

## ITBL クライアント API を用いた原子力材料シミュレーション実行環境構築

辻田 祐一† 有馬 立身†† 出光 一哉††  
鈴木 喜雄††† 木村 英雄†††

Pu 含有核燃料を中心とした核燃料再利用の取り組みが盛んに行われている。この中で、我々は分子動力学法により燃料の材料特性の研究を進めている。計算目的により、計算対象の物理系の規模を大きくしたり、多くの計算タイムステップ数を要する為、並列処理を取り入れ、ITBL が提供する計算環境により計算機シミュレーションを行っている。シミュレーションに用いるプログラムへの様々な計算パラメータ設定を容易に行うことや、利用者端末上で動作する可視化プログラムを引き続き利用したいという利用者からの強い要望に応える為、今回、ITBL が提供するクライアント API を用い、利用者端末上で動作する GUI を用いた計算支援環境の構築を行った。本稿では、本計算支援環境構築の目的、実装方法、並びに実行環境の事例紹介を行い、最後に今後の方向性について述べる。

### Building a Computing Environment for Nuclear Material Engineering Using ITBL

YUICHI TSUJITA,<sup>†</sup> TATSUMI ARIMA,<sup>††</sup> KAZUYA IDEMITSU,<sup>††</sup>  
YOSHIO SUZUKI<sup>†††</sup> and HIDEO KIMURA<sup>†††</sup>

Recently, many research works for Pu-recycle have been done. We proposed a molecular dynamics method to have deep understandings in nuclear materials. We adopted a parallel computing technique by using an ITBL's computing environment in our simulation program because a huge amount of computations and time steps is required. We received a request from application users to incorporate a user friendly interface in a computing environment for specifying parameters in a simulation program and successive operations of parallel computation and visualization on a user's terminal. So, we have built a GUI computing environment to realize such the functionalities by using an ITBL's client API. In this paper, we report objectives of this development, implementation method of this application, and examples of the computing environment. Finally, we mention its future plan.

#### 1. はじめに

使用済み核燃料の有効利用はエネルギー政策の重要課題であるが、そこから抽出される Pu やマイナーアクチノイドを含む（あるいは含んだ）核燃料は、限られた研究機関でしか扱うことができない。しかし、材料特性を様々な角度から詳細に調査することが重要な為、我々は分子動力学法（以下、MD 法）を用いた計算機シミュレーションにより調査研究を行ってきた<sup>1)</sup>。計算機シミュレーションを用い、分子あるいは原子レベルでの振る舞いを調べることにより、Pu 含有核燃料の特性が予測でき、実材料研究へのフィードバックも出来ると考えている。我々は大規模な計算機資源を利

用する為に、ITBL プロジェクト<sup>2)</sup> で運用されている ITBL システムを利用して、計算機シミュレーションを行っている。

ITBL では、参加する各研究機関の計算機資源を SINET3<sup>3)</sup> で接続し、計算資源共有を可能にすると共に、遠隔地間での研究の支援を行う仮想研究環境を提供している。ITBL システムの利用者は、X.509 規約に準拠した利用者証明書を用い、利用者端末の Web ブラウザから当該利用者が登録された ITBL 拠点サイトのポータルサイトにアクセスする。ログイン後に現れるポータル画面では、ファイル操作や端末入力、プログラム実行などにおいて、個々の計算機資源の場所を意識することなく透過的に利用できる。また、ITBL システムでは、利用者の計算プログラム向けにカスタマイズ可能な計算環境構築を支援する為に、クライアント API も提供されている。この API を利用することにより、例えば利用者の計算プログラムに特化した、利用者端末上で動作する GUI アプリケーションの作成が可能である。

本研究の材料シミュレーションの利用者からの強い

† 近畿大学 工学部 電子情報工学科  
School of Engineering, Kinki University  
†† 九州大学 大学院 工学研究院 附属環境システム科学研究センター  
Faculty of Engineering, Kyushu University  
††† 日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター  
Center for Computational Science and e-Systems,  
Japan Atomic Energy Agency

