付録１　平成９年度及び１０年度高速化作業成果一覧

コード名	計 算 内 容	作 業 内 容	向上率 (対 1PE スカラ) 備　　考
BWR 用最適化予測コード TRAC-BF1	圧力容器部を３次元でモデル化できる二流体モデルコードである。事故時の一次系、二次系各部の流量、温度、ボイド率等の過渡解析と行う。	M780 で動作している TRAC-BF1 コードを VPP500 にインストールしたが、コードに一部問題があり、研究室で整備した WS 版 TRAC-BF1 コードを AP3000 にインストールした。	
3 次元汎用流体解析コード FLOW-3D	２次元流体解析コードである SOLA,SOLA-ICE,SOLA-VOF の３次元への拡張版で、圧縮/非圧縮・自由界面の動き、熱流動の解析を行う。SOLA アルゴリズムを用いて方程式を解く。	FLOW-3D コードに対しベクトル化行う。	入力データ dbr8 オリジナルスカラ 60m26.25s ベクトル化版　50m29.61s(1.2 倍) 回帰計算等ベクトル化できない部分があり、ベクトル化が十分にできない。このため AP3000 上で実行する（VPP と比較し約 3.3 倍高速である）。
ダイヤモンド結晶を扱う分子動力学コード DGR	ＤＧＲは，ダイヤモンド型結晶における照射損傷シミュレーションのための分子動力学コードであり，ＰＡＲＴ１，ＰＡＲＴ２，ＰＡＲＴ３から構成されている．それぞれがいくつかルーチンから成る一つのコードであり，実行はそれぞれ個別に行われる． ＰＡＲＴ１では，初期設定を行う． ＰＡＲＴ２では，ＰＡＲＴ１で設定されたデータを読み込み，結晶を構成する各原子に対する運動方程式を解き，種々のエネルギーの計算を行う． ＰＡＲＴ３は，ＰＡＲＴ２での計算結果	ベクトル並列化を行った．尚，高速化の対象としたのは，主計算を行うＰＡＲＴ２のみである．	オリジナル版ベクトル実行 733sec（※） ベクトル化版ベクトル実行 190sec(3.8 倍　※比） 並列化版（１ＰＥ） ベクトル並列実行 338sec（2.2 倍　※比） 並列化版（４ＰＥ） ベクトル並列実行 182sec (4.0 倍　※比） 並列化版（１６ＰＥ） ベクトル並列実行 62sec (11.8 倍　※比）

	の作図を行う.		本並列化では, 最大で「使用するプロセッサ台数／２」倍の性能が期待される並列処理構造を採用しているため, 通常期待されるＰＥ台数倍には達していない.
連続エネルギー粒子輸送モンテカルロコード MCNP4A	中性子、２次ガンマ線、ガンマ線及び電子の輸送計算を行う。	ＭＣＮＰ４Ａ並列版（ＰＶＭ）のＡＰ３０００へのインストールと動作環境整備。	２並列実行 ： 1.9 倍 ４並列実行 ： 3.7 倍 （ＭＣＮＰ４Ａ付属のテスト入力を使用）並列版の入力データとシングル版の入力データは完全互換ではない。
円筒座標系直接数値解析コード CYLDNS44N	円管内乱流の直接シミュレーションを行う。本体部分は ICGS 法＋FFT であるが、今回の対象部分は 2 方向 FFT に TDMA を用いている。	大規模な問題に対応するため、ＰＥに対しデータを分割して持たせるような並列化を行う。またさらに、ベクトル化が不十分なルーチンに対し、ベクトル化を行う。	オリジナルスカラ 10220.21s (ELAPS) (1.0 倍) 10188.73s (CPU) オリジナルベクトル 1665.64s(ELAPS) (6.1 倍) 1635.12s(CPU) 並列化版（4PE） 469.61s(ELAPS)(21.8 倍) 並列化版（16PE） 209.17s(ELAPS) (48.9 倍)
多次元二流体モデルコード ACE-3D	受動的安全炉の設計研究を多次元の二流体モデルコードにより高精度に行うための二流体モデルの構成方程式の評価開発に使用できる解析コードである。 基礎方程式は３次元の二流体モデルであり、解析体系として直交座標系または円筒座標系が選択できる。基礎式はスタッガードメッシュの有限差分で定式化し、対流項は風上差分、拡散項は中心	ガウス消去法のアルゴリズムを変更し、二段二列同時消去法を採用した。その他、計算アルゴリズムの変更を伴わないベクトル化作業を実施。	○ＩＬＵＢＣＧ（双共役勾配法） オリジナルスカラ ：82040 sec ベクトル化版 ： 6414 sec (12.8 倍) ○ＢＧＬＵ（ガウス消去法） オリジナルスカラ ：51494 sec ベクトル化版 ： 4386 sec (11.7 倍)

