# 原子力研究開発を推進するスーパーコンピュータシステムと原子力アプリケーション

日本原子力研究開発機構
システム計算科学センター
平山　俊雄・久米　悦雄・清水　大志

平成22年10月20日

# 概　要

Ⅰ. 原子力研究と計算科学

Ⅱ. スーパーコンピュータ整備計画

Ⅲ. 新スーパーコンピュータの性能

Ⅳ. 京の利用に向けたプログラム開発

Ⅴ. まとめ

# Ⅰ．原子力研究と計算科学

1. 原子力研究開発拠点
2. 原子力研究開発4大プロジェクト
3. 原子力研究における計算科学の役割
4. 原子力研究分野の紹介
5. 欧米における原子力研究開発と計算科学の現状

# 1 原子力機構研究開発拠点

**東濃地区**（約60名）
高レベル放射性廃棄物処分技術研究（結晶質岩系対象）を実施

**幌延地区**（約40名）
高レベル放射性廃棄物処分技術研究（堆積岩系対象）を実施

**青森地区**（約40名）
原子炉施設の廃止措置、海洋調査研究、ITER計画を補完するBA活動支援等を実施

**敦賀地区**（約350名）
もんじゅにおけるFBRサイクル実用化へ向けた研究開発、ふげんにおける廃止措置研究を実施

**東海地区**（約1,860名）
安全研究、原子力基礎・基盤研究の推進、中性子利用研究の推進、高レベル放射性廃棄物処分技術研究、FBR燃料加工開発、軽水炉再処理技術開発、原子力研修や防災研修の実施

**人形峠地区**（約80名）
ウラン濃縮関連施設の廃止措置を実施

**大洗地区**（約590名）
常陽や照射後試験施設等によるFBRサイクル技術開発、HTTR等による核熱利用研究、軽水炉の長期利用対策などに貢献するためのJMTRの改修等を実施

**関西地区**（約110名）
光量子や放射光を用いた量子ビーム応用研究を実施

**東京地区**（約150名）
計算科学研究等を実施

**高崎地区**（約110名）
荷電粒子等を用いた量子ビーム応用研究を実施

**那珂地区**（約220名）
ITER計画推進、炉心プラズマ研究、核融合工学研究を実施

本部（茨城県東海村）等　約440名

計約4,050名

# 2 原子力研究開発4大プロジェクト

## 長期的エネルギー安全保障 地球環境問題の解決

**核燃料サイクルの確立**

高速増殖炉サイクル技術
（国家基幹技術）

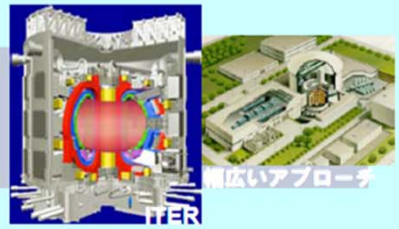
高レベル放射性廃棄物処分技術

**軽水炉サイクル事業支援**

**原子力による水素社会への貢献**

## 国際競争力のある科学技術を 生み出す基盤

核融合研究開発




量子ビームテクノロジー

## 原子力の安全と平和利用を 確保するための活動

**安全研究**

**核不拡散技術開発**

**自らの施設の廃止措置 廃棄物の処理・処分**

**産学官との連携　国際協力 人材育成　原子力情報**

## 共通的科学技術基盤

**原子力基礎工学研究、先端基礎研究**

# 3 原子力研究における計算科学の役割

◆ 原子力の研究開発において、計算科学技術は理論、実験と並ぶ第3の柱

◆ 研究開発の効率化の原動力

- 原子力分野においては、大規模な施設・設備を用いる実験または長期間を要する実験や、観測が困難な現象について、計算科学技術はその解明や予測を可能にする

◆ 原子力施設の安全評価に必要不可欠

- 計算科学技術は、原子炉材料・核燃料の経年変化、原子力施設の耐震性等の詳細を評価・予測可能にする
- 安全性・健全性評価に最新知見を取り入れるための必須技術

◆ 国際競争力強化のカギを握る技術

- 原子力分野への計算科学技術の応用により、「実験・設計の繰り返しによる開発」から「高精度シミュレーション予測に基づく開発の効率化」へと技術革新を可能にする
- 米DOE，欧EURATOMにおいても、原子炉の設計、安全、材料に係るシミュレーション技術開発等を実施

# 原子力委員会からの要請
## － 計算科学技術を活用した原子力研究開発の必要性 －

◆ シミュレーション技術の高度化等による大規模な技術システム開発の効率化
- 原子力政策大綱

◆ 最高水準の計算機シミュレーション能力を整備・維持・発展

◆ 開発システムの適合性を早い段階から計算機によるモデリング・シミュレーション技術等を駆使して多面的に評価
- 第5回原子力委員会資料第1号 （独立行政法人日本原子力研究開発機構の次期中期目標の策定について（見解））

◆ 近年急速に進歩してきた情報技術、モデリングとシミュレーション技術を駆使して、性能目標を達成するシステム実現を、設計、製造・建設、運転、廃棄に至るすべてのプロセスについて、研究開発の可能な限り初期の段階から多面的かつ徹底的に検討するフロントローディング型の研究開発活動の導入を検討
- 原子力委員会　研究開発専門部会資料　原子力政策大綱に示している原子力研究開発に関する取組の基本的考え方の評価

# 4 原子力研究分野の紹介

1. 核融合プラズマ乱流シミュレーション
2. 原子力機器内沸騰二相流解析
3. ナトリウム冷却高速炉における非定常流動現象
4. 第一原理計算による材料劣化メカニズム（粒界脆化）の研究
5. その他計算科学研究事例

# 1 核融合プラズマ乱流シミュレーション

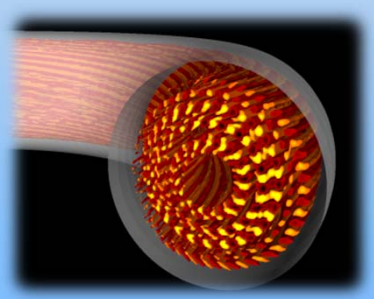
**計算コード名：GT5D**

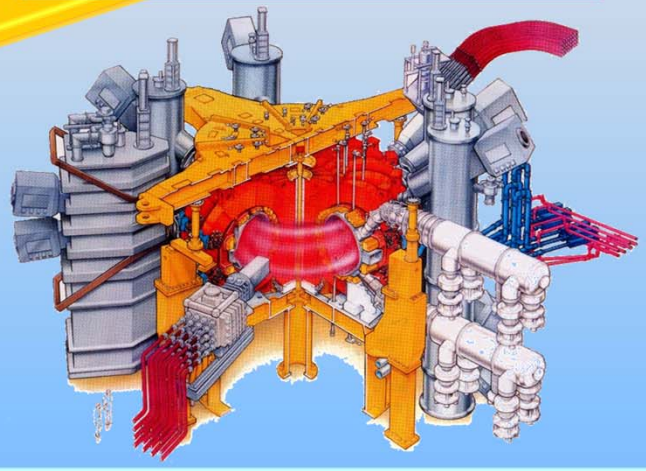
5次元運動論モデルによる核融合炉心全体の
プラズマ乱流輸送シミュレーション

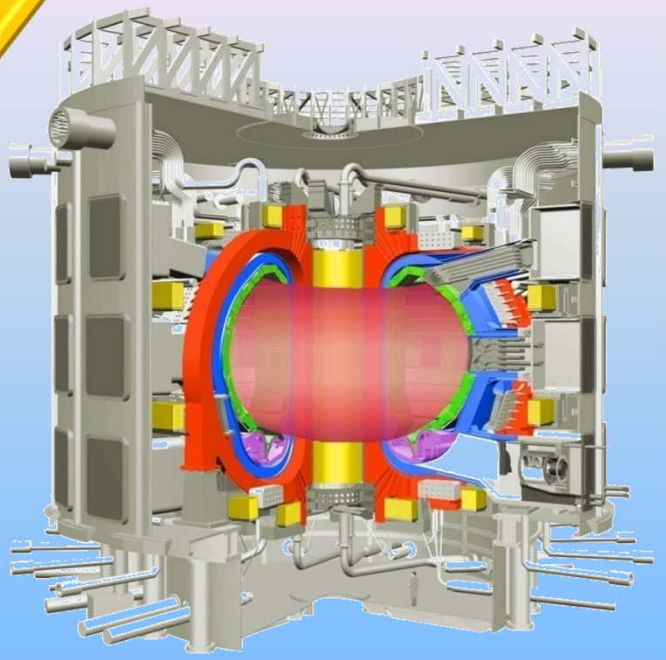
国際熱核融合実験炉 ITER

臨界プラズマ試験装置 JT60U

小型装置モデル
（現状サイズ）







| | 小型装置 | JT60U | ITER |
|---|---|---|---|
| 炉心体積 | $6m^3$ | $60m^3$ | $800m^3$ |
| 格子数 | $5.24 \times 10^9$ | $1.38 \times 10^{11}$ | $1.23 \times 10^{12}$ |
| メモリ量 | 800GB | 14TB | 147TB |
| 計算量（実効性能・日） | 30TFlops･day | 750TFlops･day | 7PFlops･day |