要望として、計算プログラムへのパラメタ群の入力支援機能と、これまで利用してきた可視化プログラムの利用があった。ITBL システムでは、可視化サービスとして、例えば AVS/Express と連携する機能<sup>4)</sup>を提供しているが、上述の要望に応える為、ITBL システムの計算サービスと可視化プログラムとが連携する計算支援環境の構築について検討を行った。その結果、ITBL システムが提供する Java のクライアント API を用い、利用者端末上で動作する、我々の計算プログラム向けにカスタマイズした計算支援環境を構築した。この計算環境では、計算プログラムに入力する様々なパラメタの設定や、ITBL システムの並列計算機でのジョブ実行が容易に行える。さらに、利用者端末上で動作する可視化プログラムとの連携も出来ることを確認した。

本稿では、これまでの取り組みと現状の報告を行うと共に、今後の予定についても報告する。

## 2. 原子力材料シミュレーション

原子力発電所で発生する核燃料廃棄物を含む Pu は、主に MOX 燃料として再利用される。それらを安全に利用する為には、材料としての性質を詳しく調査する必要があり、例えば熱膨張・比熱・熱伝導度・弾性率・照射挙動などの特性調査が挙げられる。これらの核燃料は限られた研究機関でしか取り扱うことが出来ないが、上述の材料特性を詳しく調査するために、我々は、MD 法を用いた計算機シミュレーションにより、Pu 含有核燃料の材料としての性質の調査を行っている。

MD 法のプログラムとして、東京工業大学 理学部 地球惑星科学科 河村 雄行 教授が作成した MXDORTO の並列版である MXDORTOP<sup>5)</sup> を利用している。MXDORTO は Fortran で書かれたプログラムコードであり、MXDORTOP は MXDORTO のコードをベースに MPI により並列化されたものである。このプログラムは、最初にポテンシャルモデル、扱う原子数、実行ステップ数や圧力・体積・温度の制御方法などのパラメタを入力ファイルから読み出し、タイムステップ毎に計算結果をデータファイルに出力する。

## 3. ITBL システム

ITBL は、ネットワーク上にある計算資源を共有化することにより、複雑で大規模な計算機シミュレーションや地理的に離れた研究者間の研究コミュニティの形成などを支援するために実施された国家プロジェクトである。ITBL は、6 つの研究機関（物質・材料研究機構、防災科学技術研究所、宇宙航空研究開発機構、理化学研究所、科学技術振興機構、日本原子力研究開発機構）により立ち上げられた。

ITBL では、地理的に独立した研究機関や組織をサイトと呼び、サイト間を SINET3 により接続するこ

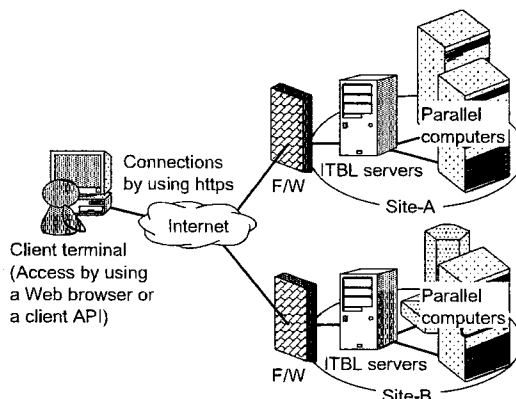


図 1 ITBL のネットワーク接続例

とにより、仮想研究環境を形成している。各サイトは、ITBL のサービスを提供するサーバ群（以下、ITBL サーバ群）と計算を実施する計算機群により構成される。利用者は、ネットワークに繋いだ端末の Web ブラウザから、X.509 規約に準拠した利用者証明書により、セキュアな通信経路を経由して、仮想研究環境の資源・サービスを利用できる。通信基盤においては、STA プロジェクトで開発された starpc<sup>6)</sup> に認証機能を強化したことにより、安全なネットワーク接続と透過的な計算機環境を提供している。プロジェクトの最終年度である平成 17 年度末には、13 サイト、27 台のスーパーコンピュータが共有化され、理論性能の総量は 57 TFlops に達し、90 機関から 681 名の利用登録者があった。プロジェクト終了後も、運用を継続しており、様々な研究が実施されている。

