力研究所 計算科学技術推進センター

## 1. はじめに

中性子, 光子, 電子の輸送問題を解くモンテカルロ・コード(以下, MC コード)の並列処理について述べる。一般に, MC コードの並列化においては, 各粒子に対する計算の独立性を使って, 各プロセッサに対し複数の粒子を割り当てる手法(以下, 粒子並列法)を用いる。この手法により, 主要計算部分である粒子シミュレーションが並列化できる。しかし, 高並列計算機において実際に高い速度向上率を得るためには, 並列化率, 負荷分散, 通信処理の最適化が必要であり, 実用の MC コードの並列処理においては, これらの最適化が困難である場合が多い。原子力分野で広く用いられている汎用の MC コードの並列化事例を通し, 上記3つの因子に関する解析結果を述べる。

## 2. 計算モデル

## 2.1. 計算コード

MCNP コード (Version 4A) は, 米国のロスアラモス国立研究所で開発された MC コードで, 原子力分野で安全性の計算や炉心設計等に広く用いられている。MCNP コード・パッケージ中の PVM 版をチューニングし (PVM 関数を使用したプラットフォーム固有の通信ライブラリへ書換え), 性能評価を行った。

## 2.2. 入力データ

チューニング及び性能評価においては, 人体に対する被曝線量計算問題を用いた。人体模型は, 約 200 枚の二次曲面によって記述された約 100 の領域によって構成される。人体模型に前方から中性子の平行ビームを照射した場合の各臓器に対する線量当量を求める。エネルギー 0.1 MeV の中性子を百万個追跡している。

## 2.3. 計算機システム

使用した計算機は, 平成7年度に原研が導入した, 分散

メモリ・スカラ並列計算機 Intel Paragon XP/S (以下, Paragon) である。256 台のノードで構成され, 各ノードは, 32 MB の分散メモリを有する。各ノードの演算処理性能は 75 MFLOPS, ノード間の最大通信速度は 200 MB/秒である。

## 3. 並列処理結果及び考察

本コードにおいては, 次に示す5つの処理がマスタースレーブ方式で並列処理されている。

- 処理 A 粒子シミュレーションを行うための形状データ及び断面積データの読み込み・内部変換等の前処理
- 処理 B 上記データのマスターからスレーブへの送受信
- 処理 C 粒子シミュレーション
- 処理 D 粒子シミュレーション結果から算出される統計データのスレーブからマスターへの送受信
- 処理 E 統計データの集計及び出力

処理 A 及び処理 E は, マスターにおける逐次計算, 処理 B 及び処理 D は, マスタースレーブ間のデータ通信, 処理 C は, 複数スレーブによる並列計算である。1 ~ 256 台のプロセッサを用いた時の処理 A ~ 処理 E の処理時間を表 1 に示す。

## 3.1. 並列化率

処理 A 及び処理 E の処理時間は, 約 260 秒である。また, 逐次処理を行った時のコードの処理時間は, 約 5,725 秒である。したがって, 並列化率 (コード全体の逐次処理時間に対する並列化された部分の逐次処理時間の比率) は,  $\frac{(5725 - 260) \text{秒}}{5725 \text{秒}} = 0.955$  である。アムダール則から簡単にわかるように, この問題に対する本コードの並列処理による速度向上率は, 22 倍が上限となる。

### 3.2. 負荷分散

処理 C の負荷分散については、各プロセッサに均等数の粒子を割り当てる静的な粒子割り付けを行った。プロセッサの数を  $N$ 、追跡粒子数を  $M$  とすると、各プロセッサには、 $\frac{M}{N}$  個の粒子が配分される。いま  $i$  番目のプロセッサにおける並列化部分の処理時間を  $T_i$  とした時、負荷の不均衡による効率低下  $F_{im}$  を次のように定義する。

$$F_{im} = \frac{\text{実際の並列処理時間}}{\text{理想的な並列処理時間}} = \frac{\max\{T_i | i = 1, N\}}{\text{ave}\{T_i | i = 1, N\}}$$