# 2 原子力機器内沸騰二相流解析

**計算コード名：TPFIT**

**計算の目的**

大規模数値解析に基づき大型実験に依存しない原子炉熱設計手法の開発

**計算内容**

気液二相流挙動を実験式を使用せず、気液界面の形状変化等を直接解析することで、原子炉内の詳細な二相流解析を行う

- ◆大規模（高額・長時間）な実験結果が不要
- ◆使用者の経験に依存しない（経験に依存する解析パラメータがない）
- ◆単一のコードで様々な解析が可能

(a)気泡流　　(b) 噴流

**二相流解析結果**

様々な形態の二相流が解析可能

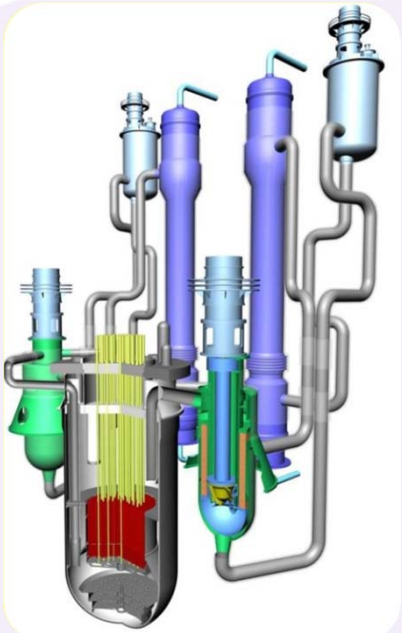
**原子炉内二相流解析結果**

加速器駆動炉の核破砕ターゲット

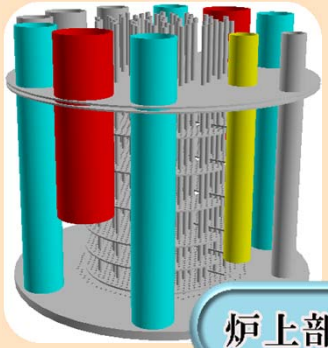
# 3 ナトリウム冷却高速炉における非定常流動現象

## 計算コード名：AQUA, MUGTHES

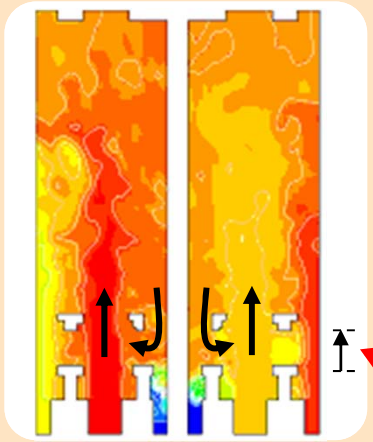
### 高サイクル熱疲労解析



ナトリウム冷却
大型高速炉(JSFR)



炉上部プレナム



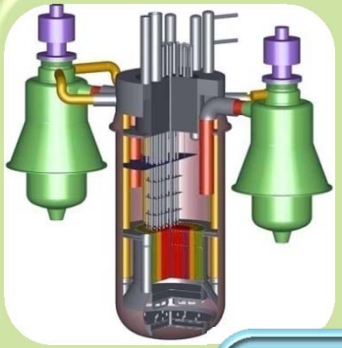
瞬時の温度流速分布
（垂直断面）
赤：高温ナトリウム、
青：低温ナトリウム

※矢印は制御棒周りの
特徴的な流れ

緩和策：CIPを上昇
（50mm→100mm）

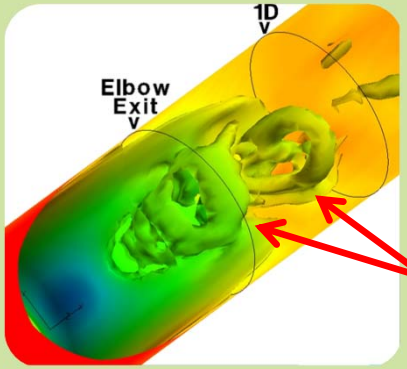
高低温ナトリウムの混合による温度変動をシミュレーション。
高サイクル熱疲労の原因となる温度変動の発生を抑制する緩和策の提言とその効果を検証。

### 大口径配管の流動振動解析



1次系冷却系

冷却系配管内を流れる冷却材（ナトリウム）の流れをシミュレーション。
逆L字配管においてアーチ状の渦が発生している状態。
この渦の発生による配管振動への影響を解析。




アーチ状渦
構造の形成

## 計算コード名：MUGTHES, STAR-CD, ABAQUS

# 4 第一原理計算による 材料劣化メカニズム(粒界脆化)の研究

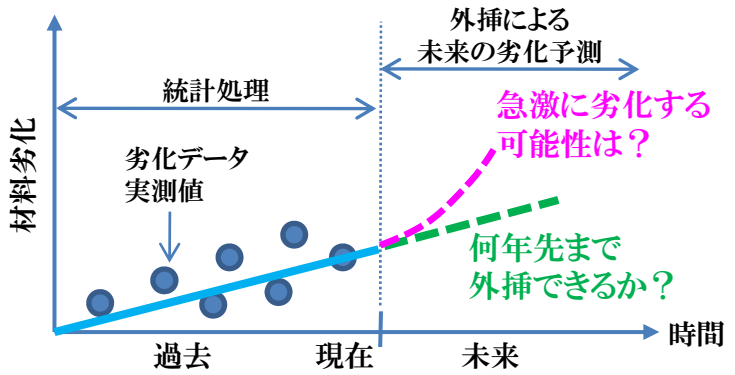
**計算コード名:VASP**

**劣化メカニズムを把握しなければ、科学的・合理的根拠に基づく劣化予測ができない**

## 計算の目的、概要

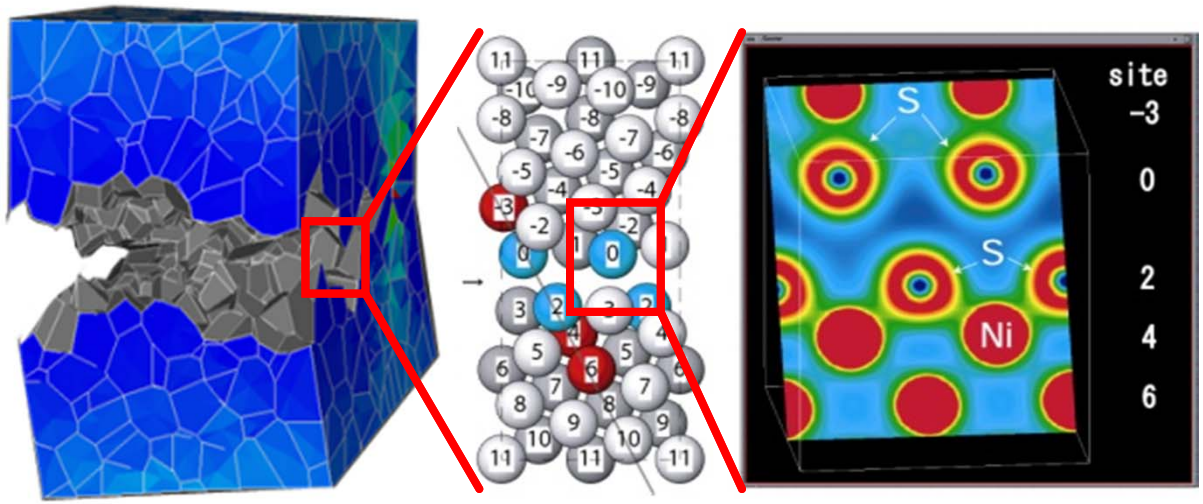
◆原子炉構造材料の劣化メカニズム解明を通して、原子炉の高経年化対策に科学的・合理的根拠を提供すること。