ITBL システムにおけるネットワーク接続例を図 1 に示す。ITBL サーバ群は、セキュリティ上の観点からフロントサーバ・データサーバ・中継サーバの 3 台で構成されており、各サーバで ITBL 基盤ソフトウェアが稼働している。このうちフロントサーバとデータサーバは DMZ に配置され、仮に不正侵入されたとしても、その影響をサイト内の並列計算機群に与えない構成になっている。各サイト内の並列計算機には、ITBL 基盤ソフトウェアの通信基盤がインストールされており、ITBL サーバを介してアクセスが可能である。

利用者は ITBL で利用する計算機のアカウントを取得すると同時に、ITBL のいずれかのサイトに利用者登録をすることで、そこを拠点サイトとし、さらに X.509 規約に準拠した利用者証明書を発行してもらう。この証明書を利用者端末の Web ブラウザに登録した後、拠点サイトだけでなく、他のサイトにあるアカウントを持つ並列計算機も利用可能になる。利用者端末の Web ブラウザと拠点サイトの間あるいはサイト間は https による接続が行われるため、各サイトにある

ファイアーウォールを越えて通信が可能である。サイト内では、フロントサーバと中継サーバ間、中継サーバと実行計算機間でそれぞれ認証を行う。一方、サイト間では、各サイトのフロントサーバ間で認証を行う。このような通信基盤により、利用者はサイト内・サイト間の違いを意識することなく安全に計算環境が利用できる。

ITBL システムは上述のように、Web ブラウザによる利用が中心だが、利用者の端末上で動作し、かつ ITBL システムと連携するアプリケーションの構築を支援するために、ITBL クライアント API も用意されている。この API では、Linux では C 及び Java が、Windows では C++ (Visual C++ を利用) 及び Java が利用出来る。この API は下層レイヤの通信基盤として、Web ブラウザによる ITBL のポータルサイトへのアクセスの場合と同じ通信基盤を利用しており、Web ブラウザを用いる場合と同様に安全なアクセスが可能である。又、この API は、ITBL ポータルへのアクセス機能、利用可能な計算機群のファイル参照やプログラム実行機能などを提供しているので、アプリケーション開発が容易に行える。

#### 4. 原子力材料シミュレーション実行環境の構築

我々は、原子力材料シミュレーションを行う為に、大規模な計算資源が必要となり、ITBL システムを利用してきたが、材料シミュレーションにおいて、材料の熱伝導度や安定性などの特性を詳細に調べるために、ポテンシャルモデル、温度、圧力などを変えながらパラメタサーベイを実施する必要がある。利用している計算プログラムは、これらのパラメタを入力ファイルに記述する必要があるが、毎回エディタで編集を行わなければならない。また、計算結果の可視化には、利用者端末で動作するプログラムを利用してきており、これを引き続き利用したいという利用者からの強い要望があったため、計算結果を実行毎に ITBL システムのファイル操作機能によりダウンロードする必要があった。

そこで、我々は、ITBL システムが提供するクライアント API を使い、上述のパラメタ設定を容易に行え、かつ利用者端末上で動作する可視化プログラムと連携する計算支援環境の検討及び構築を行った。Linux と Windows の両方をサポートする為に、クライアント API の言語として Java を選択した。この計算支援環境は以下の機能を提供する。

- プログラム実行のためのパラメタ設定支援  
離れた並列計算機にある計算プログラムの入力ファイルに対し、パラメタ変更のためのファイル編集を実施。
- 並列計算機へのジョブ投入・監視・制御支援

