

3 D-4 高並列計算機によるモンテカルロシミュレーション - 中性子輸送モンテカルロシミュレーション VIM -

川倉 康嗣[†]・植之原 雄二[‡]・鈴岡 節[†]

[†] (株) 東芝 総合研究所・[‡] (株) 東芝 原子力技術研究所

1 はじめに

数値解析の対象となる問題が複雑化するにつれて、モンテカルロ法を用いて現象を計算機上で多数回実現することにより解を推定するモンテカルロシミュレーションが注目されつつある。モンテカルロ法では、繰り返し回数が多いほど精度のよい解が得られる。そこで、並列計算機を用いて独立したシミュレーションを同時に行い、その結果を統計処理することにより、数値実験と言えるほどの詳細な結果を得ることができる。

本研究では、モンテカルロシミュレーションの一例として、原子力分野で用いられている中性子輸送問題¹⁾を取り上げた。中性子の振舞いはランダムで統計的なものであり、忠実に物理モデルに従ってシミュレートすることにより、物質中でのそれらの粒子の集合としての物理量や特性を求める。中性子を扱う多くのシミュレーションコードのうち、VIM と呼ばれるコードを並列化し、実際に高並列計算機の試作機²⁾上に移植した。

2 高並列計算機の試作

超並列計算機のパイロットモデルとして、128 台の要素プロセッサ (PE) を装備する試作機を開発した。この試作機では、独自に開発した base-m n-cube ネットワークを採用している。また、共有メモリは持たず、プログラム間の通信はメッセージ・パッシングによって行う。

この並列計算機上でプログラムを実行するには、ホストプログラムと PE プログラムとを作成する。オペレーティングシステムも、ホスト上で稼働するホスト OS と PE 上で稼働する PEOS とから成る。この OS は、シングルユーザ・シングルタスクであり、メモリ管理およびメッセージ管理を行う。また、ホスト側、PE 側のそれぞれに、ライブラリの形式で通信や同期などの機能が提供されている。

プログラミング言語には、C および FORTRAN を採用している。PE プログラムに関しては、PE は制御端末を持たない、ファイルアクセスができないという制約がある。

3 中性子輸送モンテカルロシミュレーション VIM

VIM では、核分裂物質が存在する領域において、核分裂中性子の空間分布の initial guess を与えて多数の中性子を追跡することにより、徐々に正確な定常状態の中性子分布に近付けていく³⁾。追跡する中性子の全個数

を複数のグループに分配し、そのグループ単位でシミュレーションを行う。それらの結果を統計処理することで中性子束等の最も確からしい値と標準偏差を求める。これらのグループをバッチと称する。第2バッチ以降では、前のバッチで中性子が吸収された位置を基に中性子の出発点を決定する。従って、バッチ間は独立ではない。

各々の中性子の追跡は、自由飛行過程と衝突過程の2段階に分けられる。衝突の結果、中性子が原子核に吸収されるまでこれらを交互に繰り返す。

VIM では、通常原子炉計算で行うような少数エネルギー群で断面積を平均化するようなことはせず、中性子と原子核の核データに基づき、中性子のエネルギー変化を忠実に再現する。核データが詳細であればあるほど、中性子の詳細な振舞いを調べられるかわりに、データ量は膨大なものとなる。本研究では、1.6 MB の核データを使用した。

4 高並列計算機への移植

VIM では、追跡する中性子間の相互作用がないので、PE 間通信はない。各 PE で独立にシミュレーションを行い、その結果を統計処理し最終結果を得る。

各 PE は 2MB のメモリを持つが、OS やメッセージバッファとして使用する領域を除くと、約 1.7MB がユーザに解放されている。ユーザは、この領域内にプログラム、データおよびスタックのすべてを格納しなければならない。VIM では、大容量の核データに基づいてシミュレーションするので、1PE 上にすべてのデータを載せることができない。

そこで、核データを2等分し、核データの高エネルギー部を格納し VIM の前半を実行する PE と低エネルギー部を格納し VIM の後半を実行する PE とをペアにして VIM を実行する。バッチ間に依存性があるため、前半を受け持つ PE から後半を受け持つ PE に処理を引き継いだ後、前半を受け持つ PE で次のバッチを開始することはできない。両 PE は交互に動作するので、稼働率の上限が 50% となる。

5 PE 稼働率の推定

並列計算機の占有時間は、処理時間が最も長い PE によって決まる。各 PE の処理時間が異なる場合の稼働率は、全 PE の処理時間の平均値と最も長い処理時間との比で与えられる。

VIM では本質的に PE ごとの処理時間にはばらつきがある。ただし、追跡する中性子数が十分に多いならば、処理時間の統計的分布を推定できる。以下では、交互に動作する 2 台の PE を単位とする。

中性子 1 個を追跡するのに要する処理時間はある確率密度分布に従う。m 個 ($m \gg 1$) の中性子を追跡するの

A Neutron Transport Monte Carlo Simulation on the Highly parallel computer
Yasushi Kawakura, Yuji Uenohara, Takashi Suzuoka
TOSHIBA Corporation.