◆本研究では「粒界脆化」という劣化について、原子・電子レベルから、そのメカニズムを明らかにする。




## 計 算 内 容

◆結晶粒界の原子モデルを作り、第一原理計算によって不純物元素の粒界への集まりやすさ、粒界強度の変化を調べる。

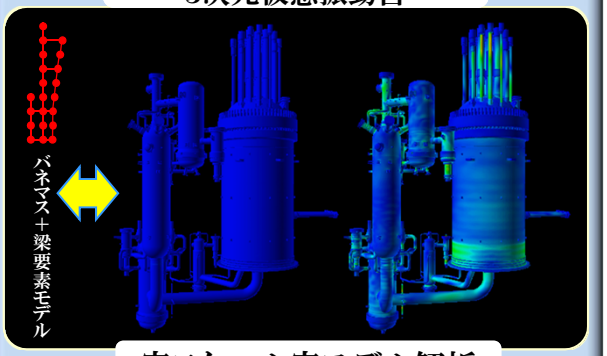


# 5 計算科学研究事例

## 重点安全研究計画：耐震安全評価のための3次元仮想振動台

地震PSAと連携し、全体裕度評価を可能に。
設計評価技術への展開・試験回数の削減

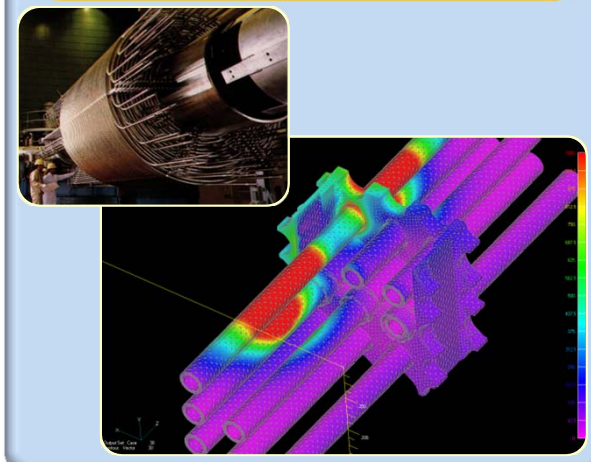
システム計算科学センター
3次元仮想振動台




実スケール実モデル解析

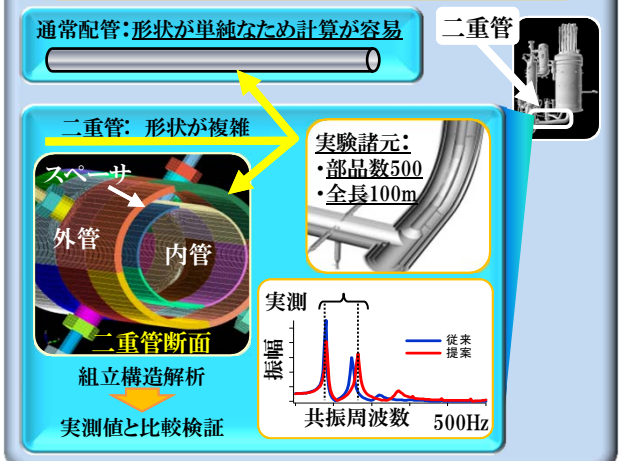
## 「もんじゅ」蒸気発生器の構造－流動－電磁場シミュレーション

地震PSAと連携し、全体裕度評価を可能に。
設計評価技術への展開・試験回数の削減



## 高温工学試験研究炉(HTTR)の二重管解析の安全確認に貢献

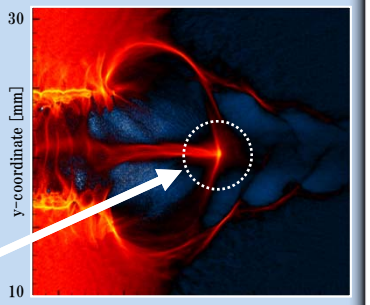
複雑構造の特性を正確に把握
柏崎規模の地震でも健全




## 高強度レーザーによる高エネルギー粒子（数十MeV級陽子線）発生

3次元粒子シミュレーションによる新しい加速機構を発見

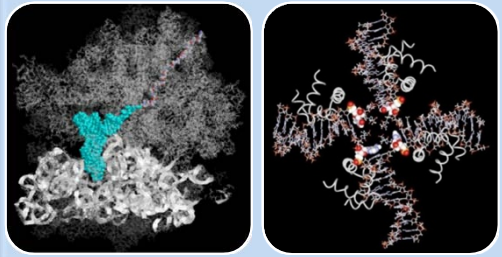
磁気双極子渦
（磁場強度分布）
シミュレーション結果



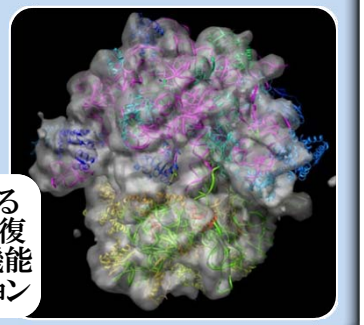

イオンが集積電界を誘起

## 放射線による損傷DNAの修復タンパク質機能を探索

リボソーム機能発現シミュレーション

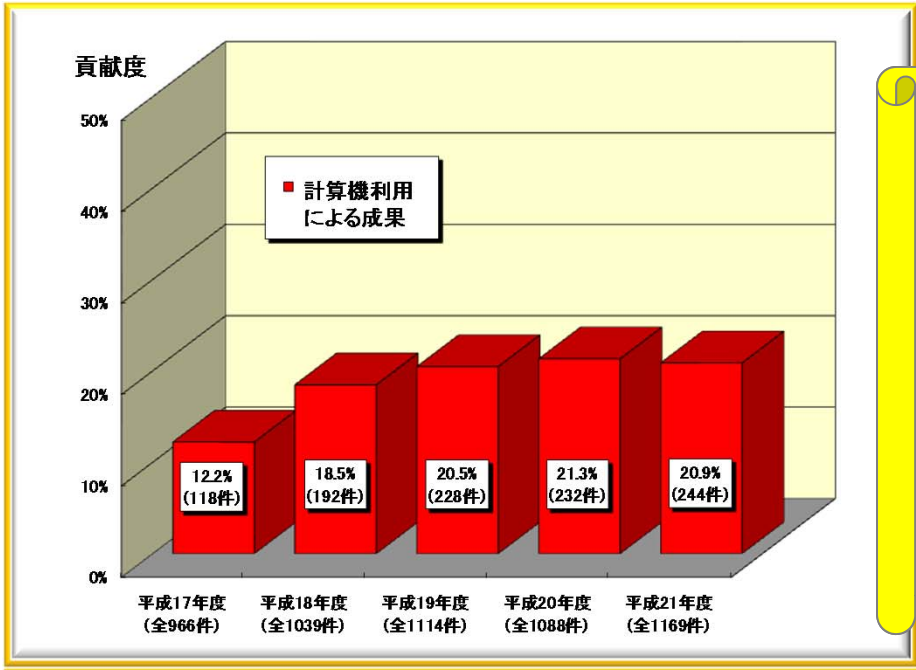


## 分子動力学シミュレーション（SCUBA）による生命基本現象を解明

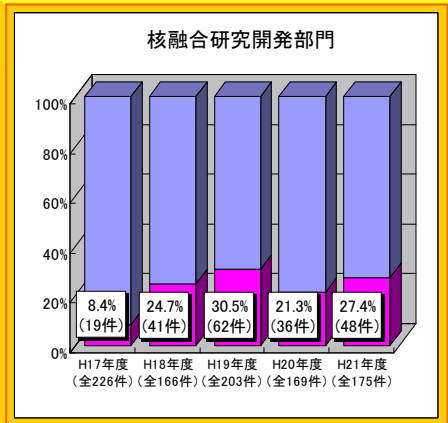


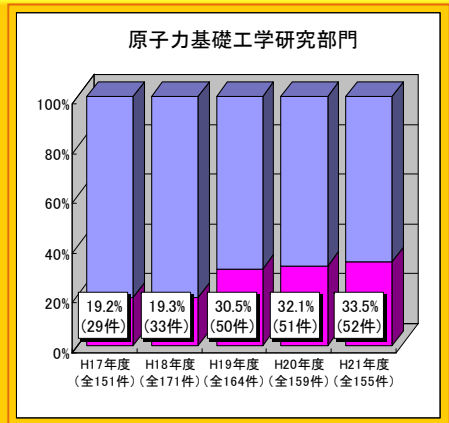
放射線による
損傷DNA修復
タンパク質機能
シミュレーション

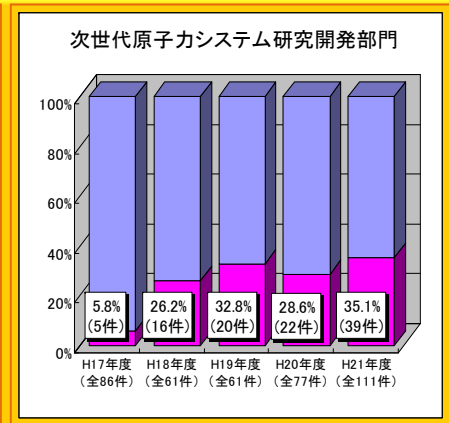
# －原子力機構（研究成果に対する計算科学の貢献）－

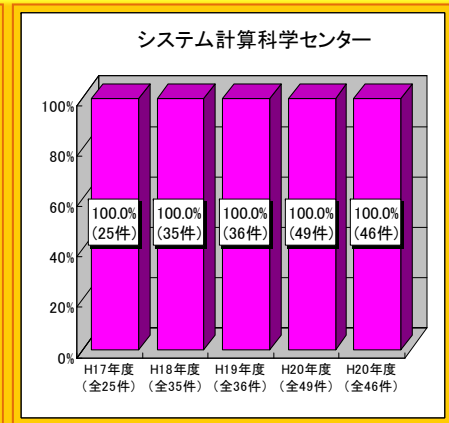



- ◆ 原子力機構成果（査読付論文）の 20% 以上が計算科学技術的手法による
- ◆ 論文数では、5年間で約2倍に増加
- ◆ 原子力基礎、核融合、次世代部門では 部門全体の成果の1/4～1/3 を占める