	差分とし、半陰解法で解いていく。乱流モデルとしては、二相 ｋ－εモデルを導入している。		
放射能粒子拡散予測コード WSPEEDI	ＷＳＰＥＥＤＩは，原子炉事故時の緊急時において，放射能の地球規模拡散をリアルタイムで予測するシステムである． 高速化を依頼されたコードは，風速場計算コードと濃度・線量計算コードである． 風速場計算コードは，ネームリストで与えられる計算領域とサイトのパラメータから，それらに該当する地形データを読み込み，計算対象領域を３次元メッシュとして作成する．そして，地球規模の気象予報データを読み込み，計算対象領域のメッシュ上の風速場を内挿により求める．更に，内挿された風速場が質量保存則を満たすように補正される．気象予報データは６or１２時間毎に複数個存在し，その読み込みはメインルーチンに存在する時間ループで行われる． 濃度・線量計算コードでは，風速場データを使用して，領域内の放射能の拡散を粒子によって模擬する．粒子は計算開始時から既に全粒子が領域内に存在するのではなく，δｔ毎に増えていく．粒子の位置は，風速場や大気の乱れ，乱数等によって求められる．メインルーチンには，風速場データを読み込むループとその中のδｔループが存在する．δｔループの直前で風速場データを読み込み，δ	風速場計算コードについては，メインルーチンに存在する時間ループの１回転毎の各気象予報データについての計算が，他の気象予報データについての計算とは依存関係がないことから，このループを分割して並列化を行った． 濃度・線量計算コードについては，各粒子について独立に計算されており，また処理構造も粒子ループが主体となっているため，粒子について処理とデータを分割して並列化を行った．	風速場計算コード： オリジナル版スカラ実行 5180sec（※） オリジナル版ベクトル実行 1213sec（4.3 倍　※比） 並列化版（１ＰＥ） ベクトル並列実行 1258sec（4.1 倍　※比） 並列化版（４ＰＥ） ベクトル並列実行 323sec（16.0 倍　※比） 並列化版（１６ＰＥ） ベクトル並列実行 145sec（35.7 倍　※比） 濃度・線量計算コード： (a)実時間　(b)CPU 時間 オリジナル版(粒子 40000 個) スカラ実行 (a)　8095sec（※１） (b)　7443sec（※２） ベクトル実行 (a)　2349sec（3.4 倍　※１比） (b)　1780sec（4.2 倍　※２比） 追加ベクトル化版(粒子 80000 個) スカラ実行 (a)　17680sec（※３） (b)　16508sec（※４）