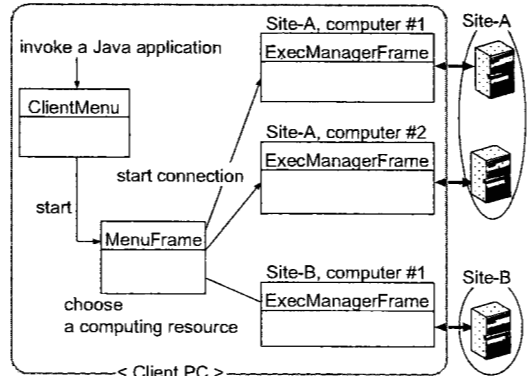


図 2 計算支援アプリケーションの動作例

ITBL システム用ジョブ投入スクリプトの作成並びにジョブ投入を支援し、投入したジョブを監視・制御する機能を提供。

- 利用者端末上で動作するアプリケーションとの連携支援

離れた並列計算機でのジョブ実行と利用者端末上で動作するアプリケーションとの連携機能を提供構築した計算支援アプリケーションは Java アプリケーションとして起動する。アプリケーション全体の処理の流れを図 2 に示す。起動された Java アプリケーション (ClientMenu クラス) は、初期メニュー画面を管理する MenuFrame クラスのインスタンスを生成する。このメニュー画面から、接続する計算機毎に対し、ExecManagerFrame クラスのインスタンスが生成され、実行計算機画面が現れ、ジョブ実行が可能になる。

本アプリケーションは、ITBL クライアント API の jar ファイル (itblapi.jar) を用いて、下記のように起動する。

```
java -classpath .:itblapi.jar ClientMenu
```

このアプリケーションが起動すると、図 3 に示すような初期画面が現れる。このアプリケーションでは、あらかじめ設定ファイルに記述されている拠点サイトの URL と X.509 規約に準拠した利用者証明書の場合情報が設定される。セキュリティの観点から、利用者証明書に設定してあるパスフレーズのみは、画面上部でのみの入力としている。以上の情報設定の完了後、画面上部の右側にある "Connect" ボタンを押すと、拠点サイトに接続する。接続が成功すると、画面下部に、利用可能なサイト一覧と、それぞれのサイトで利用可能な計算機の一覧がツリー表示されるので、ここから利用する計算機を選択し、"Start Server" ボタンを押すと、図 4 に示すような当該計算機の実行計算機用メニュー画面が別スレッドとして起動する。このメニュー画面において、一番上のメニューバーにある "File" から "Download" あるいは "Upload" を選