# 5 欧米における原子力研究開発と計算科学の現状
## －米国における原子力計算科学研究の動向－

| 管轄 | 分野 | 機関名* | 順位 |
|---|---|---|---|
| DOE | 原子力 | ORNL | 1 |
| | | LANL | 3 |
| | | LLNL | 8 |
| | | ANL | 9 |
| | | SNL | 10 |
| NSF | 基礎・基盤 | テネシー大 | 4 |
| NASA | 航空宇宙 | ARC | 6 |

アルゴンヌ国立研究所のプレス発表
（2009年12月31日@ニューヨークタイムズ）

**“At Argonne Lab, a Shift From Radioactivity to Supercomputers”**

スーパーコンピュータTOP500（2010年6月）

補足：2位と7位は、National Supercomputing Centre in Shenzhen(中国)
5位は、Forschungszentrum Juelich (独国)

**1. ハードウェア**（スーパーコンピュータ等）
- ●連邦政府による研究・学術機関向け支援（市場45%）
- ●TOP500の50位以内中、18台は国立研究所で運用

**2. ソフトウェア**（シミュレーションとモデリング）
- ●先端科学コンピューター研究*プログラム等による拠点化
  （ORNL、ANL等エネルギー革新拠点」を創設・運営）
- ●総額366百万ドルの投資発表（122百万ドル/5年・拠点）

＊ORNL: Oak Ridge National Laboratory, LANL: Los Alamos National Laboratory,
LLNL: Lawrence Livermore National Laboratory, ANL: Argonne National Laboratory,
SNL: Sandia National Laboratory, ARC: Ames Research Center

＊Advanced Scientific Computing Research

# －欧州（フランス原子力庁）における原子力計算科学の動向－

## EUプロジェクト：PRACE
（欧州における先端計算科学研究連携）

## CEAにおける計算科学推進拠点設立
（フランス原子力庁における計算科学の活性化）

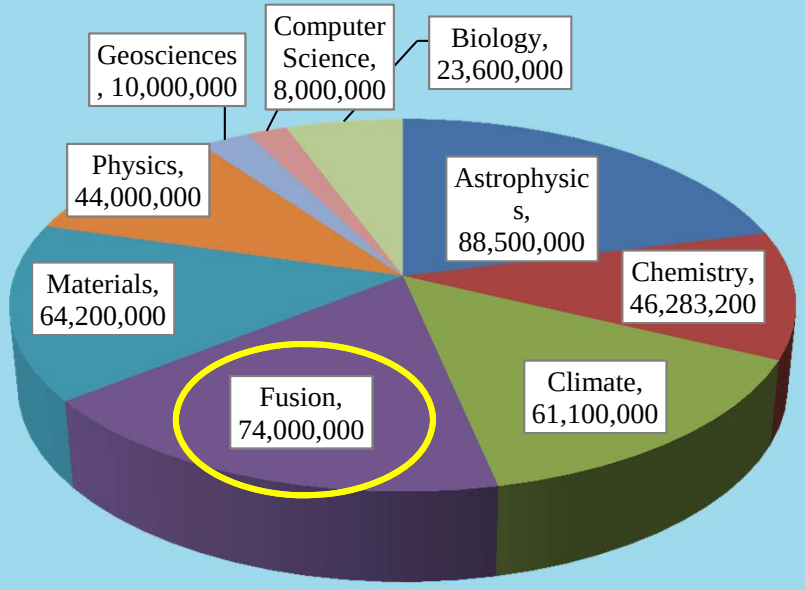
### 1. ハードウェア（スーパーコンピュータ等）
●目標：向こう5年間で6か所に数ペタ級計算機を導入
●投資：400百万ユーロ/5年

### 2. ソフトウェア（シミュレーションとモデリング）
●従来：CEA内7拠点で計算科学を推進
●新体制：計算科学による原子力研究の加速表明

# －欧米のフラッグシップマシンにおける計算機資源割り当て－

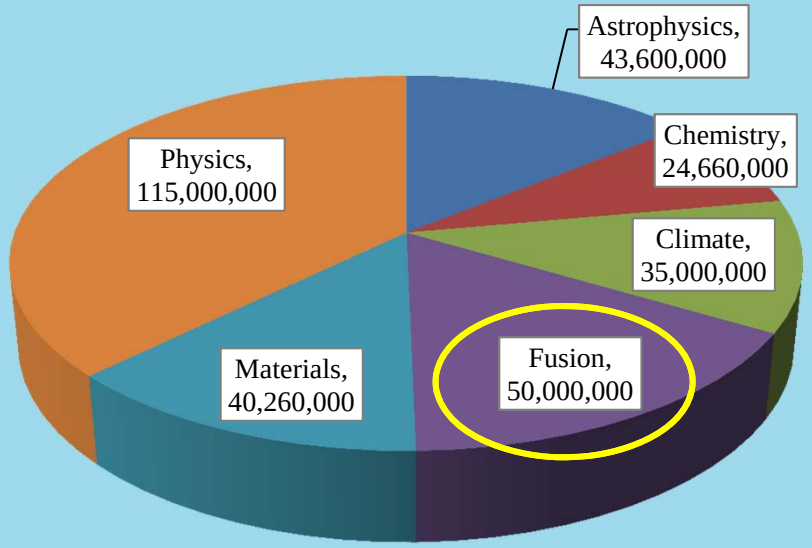
## 米　国

ORNL-Jague
CrayXT5, 2.3PFlops
(Top500-Rank1)




## 欧　州

FZJ-JUGENE
IBM BlueGene/P, 1PFlops
(Top500-Rank5)



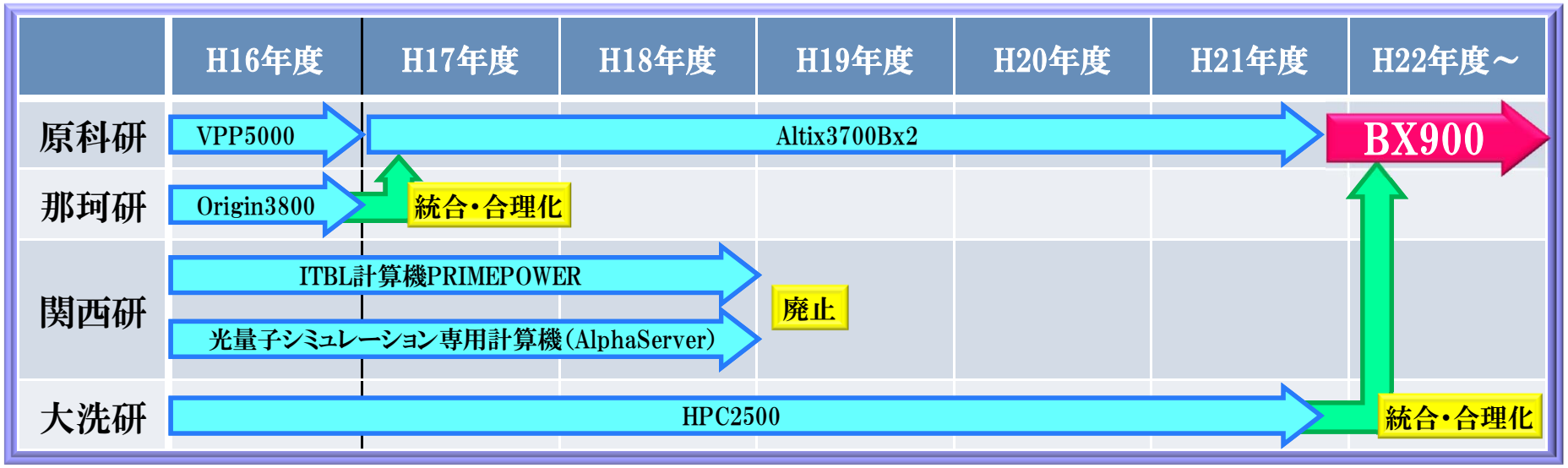

※ORNLデータ: http://www.nccs.gov/leadership-science/project-archive-list/fy09-projects/
※FZJデータ: http://www.prace-project.eu/hpc-access/page-11/