$F_{im}$  は、プロセッサ台数に比例して増大する。プロセッサ台数を変化させた場合の  $F_{im}$  を図 1 に示す。

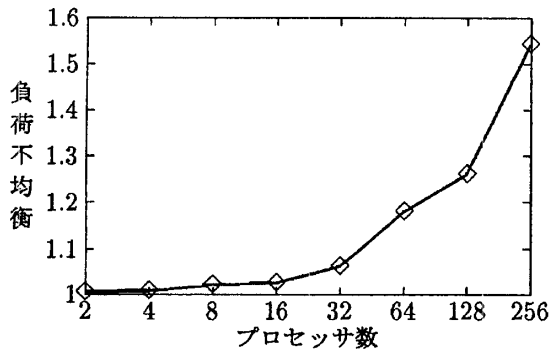


図 1: 負荷の不均衡

マスタースレーブ方式の粒子並列法における負荷分散手法として、静的な粒子分配法と動的な粒子分配法がある。静的な粒子分配法を用いた場合、 $F_{im}$  は大きい、分配操作の回数が少ないためマスタースレーブ間の通信による性能低下  $F_{com}$  は小さい。動的な分配法を用いて、 $F_{im}$  を小さくした場合、 $F_{com}$  が増大する。上記入力データの場合、 $M$  が大きく、 $x$  (粒子 1 個の平均処理時間) が小さいことから、 $F_{im}$  よりも  $F_{com}$  を重視し、静的な粒子割り付けを行った。 $F_{im} + F_{com}$  を最小化する粒子の最適な分配法は、 $M$ 、 $N$ 、 $x$  に依存する。この点については [1] に詳しい。

### 3.3. 通信処理

プロセッサ台数の増加に伴い、処理 C がほぼ線形に減少

するのに対し、処理 B 及び処理 D、即ち通信処理時間は大幅に増大する。Paragon 上のマルチキャスト関数の処理時間は、理想的な値  $\log N$  に近い値とは言い難い。そこで、図 2 のように 2 次元格子の左上すみ(マスター)/右下すみから対角線に沿って送受信を行う方式により最適化を図った。従来方式 (Paragon 上のマルチキャスト関数) との比較結果を表 2 に示す。この方式を実装した場合、通信処理について 10 倍程度の性能向上が期待できる。

●はノード、ノード間の→にある数字は送受信経路の順番を示す。

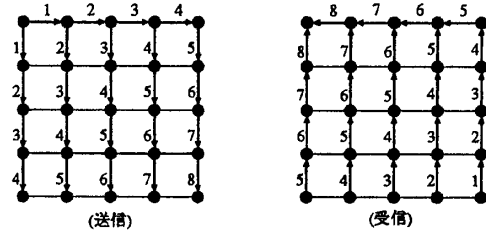


図 2: 対角方式の送受信

表 2: 送受信処理時間 (秒)\* の比較

PE 数	2	4	32	64	128	
PE の配置	2 × 1	2 × 2	1 × 32	8 × 8	8 × 16	
送 信	従来方式	0.015	0.029	0.315	0.815	2.142
	対角方式	0.015	0.023	0.027	0.042	0.053
受 信	従来方式	0.016	0.048	0.697	1.657	4.146
	対角方式	0.016	0.034	0.131	0.126	0.219

\* 8 バイトデータの長さ 65,536 の配列の送受信処理時間。

### 4. おわりに

MCNP コード (Version 4A) を並列化し、並列処理性能に関わる 3 つの因子について評価した。今後の課題は、1) 一層の性能向上のための最適化 (並列化率の向上、負荷の均等化、マルチキャスト関数の性能向上等) を実装すること、2) 他の問題についても性能評価を進め、汎用性を向上させること、である。

### 参考文献

- [1] 武宮, 本間, 太田, 粒子輸送モンテカルロコードの高並列処理 - EGS4 コードの並列化 -, 第 53 回情報処全大, 5E-07(1996).

表 1: MCNP コードの処理別実行時間

PE 数	1	2	4	8	16	32	64	128	256
処理 A	258.5	259.0	256.3	255.9	255.9	256.2	257.4	259.0	258.0
処理 B	-	5.6	8.1	10.3	11.8	13.9	20.3	37.3	83.4
処理 C	5463.9	2713.7	1354.6	678.3	339.9	170.7	86.1	43.9	22.6
処理 D	-	21.2	15.0	20.9	15.6	19.2	25.4	30.8	64.3
処理 E	3.0	3.2	3.6	2.0	1.3	1.7	1.6	1.3	1.3
処理全体	5725.5	3005.9	1640.7	970.0	627.2	464.6	393.9	375.2	432.6
速度向上率	1.0	1.9	3.5	5.9	9.1	12.3	14.5	15.3	13.2

注) 処理時間の単位は秒、複数 PE での処理 B, 処理 C, 処理 D は平均処理時間。