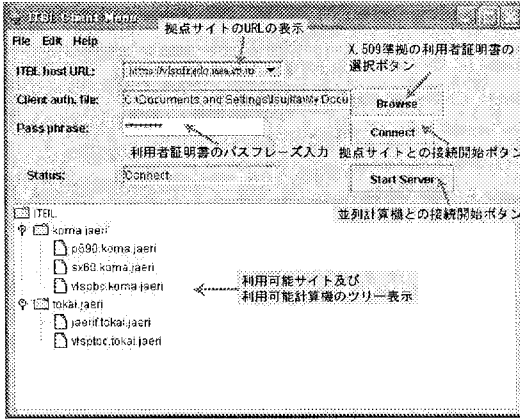


図 3 計算支援アプリケーションの初期画面

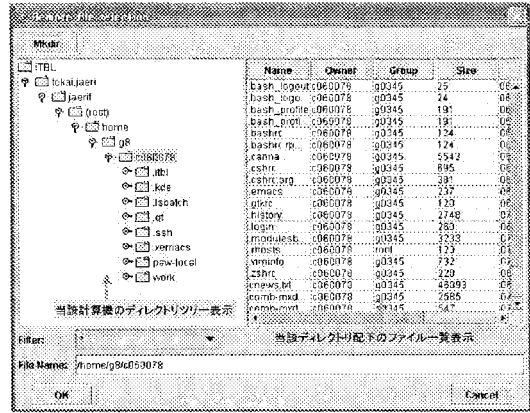


図 5 ファイル選択画面

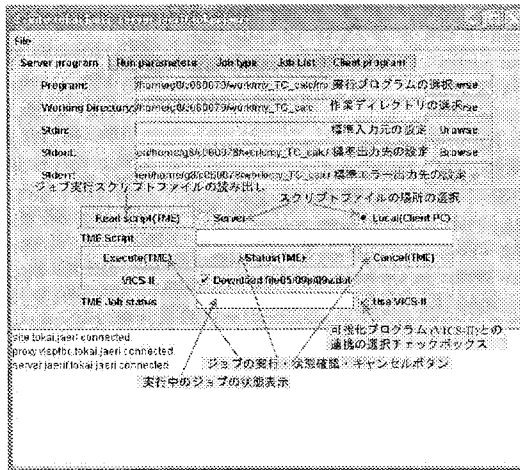


図 4 実行計算機用メニュー画面の例

択すると、実行計算機から利用者端末へのファイルのダウンロードあるいは利用者端末から実行計算機へのファイルのアップロードができる。ファイルのダウンロード並びにアップロードは、別スレッドとして処理する為、アプリケーションの処理はブロックされることなく並行して進められる。

この画面には、以下の5つのタブメニュー画面が用意されている。

- Server program  
計算プログラム、作業ディレクトリ、標準入出力、標準エラー出力の指定など
- Run parameters  
計算プログラムのパラメタ群の設定
- Job type  
ジョブ実行のためのパラメタ群の設定
- Job list

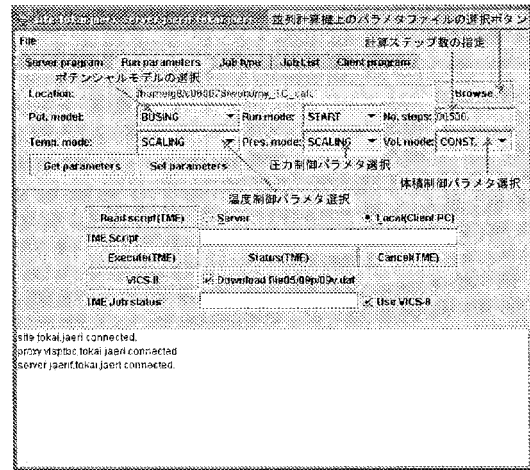


図 6 実行計算機用画面（プログラム実行用パラメタ設定画面）

### 投入済みジョブの一覧表示

#### • Client program

利用者端末上で動作するプログラムの実行支援  
まず図4の画面の一番左側にある“Server program”タブメニュー画面では、実行プログラム、作業ディレクトリ、標準入力、標準出力、標準エラー出力先の選択ができる。実行プログラムや作業ディレクトリなどの選択の際には、図5に示すファイル選択画面が起動され、ここから当該並列計算機上のファイルあるいはディレクトリが選択できる。

図4と同じ画面で、“Run parameters”のタブを選択すると、図6に示すような、プログラムに設定するパラメタ選択やプログラム実行方法の選択などができる画面が現れる。この画面では、プログラム実行に必要なポテンシャルモデル、実行ステップ数や、温度・圧力・体積（それぞれ、図中の“Pot. model”, “No. steps”, “Temp. mode”, “Pres. mode”, “Vol.