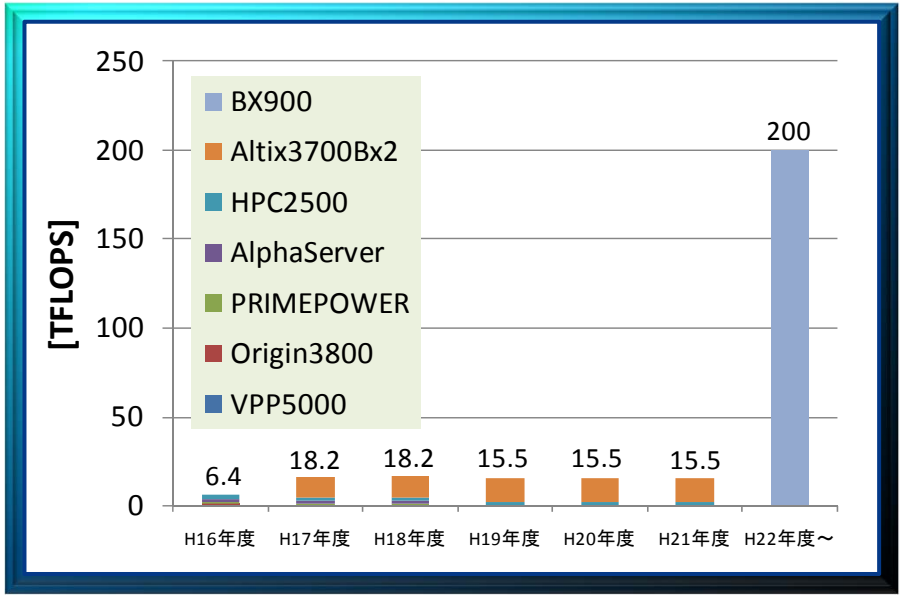
**世界的な動向として核融合はHPC開発を牽引する重要な分野となっている**

# Ⅱ. スーパーコンピュータ整備計画

1. 独立行政法人化ならびに二法人統合による スーパーコンピュータ資源の整理・統合
2. 計算需要動向とスーパーコンピュータ整備 方針
3. 新スーパーコンピュータの構成
4. 新スーパーコンピュータの利用状況
5. 増大する計算需要への対応

# 1 独立行政法人化ならびに二法人統合による スーパーコンピュータ資源の整理・統合

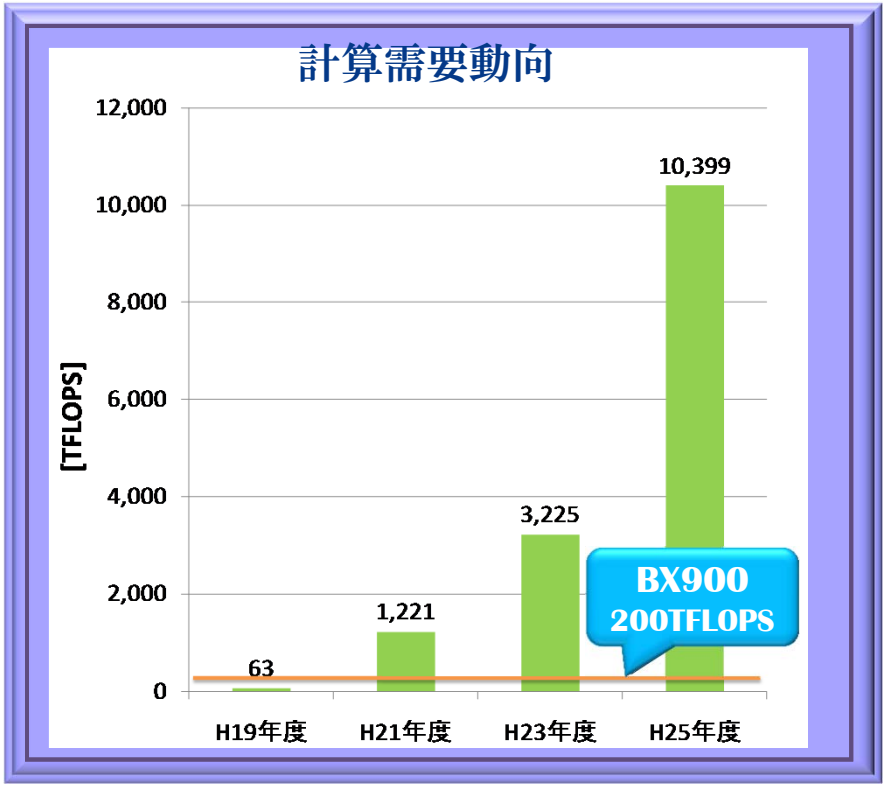


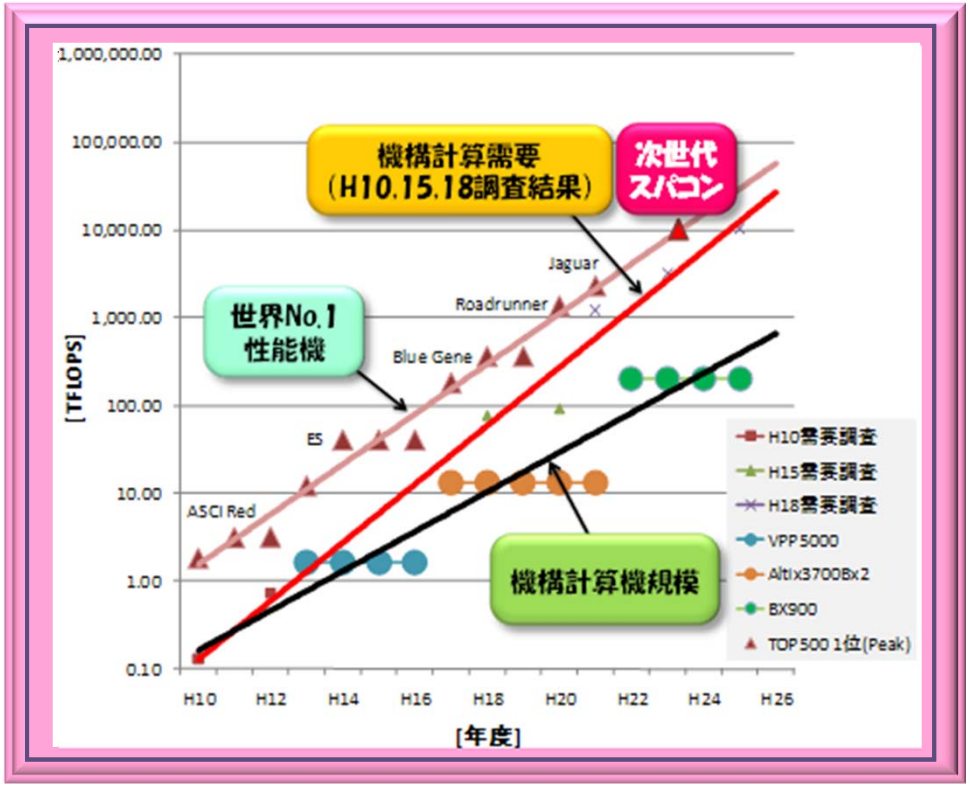




◆原子力機構では、原科研、那珂研、関西研及び大洗研の4地区でスパコンを運用

- 平成16年度末に原科研と那珂研を統合。
- 平成18年度末には法定耐用年数を経過した関西研のシステムを廃止。
- 平成21年度末に原科研と大洗研（旧JNC）を統合、原子力機構における唯一のシステム。
- 統合・合理化計画を完了。