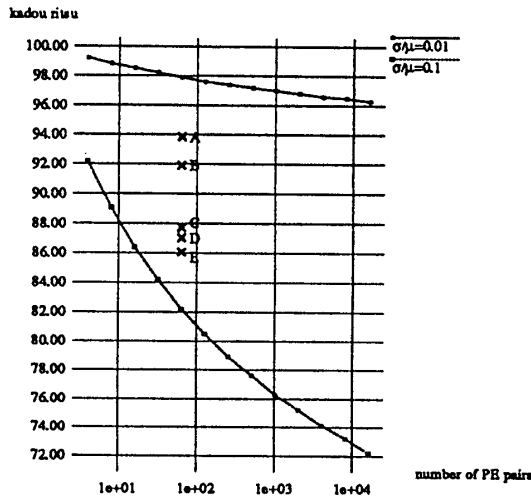


図 1: 稼働率 (推定値と実測値)

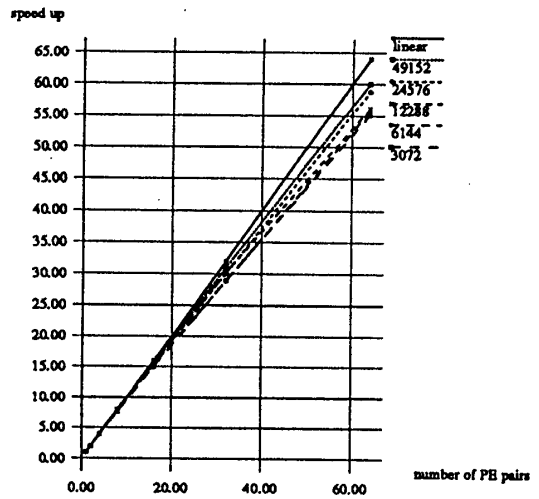


図 2: 台数効果

に要する処理時間は、 m 個の中性子それぞれの処理時間の和であるから、中心極限定理から正規分布に従うことは自明である。各 PE の処理時間が正規分布 $N(\mu, \sigma^2)$ に従うとする。

最長処理時間を $\mu + Z\sigma$ と表すと、稼働率 α は、

$$\alpha = \frac{\mu}{\mu + Z\sigma} = \frac{1}{1 + Z(\sigma/\mu)}$$

となる。PE 台数 n が増えると遅く終る PE が出てくる可能性が増えるので Z が大きくなり稼働率が低下する。逆に PE 間の処理時間のばらつきが小さいと、処理時間の分布の平均と標準偏差の比が小さくなり稼働率が向上する。

全 PE のうち $n/(n+1)$ の割合の PE が処理を終える時間を最長処理時間として求めた稼働率を図 1 に示す。

本研究での事例では、 $\sigma/\mu = 0.1$ は 1PE で数十個程度の中性子を追跡する場合に相当する。実用規模では、 10^4 以上の中性子を 1PE で追跡すると考えられる。 σ/μ は、中性子数の平方根と反比例するので、この場合には $\sigma/\mu \approx 0.01$ となり、図 1 に示すように 100% に近い稼働率が得られる。よって、問題規模が大きくなれば、処理時間のばらつきに対する特別な工夫は必要ないと考えられる。

6 実験結果

2 台の PE をペアにして 64 組の VIM を同時に実行する。PE ペアごとに各バッチの処理時間を測定し、並列化の効果を台数効果と稼働率によって評価する。追跡する中性子数が、約 50000 個、25000 個、12000 個、6000 個、3000 個の 5 通りの場合について実験した。

6.1 台数効果

台数効果 S は、

$$S = \frac{T_1}{T_n}$$

により求める。ただし、 $T_1 = 1$ 台の場合の処理時間、 $T_n = n$ 台それぞれの処理時間の最大値とする。

台数効果を図 2 に示す。128 台 (64PE ペア) を用いて 55 ~ 60 倍の高速化が達成されている。また、問題規模が大きくなるに従い、台数効果も向上している。

6.2 稼働率

稼働率の実測値を図 1 中にプロットすると、それぞれ点 A ~ 点 E となる。これらの σ/μ は、0.026 ~ 0.095 である。

7 おわりに

VIM を高並列計算機上に移植し、128 台で 60 倍の高速化を達成した。

VIM では、稼働率は追跡する中性子数が多くなれば各 PE の処理時間のばらつきは特に考慮する必要がないことがわかった。実際の測定値でもリニアな台数効果が得られた。

実現規模の問題では核データは大容量化し、100MB 程度になる場合もある。今回と同様に核データを分割して実装する方式を採ると、稼働率の上限が大幅に低下するので、大容量データを扱うための工夫が必要となる。

参考文献

- 1) 中川正幸. モンテカルロ法による輸送方程式の解法. 第 22 回炉物理夏期セミナーテキスト, pp. 96. 日本原子力学会, 1990.
- 2) 田邊 他. 並列 AI マシン Prodigy の試作と通信性能評価. 信学論, Vol. J74-D-I, No. 4, pp. 264-272, 1991.
- 3) Argonne National Laboratory. *VIM Users' Guide*.