	ｔループ前半部分で粒子を発生させ放射能拡散を模擬し，各粒子から放射能空気中濃度や地表面への放射能沈着量を求める．δｔの加算値がＷＩＤＲＣＳになった場合，空気中濃度の平均値や沈着量の積算，線量当量等の計算と出力を行う．		ベクトル実行 (a)　4985sec（3.5 倍　※３比） (b)　3242sec（5.1 倍　※４比） 並列化版(粒子 80000 個) １ＰＥ実行 (a)　3966sec（4.5 倍　※３比） (b)　3051sec（5.4 倍　※４比） ４ＰＥ実行 (a)　1594sec（11.1 倍　※３比） (b)　892sec（18.5 倍　※４比） １２ＰＥ実行 (a)　1224sec（14.4 倍　※３比） (b)　482sec（34.2 倍　※４比）
汎用図形処理解析システム IPLOT	IPLOT はデータ解析とプロット図作成の機能を持つ。グラフィックライブラリとし CALCOMP が使用されている。	ALCOMP を互換ライブラリ piflib に代える。piflib は出力先として PostScript ファイルを選ぶことができる。改良として、フォントを描画するための適切な PostScript 命令をファイルに出力する機能を付け加えた。	
３次元熱伝導解析コード SSPHEAT	SSPHEAT コードは、複雑な冷却材ヘリウムガスの流路を持つ構造物の温度分布を求めるために開発された数値解析コードである。 解析対象を有限な要素に分割し、全ての要素についてガラーキン法に基づく有限要素法を適用して冷却材ヘリウムガスの流れ方向の温度変化、熱放射、内部発熱を考慮した３次元熱伝導解析を行っている。	（１）ベクトル化チューニング （２）並列化の可能性調査 （３）AP3000 へのインストール	(1)VPP ﾃｽﾄｹｰｽ RPVVCS1 Org(Scalar)　45.41sec Tuning(Vec)　20.06sec(2.26 倍) ﾃｽﾄｹｰｽ sp61.txt(100) Org(Scalar)　957.63sec Tuning(Vec)　145.37sec(6.59 倍) (2)AP3000 ﾃｽﾄｹｰｽ RPVVCS1 Tuning　17.29sec(2.63 倍)

			ﾃｽﾄｹｰｽ sp61.txt(100) Tuning 404.27sec(2.37 倍) (2)は対 VPP/Org(Scalar)の向上率
運動論的バルーニングシューティングコード KBSHOOT	運動論的バルーニング方程式をシューティング法によって解き、不安定モードの固有関数および固有値を求める。係数に速度積分（マクスウェル分布についての平均）を含む。	並列化効率を元に、オーバーヘッド等を測定し性能評価を行う。(VPP500)	
H9 年度高速化対象コードの性能調査	調査対象コードの計算内容欄を参照下さい。	H9 年度高速化対象コードのうち以下の原子力コードの性能データ収集を行った。 ACE-3D, DGR, DORT-TORT, EDDYCAL, EQMD, FLOW3D, GYRO,MARS NLFP, SD, SELENEJ, SSPHEAT, STREAM V3.10, WSPEED データ収集条件 （１）対象コード：オリジナル版, ベクトル化チューニング版（除 並列化版） （２）実行計算機：VPP500, AP3000 （３）主な収集データ：CPU,経過,VU 時間,ベクトル化率,ベクトル化効果,ベクトル化チューニング効果,AP3000 効果（対 VPP）, etc	1. ベクトル化チューニング効果 Tuning(Vec)版の Org(Scalar)版に対する向上率 1.0～ 2.0 ： ３ケース 2.0～ 3.0 ： ３ケース 3.0～ 4.0 ： ４ケース 4.0～ 5.0 ： ０ケース 5.0～10.0 ： ３ケース 10.0～15.0 ： ０ケース 15.0～20.0 ： １ケース 20.0～25.0 ： ３ケース 100.0 以上 ： １ケース 計 １８ケース 2. AP3000 の効果 VPP スカラ実行に対する AP3000 実行の向上率 1.05～4.09（平均：2.24,標準偏差：0.66, 44 ケース）
原子核統計崩壊計算コード SD	原子核の各種、励起エネルギー、スピン角運動量ともとに、軽粒子放出及び核分裂による統計崩壊の計算を行う。	ベクトル化を行った。	オリジナルスカラ 611.82s ベクトル化版 28.78s (21.3 倍)