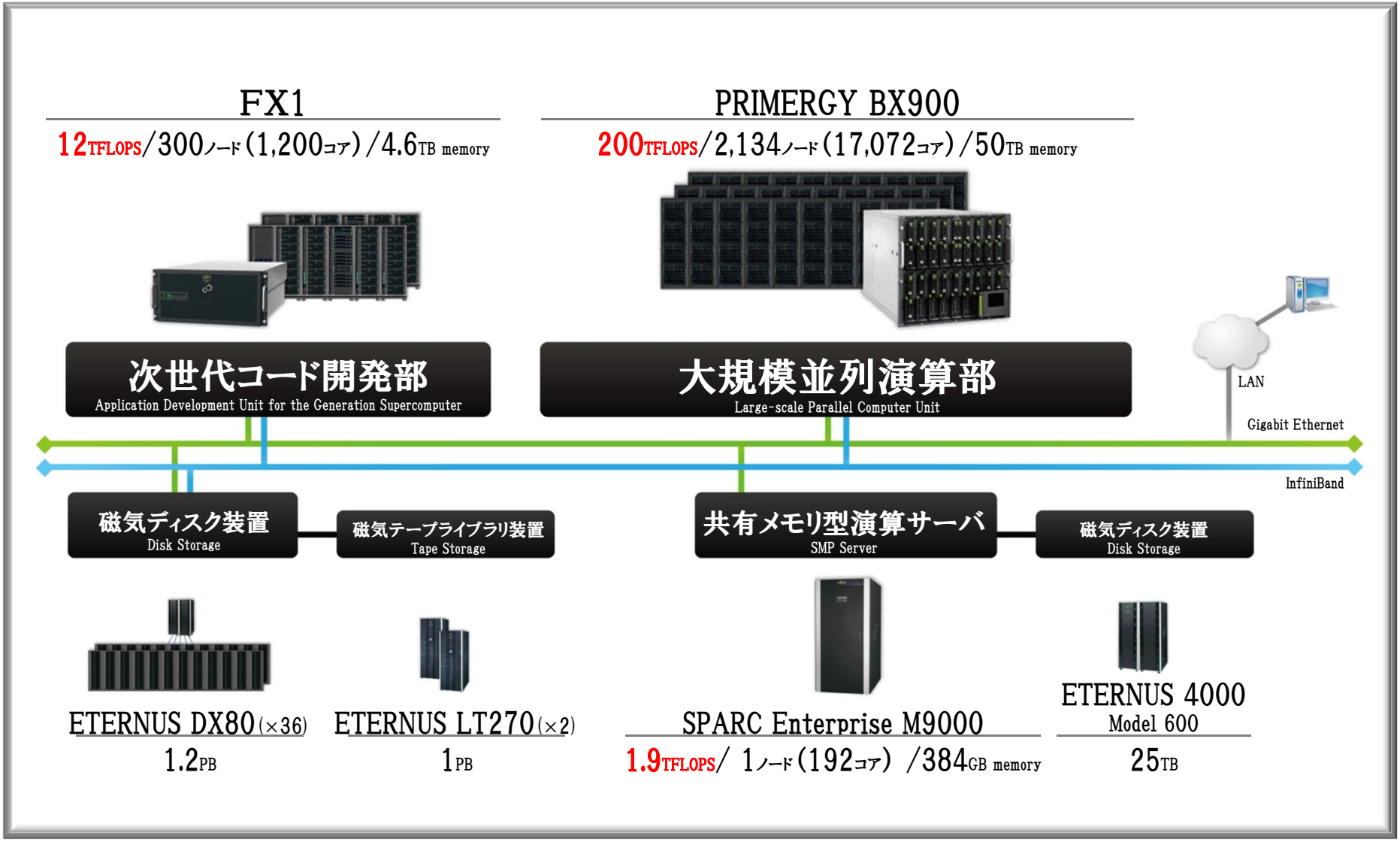
# 2 計算需要動向とスーパーコンピュータ整備方針



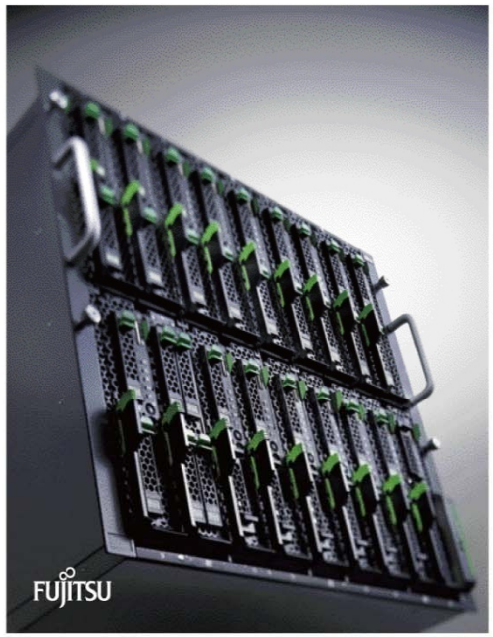

- ◆ 原子力の計算需要は拡大の一途
- ◆ 計算機資源の枯渇は深刻な状況
- ◆ スーパーコンピュータ整備方針
  - ① 旧２法人のスーパーコンピュータを統合・合理化し、よりコストパフォーマンスの高い新システムへ更新 → BX900
  - ② 京コンピュータを活用するための環境整備 → FX1

# 3 新スーパーコンピータの構成



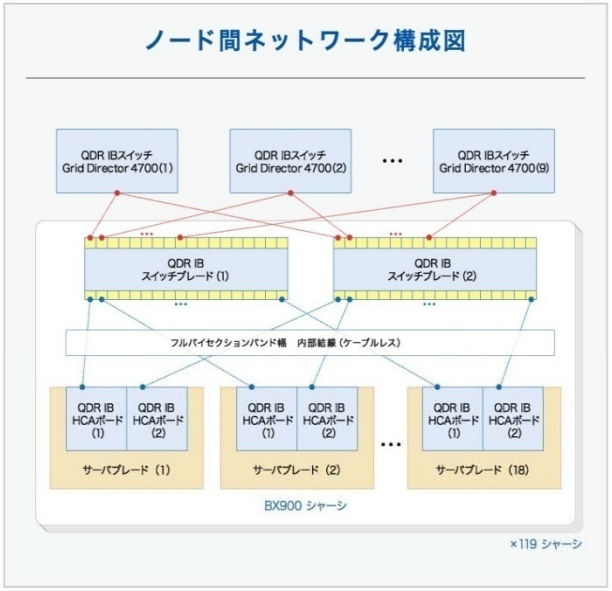
# 大規模並列演算部
## Large-scale Parallel Computation Unit

大規模並列演算部「PRIMERGY BX900」は、国内最高性能となる200TFLOPSの理論演算性能（ピーク）を有する大規模Linuxクラスタシステムです。本システムは、2,134ノードのサーバブレードから構成され、各ノードにはインテル®Xeon®プロセッサX5570（クアッドコア）を2プロセッサ、主記憶24GBを搭載しています。ノード間は、InfiniBand™ QDRの2ポート接続により片方向8GB/sの帯域を有し、高速なデータ転送を実現しています。本システムでは、主に原子力基礎工学、核融合、量子ビーム、計算科学分野などにおける大規模シミュレーション計算処理を行います。




### PRIMERGY BX900

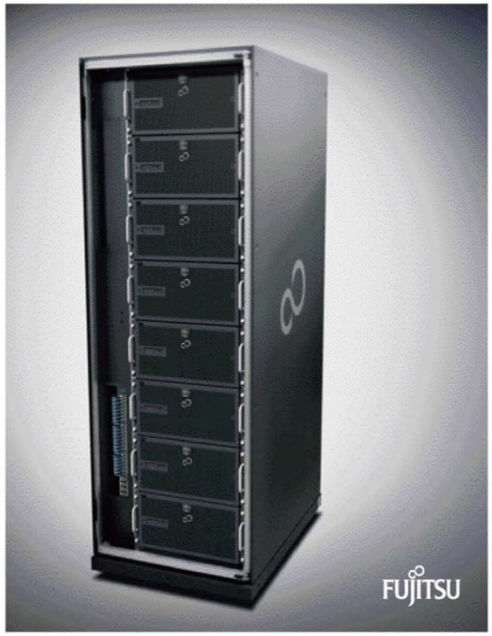
| | | |
|---|---|---|
| システム System | 理論演算性能 Theoretical Peak Performance | 200TFLOPS |
| | 主記憶容量 Total Memory | 50TB |
| | ノード数 Number of Nodes | 2,134Nodes |
| | プロセッサ数(コア数) Number of Processors (Number of Cores) | 4,268Processors (17,072Cores) |
| プロセッサ Processor | プロセッサ名 Processor | Intel®Xeon®Processor X5570 |
| | コア数／プロセッサ Number of Cores / Processor | 4Cores |
| | 理論演算性能／コア Theoretical Performance / Core | 11.72GFLOPS |
| | メモリバンド幅／プロセッサ Memory Bandwidth / Processor | 25.6GB/s |
| | キャッシュ Cache Size | 8MB |
| ノード Node | プロセッサ数／ノード Number of Processors / Node | 2Processors |
| | 理論演算性能／ノード Theoretical Performance / Node | 93.76GFLOPS |
| | 主記憶容量／ノード Memory / Node | 24GB |
| | ノード内メモリバンド幅／ノード内理論演算性能 Memory Bandwidth / Theoretical Performance | 0.54B/FLOP |
| ノード間ネットワーク Interconnect | ネットワークトポロジ Network Topology | Fat Tree |
| | 通信性能 MAX throughput | 8GB/s×2 (in/out) |
| | ノード間理論転送速度(双方向)／ノード内理論演算性能 Theoretical Throughput / Theoretical Performance (node) | 0.17B/FLOP |