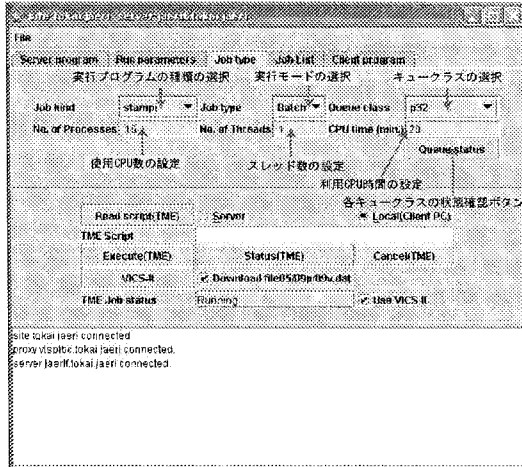


図7 実行計算機画面（プログラム実行方法選択画面）

mode”に対応)の制御方法などが指定できる。ここで設定変更を行うと、ITBLにある実行計算機側の計算プログラムの初期パラメタ設定ファイルに反映される。

次に、“Job type”のタブメニューを選択すると、図7に示す画面に切り替わる。“Job kind”の選択欄では、逐次処理あるいはベンダMPIによる並列処理に加え、計算機間のMPI通信を提供するStampi<sup>7)</sup>を利用した並列処理や、OpenMP<sup>8)</sup>による並列処理などをサポートしている。“Job type”では、インタラクティブ実行又はバッチ処理の選択が行え、バッチ処理を選ばずと、“Queue class”の選択欄に表示される当該計算機のキュークラス一覧から使用するクラスを選択できる。使用するCPU数、スレッド数（OpenMP使用時）及び利用CPU時間は、それぞれ、“No. of processes”、“No. of threads”及び“CPU time”で指定できる。また、この画面の“Queue status”ボタンを押すことで、図8に示すような画面が現れて、各キュークラスの稼働状況を確認することが可能である。

以上のパラメタ設定が完了した後に、図4に示すように、この実行計算機画面の中央にある“Execute(TME)”ボタンを押すことで、ジョブ実行に必要なスクリプトファイルが作成され、このスクリプトファイルによりターゲットの並列計算機でジョブが実行される。

また、ITBLシステムでは、Webブラウザによるポータル画面でのジョブ実行画面において、利用者が設定したジョブ実行定義を、スクリプトファイルに出力できるため、このファイルの二次利用のために、画面中央に“Read script(TME)”ボタンを配置し、並列計算機(“server”)あるいは利用者端末(“local”)からのスクリプトファイルの読み込み機能も提供した。

計算機に投入されたジョブの一覧は、図9に示すように、“Job list”タブメニュー画面に表示される。

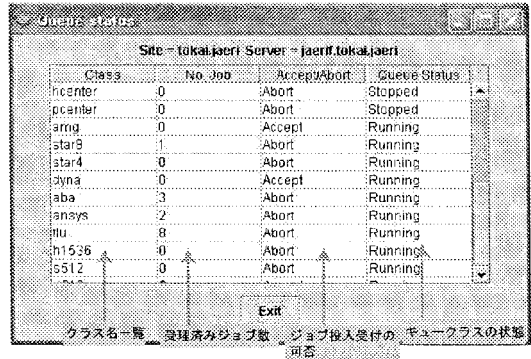


図8 キュークラスの稼働状況確認画面の例



図9 実行計算機用メニュー画面（投入ジョブ一覧表示）

各ジョブの実行状態は、定期的に監視され、この一覧画面で選択したジョブの状態がこの実行画面中央の“TME job status”の欄に定期的に表示される。また画面中央の“Status(TME)”ボタンでも随時ジョブの状態が確認可能であり、“Cancel(TME)”ボタンによりジョブのキャンセルが行える。

さらにこの画面上では、利用者端末上で利用可能な可視化プログラムとの連動の有無を選択できるようになっており、現時点では、VICS-II<sup>9)</sup>というWindows並びにLinuxで稼働する可視化アプリケーションが利用できる。これを利用する為には、あらかじめこのプログラムを利用者端末上に導入しておき、このアプリケーションの起動時に読み込まれる設定ファイルにパスを記述しておく必要がある。画面中央の右下にある“Use VICS-II”のチェックボックスを選択しておけば、プログラム実行の正常終了と共に、実行した計算機からこの可視化プログラムにデータファイルが渡され、利用者端末上で上述のVICS-IIが起動し、計算結