3 次元熱流体解析コード STREAM V3.10	3 次元圧縮・非圧縮性流体を対象とした熱流体解析を行う。流体解析、熱解析、物質移動解析を個々に、またすべてを連成させて解く。	縮性流体の部分に関して、MPI による並列化を行う。また、大規模計算の対応のため、解析空間をプロセッサ台数個に分割させる。前処理付き反復解法による行列ソルバ部分は、不完全 LU 分解及び前進・後退代入計算部分は（データに依存関係があるため）単純に並列計算ができないため、パイプライン的な並列化を行う。	入力データ B09.S オリジナル版 21.382s (1.0 倍) 並列化版（4PE）19.627s (1.1 倍) 入力データ B10.S オリジナル版 メモリ不足のため実行不可 並列化版（ 4PE） 77.152s 並列化版（16PE） 68.330s 並列化手法として、MPI を採用している。
MHD 平衡コード SELENEJ	トカマクの MHD 平衡方程式であるグラッド・シャフラノフ方程式を解く。数値解法は２次元楕円偏微分方程式の自由境界問題を反復法で解いている。一方向にはフーリエ変換、もう一方向には差分解法を用いている。	オリジナルコードに対し、ベクトル化、および並列化を行った。	オリジナルスカラ 4.35s オリジナルベクトル 1.33s ベクトル化版 0.75s (5.8 倍) 以後カーネル部分の性能（向上比はベクトル化版を 1.0 とする） ベクトル化版 0.487s 並列化版(4PE) 0.378s (1.29 倍） 並列化版(16PE)0.455s (1.07 倍） 並列化版の性能が向上率が悪いのは、ベクトル長が短くなることによるベクトル性能の低下、および全体の実行時間が短いため、データ通信時間の比率が大きくなってしまったためである。
拡張量子分子動力学コード EQMD	QMD コードは原子核反応をシミュレーションするコードである。１核子を一つの波束で表現して、古典運動方程式及び２体衝突により核子多体系の時間発展を記述している。EQMD の特徴は波束の	１．近似版 （１）計算量の削減による高速化 （２）ベクトル並列化による高速化 （３）AP3000 への適応性調査 ２．厳密版	テストケース 近似版/T040 Org (Scalar/1PE) 4:36:15.15 Tuning(Vec/1PE) 2:16.74(121.2) Tuning(Vec/4PE) 1:32.38(179.4)

	拡がりを動的に扱う点にあり、波束の中心はニュートン方程式、拡がりはニュートン方程式に良く似た運動方程式を解いている。この解法として４次の Runge-Kutta 法を用いている。	（１）ベクトル並列化による高速化	テストケース厳密版/T040 Org(Scalar/1PE) 1:35:10.32 Tuning(Vec/1PE)　4:56.89(19.2) Tuning(Vec/4PE)　2:28.27(38.5)
渦電流解析コード EDDYCAL	有限要素法を用いて渦電流の固有値解析を行うとともに、ビオサバールの式を用いて外部磁場との結合を求め、渦電流の時間変化を求める。具体的には、有限要素法により導体をモデル化し、薄板近似により電流ポテンシャルを導入し、これらの電流ポテンシャルの励起モードを固有値解析により求める。電流ポテンシャル法による電磁場解析においては、インダクタンス行列中に非局所的な境界積分項が現れ、行列が実対称となることが特徴として挙げられる。コードの構造としては、大きく３つのステップに分かれる。ステップ１は、最初（回路方程式の組み立て）から固有値計算まで、ステップ２は、外部磁場、ベクトルポテンシャルの計算から渦電流計算まで、ステップ３は、外部磁場、磁束密度の計算から最後（磁束密度、電磁力の計算）までである。これらの内、計算時間については、ステップ１の行列計算の部分が支配的である。	VPP500 上で並列化の作業を行ったのは、行列計算の部分である。全体の実行時間コストの 79%を占めるインダクタンス行列Ａを作成する部分と、11%を占める一般固有値問題 Ax =λBx の解法部の並列化を行った。一般固有値問題の内、標準固有値問題解法部の並列化にういては、計算科学技術推進センター並列計算法グループ開発の並列ライブラリを用いて行った。また、データ分割を行うと、多頻度のデータ転送が発生し、性能が極端に劣化することが予想されたため、データ分割は行わなかった。VPP500 上でのベクトル化は、既にオリジナルコードがクレイ計算機用にベクトル化済あったことから、更なるベクトル化作業という位置付けで、機械的にベクトル化可能なサブルーチンすべてについて行った。また、VPP500 上では補足作業という位置付けで、I/O の高速化も行った。VPP500 上での作業ではデータ分割を行わなかったことにより、大規模計算対応化できかったことから、メモリ量/1PE が VPP500 の１０倍搭載されている AP3000 への移植も行った。	VPP500: (a) 実時間　(b) CPU 時間 オリジナル版 スカラ実行 (a) 4971sec (b) 4949sec ベクトル実行 (a) 1440sec (b)1382sec （ユーザ利用環境） ベクトル並列化版 1PE 実行 (a) 1212sec (b)　1193sec 4PE 実行 (a)　428sec (b)　418sec 16PE 実行 (a)　237sec (b)　228sec （対ユーザ利用環境 (a) 6.1 倍　(b) 6.1 倍） AP3000: (a) 実時間　(b) CPU 時間 オリジナル版 (a) 3393sec (b) 3354sec 並列化版(VPP500 からの移植) 1PE 実行 (a) 2772sec (b) 2699sec 4PE 実行 (a) 1265sec (b) 1249sec （対　オリジナル