# 次世代コード開発部

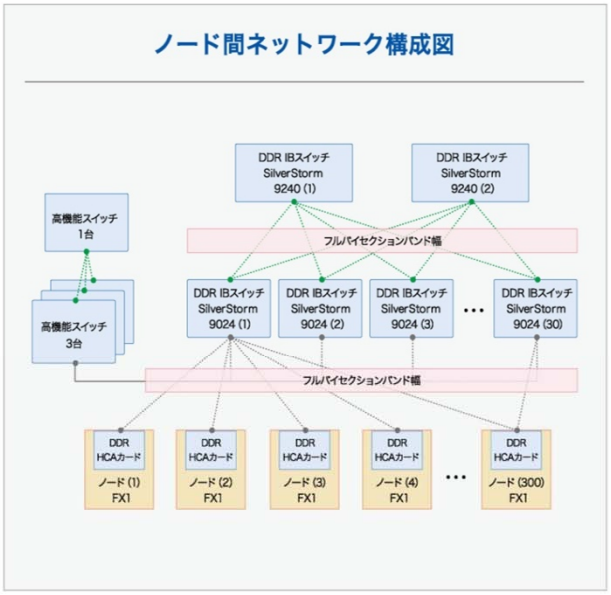
## Application Development Unit for the Next Generation Supercomputer

次世代コード開発部「FX1」は、12TFLOPSの理論演算性能（ピーク）を有するクラスタシステムです。本システムは、300ノードから構成され、各ノードには富士通クアッドコアプロセッサSPARC64™ VIIIfxを1プロセッサ、主記憶16GBを搭載し、専用チップセットにより40GB/sという高メモリバンド幅を実現しています。また、並列プログラムにおけるプロセス間の同期や総和処理などを高速化する高機能インターコネクトスイッチ（ハードウェア）を有しています。本システムでは、本システムの技術が次世代スーパーコンピュータのベースとなっている特徴を生かし、次世代スーパーコンピュータの利用に向けたアプリケーション開発を行います。




### FX1

| | | |
|---|---|---|
| システム System | 理論演算性能 Theoretical Peak Performance | 12 TFLOPS |
| | 主記憶容量 Total Memory | 4.6 TB |
| | ノード数 Number of Nodes | 300 Nodes |
| | プロセッサ数（コア数） Number of Processors (Number of Cores) | 300 Processors (1,200 Cores) |
| プロセッサ Processor | プロセッサ名 Processor | SPARC64™ VIIIfx |
| | コア数／プロセッサ Number of Cores / Processor | 4 Cores |
| | 理論演算性能／コア Theoretical Performance / Core | 10 GFLOPS |
| | メモリバンド幅／プロセッサ Memory Bandwidth / Processor | 40 GB/s |
| | キャッシュ Cache Size | 1st: 128 KB/Core 2nd: 6 MB/Processor |
| ノード Node | プロセッサ数／ノード Number of Processors / Node | 1 Processor |
| | 理論演算性能／ノード Theoretical Performance / Node | 40 GFLOPS |
| | 主記憶容量／ノード Memory / Node | 16 GB |
| | ノード内メモリバンド幅／ノード内理論演算性能 Memory Bandwidth / Theoretical Performance | 1.0 B/FLOP |
| ノード間ネットワーク Interconnect | ネットワークトポロジ Network Topology | Fat Tree |
| | 通信性能 MAX throughput | 2 GB/s ×2 (in/out) |
| | ノード間理論転送速度（双方向）／ノード内理論演算性能 Theoretical Throughput / Theoretical Performance (/node) | 0.10 B/FLOP |



# 共有メモリ型演算サーバ

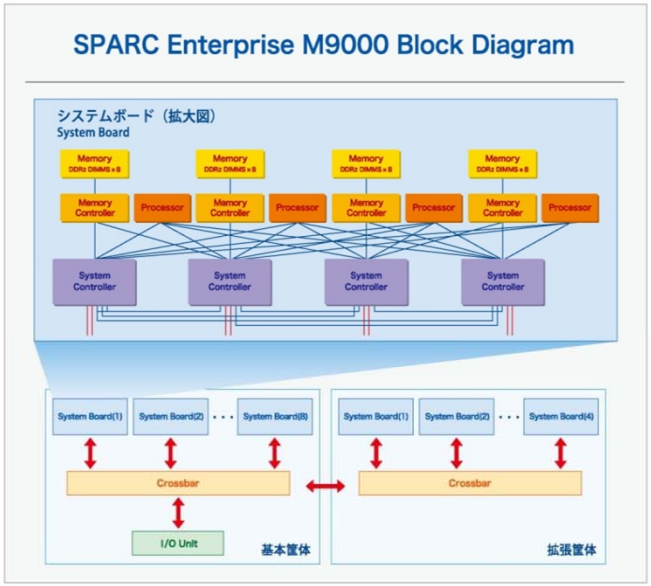
## SMP Server

共有メモリ型演算サーバ「SPARC Enterprise M9000」は、1.9TFLOPSの理論演算性能（ピーク）を有するSMPサーバです。
本システムは、1ノード構成で富士通クアッドコアプロセッサSPARC64™ VIIを48プロセッサ、主記憶384GBを搭載し、広大な共有メモリ空間を実現しています。本システムでは、主に次世代原子力システム開発のためのシミュレーション、安全評価などの計算処理を行います。

SMP (Symmetric Multiprocessing)：メモリ共有型並列コンピューティング(マルチプロセッシング)方式。
SMPとは、複数のプロセッサによって処理を分散させるマルチプロセッサの方式のひとつ。
各プロセッサを等しく扱うことによって並列処理を行わせる方式のこと。全プロセッサが共通にアクセス出来るメモリ（空間）を持つ。

### SPARC Enterprise M9000

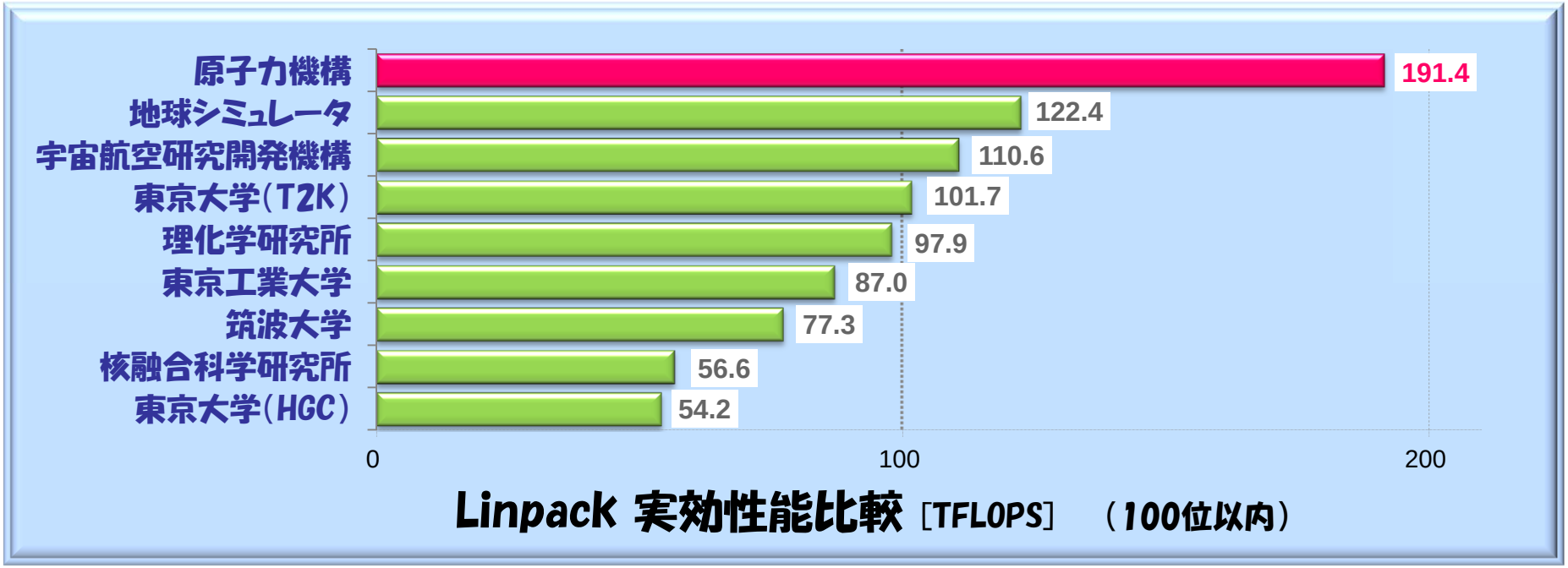
| | | |
|---|---|---|
| システム System | 理論演算性能 Theoretical Peak Performance | 1.9 TFLOPS |
| | 主記憶容量 Total Memory | 384 GB |
| | ノード数 Number of Nodes | 1 Node |
| | プロセッサ数(コア数) Number of Processors (Number of Cores) | 48 Processors (192 Cores) |
| プロセッサ Processor | プロセッサ名 Processor | SPARC64™ VII |
| | コア数／プロセッサ Number of Cores / Processor | 4 Cores |
| | 理論演算性能／コア Theoretical Performance / Core | 10 GFLOPS |
| | キャッシュ Cache Size | 1st: 128 KB/Core 2nd: 6 MB/Processor |