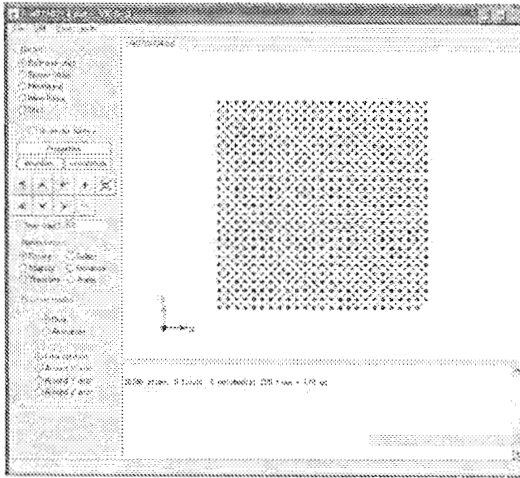


図 10 並列計算と連動した VICS-II による可視化の例

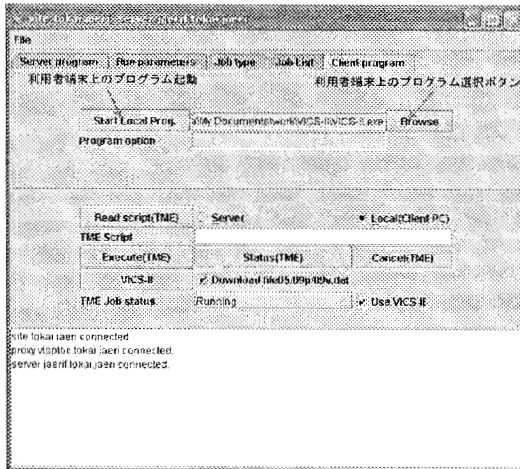


図 11 利用者端末上でのプログラム実行支援画面の例

果の可視化が行われる。その一例を図 10 に示す。

一番右側のタブメニュー画面は、利用者端末上の他のアプリケーション実行を支援するものである。その例を図 11 に示す。プログラムを選択し、この画面上から当該プログラムを起動することをサポートしている。

## 5. まとめ

我々は、ITBL クライアント API を用い、原子力材料シミュレーションのための計算支援環境の構築を行った。本計算支援アプリケーションは、Java でコーディングされている為、計算機環境に関係なくどこでも利用可能である。クライアント API は、利用者端

末と ITBL の拠点サイトの間を Web ブラウザによるアクセスと同様のセキュアな通信基盤により接続するため、安全なデータ通信が可能である。本アプリケーションは、プログラムのジョブ投入支援や投入ジョブの制御支援などに加え、シミュレーションに用いているプログラムの入力パラメタの設定支援や、利用者端末上で動く可視化プログラムとの連携など、計算プログラムに特化した機能も提供しており、数値計算に集中できるように配慮をした。

使用したクライアント API は今後 C のみのサポートとなる為、今後の課題として、現行の Java プログラムにおいて C の API へ対応する実装を検討する予定である。

## 謝辞

本研究は日本原子力研究開発機構、九州大学、並びに近畿大学との ITBL に関する共同研究により行われている。本研究を進めるにあたり、日本原子力研究開発機構 システム計算科学センターの方々から様々な援助を受けたことを深く感謝いたします。また本研究に用いたプログラムコードである MXDORTOP を提供して頂き、様々なアドバイスを頂いた東京工業大学理学部 地球惑星科学科の河村 雄行 教授に深く感謝いたします。

## 参考文献

- 1) Arima, T. et al.: Evaluation of Thermal Conductivity of Zirconia-based Inert Matrix Fuel by Molecular Dynamics Simulation, *Journal of Nuclear Materials*, Vol.352, pp.309-317 (2006).
- 2) ITBL プロジェクト: <http://www.itbl.jp/>.
- 3) SINET3: <http://www.sinet.ad.jp/>.
- 4) Suzuki, Y., Sai, K., Matsumoto, N. and Hazama, O.: Visualization System on Information Technology Based Laboratory, *IEEE Computer Graphic and Applications*, Vol. 23, No.2, pp.32-39 (2003).
- 5) 東京工業大学 理学部地球惑星科学科河村研究室: <http://www.geo.titech.ac.jp/kawamuralab/kawamuralab.html>.
- 6) 武宮 博, 山岸信寛:並列計算機クラスタ上のツール間通信を支援するライブラリ: Starpc - Starpc 利用及び開発手引書-, JAERI-Data/Code 2000-006, JAEA (2000).
- 7) Inamura, T., Tsujita, Y., Koide, H. and Takemiya, H.: An Architecture of Stampi: MPI Library on a Cluster of Parallel Computers, *Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface*, LNCS 1908, Springer, pp.200-207 (2000).
- 8) OpenMP: <http://www.openmp.org/>.
- 9) VICS-II: <http://www.geocities.jp/kmo-mma/crystal/jp/vics.html>.