			(a) 2.7 倍　(b) 2.7 倍）
連続エネルギー粒子輸送モンテカルロコード MCNP 4B2	中性子、光子、及び電子の輸送計算を行う。	MCNP 4B2 の AP3000 へのインストールと動作環境整備 (1)シングル版（バッチ版、X 版）のインストールと動作環境整備 (2)並列版(PVM)のインストールと動作環	(1) バッチ版(1PE) 13h02m14.99s (1.00 倍) (2) PVM 版 (4PE) 4h54m59.92s (2.65 倍) (3) MPI 版 (4PE)

		境整備 (3)並列版(MPI)の作成、及びインストールと動作環境整備	4h47m36.63s　(2.72 倍)
原子炉安全性解析コード RELAP5/MOD3.2.1.2	加圧水型原子炉（PWR）の事故や異常過渡変化を解析のため熱水力最適化評価コードであり、PWRの炉心、蒸気発生器、加圧器などの主要機器をモデル化するためのツールや安全保護系をモデル化するための制御系モデルを備えている。これらを用いて、PWRの総合実験解析、個別効果実験解析、及び商用炉の解析を行う。	VPP500 上にある RELAP5/MOD3.2.1.2 コードを AP3000 にインストールした。	当初はベクトル化であったが、AP3000 での実行が（VPP500 での実行より）速いことが判明し、AP3000 のインストールに変更した。これは、RELAP5/MOD3.2.1.2 コードのベクトル化効果が低いものと予想されたためである。
汎用トカマク回路シミュレーションプログラム GTCSP	回路（接続ノードで結ばれた同期発電機、トランス・サイリスタ変換機、コイル群等）解析シミュレーションを行う。回路全体の回路方程式を構築し、これらの微分方程式を台形法で積分することによって、回路を動的に解析する。	SP2 版 GTCSP を VPP500 へインストールし、ベクトル化を行った。	オリジナル版 ベクトル実行　14h35m03s ベクトル化版 ベクトル実行　1h09m29s （12.6 倍）
イオン性融体分子動力学計算コード MSP2	分子動力学法によりイオンの運動について計算を行う。イオンの座標及びポテンシャルを与え、運動方程式の差分近似を解いてイオンの動きを計算する。（運動方程式のテイラー展開の一次微分までの近似）	ベクトル処理時のメモリ領域削減並列化（粒子体系を分割し、各プロセッサに持たせる）	オリジナルメモリ使用量 ： 41.79MB チューニング版メモリ使用量 ： 2.00MB （４並列） オリジナル実行時間 ： 4534sec チューニング版 ： 2471sec（４並列）
受動的冷却システム試験解析コード THANPACST2	放射伝熱、熱伝導及び自然対流熱伝達を考慮して流れと流体及び各構造物の温度分布を同時に解く非定常コードである。基本方程式は非圧縮の連続運動及び流体を固体のエネルギー式流動計算と	最もコストの高いソルバー部（Newton-Raphson 法、ＰＣＧ法）をベクトル化した。流動計算部、温度計算部についてはベクトル化による精度誤差が他部分に影響するため並列化のみを実施した。	オリジナルスカラ： 1h55m38s (1.0 倍) オリジナルベクトル ： 1h10m29s (1.6 倍) チューニングベクトル ：

	熱計算を交互に反復させて非定常計算を行なう。流体と構造物間の熱伝達は既存の自然対流熱伝達の相関式により定めている。放射計算のための形態係数は別途幾何学的手法により求め、コードに入力している。基礎方程式はコントロールボリューム法により差分化し、時間項に対しては前進差分、対流項には一次精度の風上差分、拡散項には中心差分を適応している。		35m32s (3.3 倍) チューニング並列（4 pe）： 16m57s (6.8 倍)
原子炉安全性解析コード RELAP5/MOD2/C36-05	軽水炉の事故時、及び異常過渡変化時における１次系および２次系の熱水力挙動の計算を行う。これには、炉心部や圧力バウンダリ等の構造物に関する温度計算も含まれる。数値解法的には、１次元二相流計算コードであり、質量保存式、運動方程式、エネルギー保存式、及び二相流に関する各種構成方程式から成り立っている。	VPP500 版 RELAP5/MOD2/C36-05 コードを AP3000 にインストールする。作業内容は、非互換項目の修正、スチームテーブル（バイナリ形式）の IEEE 形式の変更等。	
中性子・光子輸送計算コード TORT-DORT	原子炉、核融合炉等の放射線発生施設の遮蔽計算のために ORNL で開発された放射線輸送計算コードで、現在設計等に用いられている DOT3.5 の改良型コードである。ボルツマン型輸送計算式をエネルギー多群、離散角度分点、メッシュ分点を用いて核データの角度分布をルジャンドル展開し、基本的にはダイヤモンド差分法により解いている。	ORNL より送られた DORT-TORT コード群より、CRAY 版の DORT、TORT、GIP、GRTUNCL、VISA、TORSED を抽出し、VPP500 用に変換（倍精度化を含む）を行い、さらにベクトル化を行った。	入力データ・j42.jffnj オリジナルスカラ 2h19m38.32s ベクトル化版 1h 5m49.41s (2.2 倍) 入力データ・j175.jffnj オリジナルスカラ 4h10m39.68s ベクトル化版 2h 9m41.04s (1.9 倍）
非線形フォッカープランクコード	非線形フォッカープランク方程式を ADI 法によって解き、速度分布関数の時間展	本コードに対し、ベクトル化を行い、その後メモリ分割を伴う並列化を行う。	ベクトル化版性能(VPP500) （CPU 時間) (比率）

	開を追跡する。		オリジナルスカラ 6m56.25s (1.0) オリジナルベクトル 2m21.90s (2.9) ベクトル化版ベクトル 19.90s (21.7) 並列化版性能(VPP500) （経過時間） (比率) 1PE ベクトル化版 1h18m02.36s (1.0) 4PE 並列化版 26m38.11s (2.9) 8PE 並列化版 19m16.61s (4.0) 16PE 並列化版 16m51.93s (4.6) 並列化版性能(VPP300) （経過時間）（比率） 1PE ベクトル化版 1h02m01.79s (1.0) 4PE 並列化版 22m45.35s (2.7) 8PE 並列化版 16m59.69s (3.6) 最大解析規模（XxY）(VPP500) （規模） （比率） シングル版 751x 501 (1.0) 4PE 版 1348x1348 (4.8) 16PE 版 2696x2696 (19.3)

			最大解析規模 (XxY) (VPP300) **（規模）　（比率）** **シングル版**　1441x501　(1.0) 4PE **版**　1862x1862 (4.8) 8PE **版**　2619x2619 (9.5) **メモリ分割は領域分割法を採用した。**