# － Linpack ベンチマークテスト －

| | Linpack性能 [TFLOPS] | ピーク性能 [TFLOPS] | 効率 [%] | 実行時間 [h] | 問題規模 [元] |
|---|---|---|---|---|---|
| BX900 | 191.40 | 200.1 | 95.66 | 13.40 | 2,401,344 |
| FX1 | 11.66 | 12.9 | 90.37 | 5.68 | 709,632 |

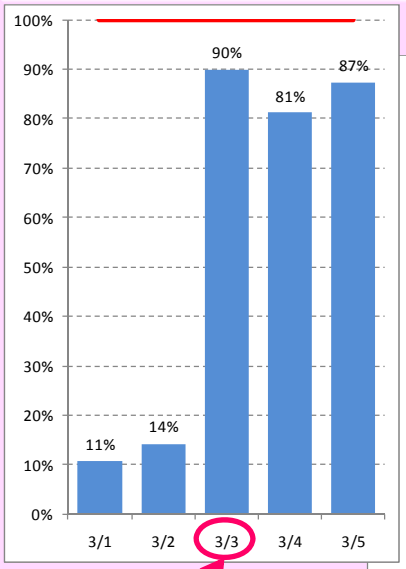
**BX900のLinpack性能は、国内1位（実行効率1位）、世界22位（実行効率2位）**
**（Top500 2010.6）**



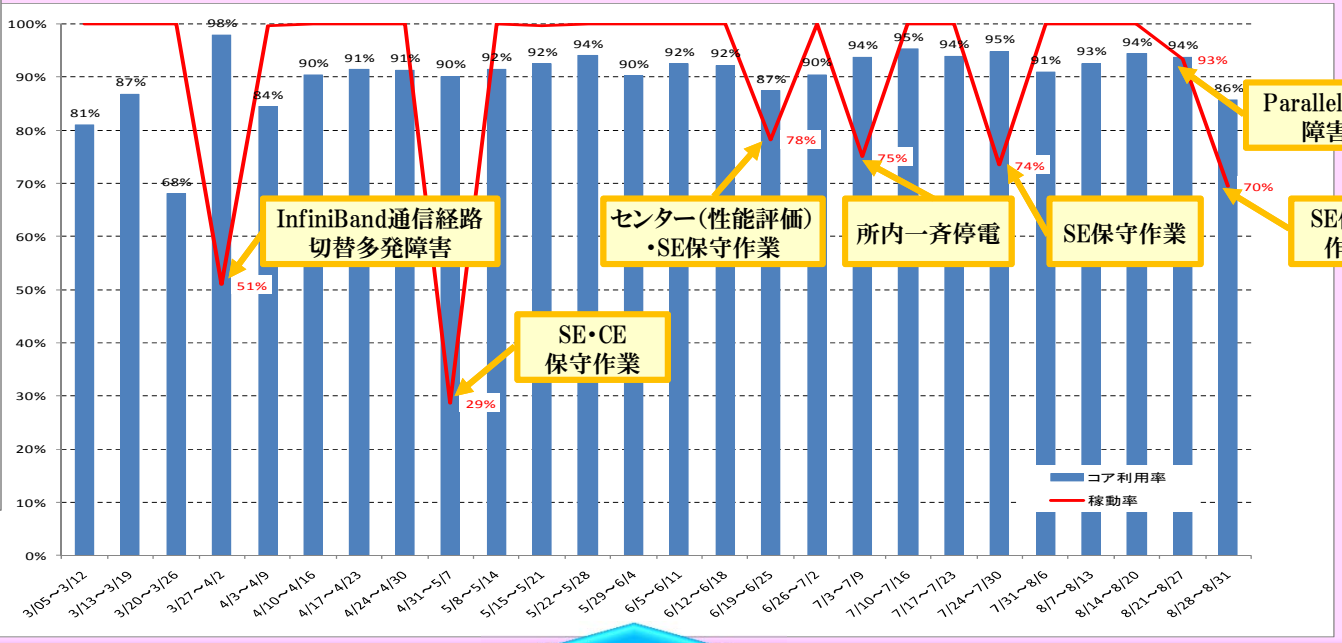
# 4 新スーパーコンピュータの利用状況

**― BX900 ―**

- 運用開始3日目（3月3日）にして、90%の利用率を達成
- 週毎の推移も4月以降90％以上の状態が継続




高い計算需要

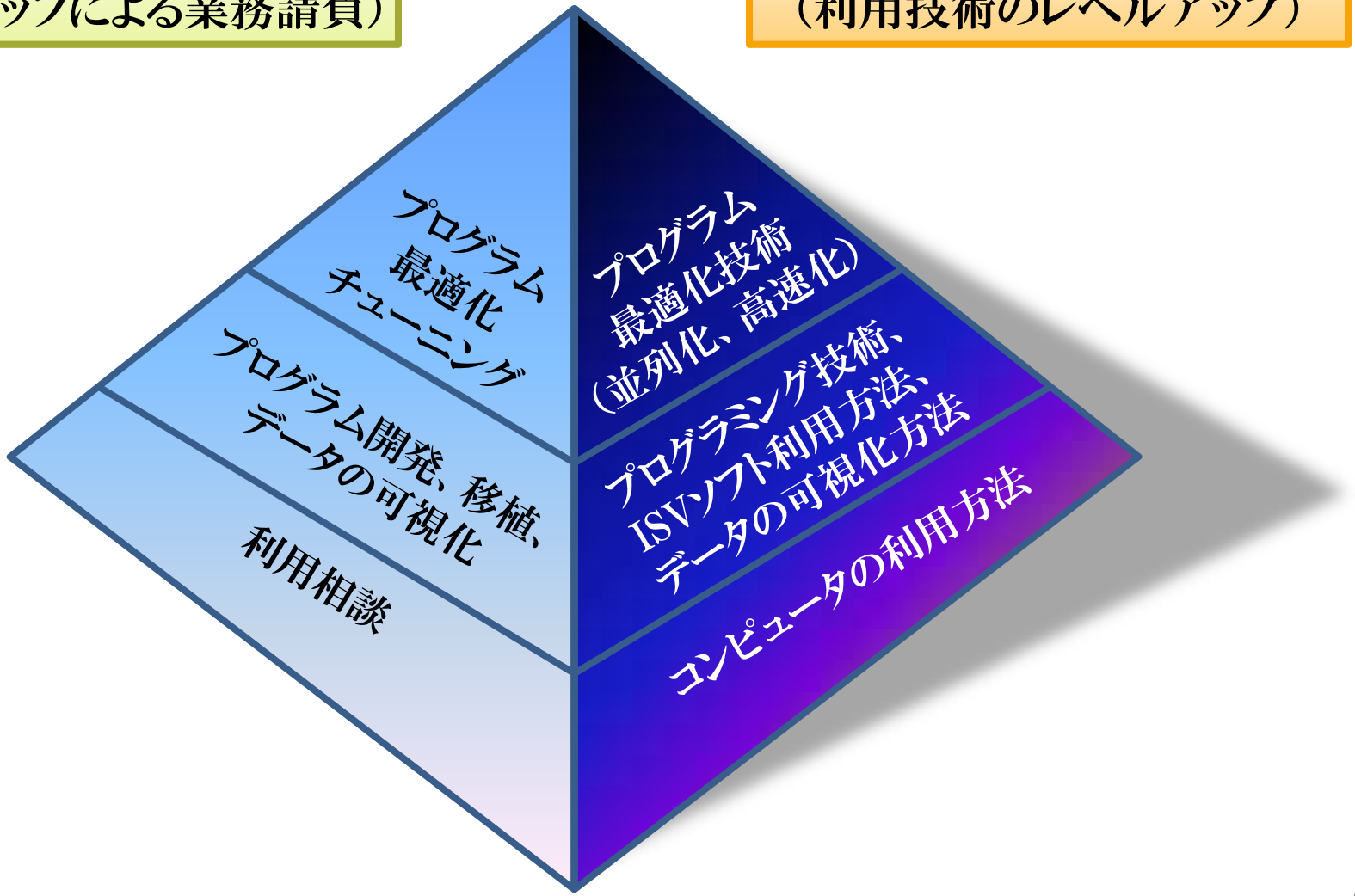



- システム利用に対する充実したサポート体制が確立されている（ユーザプログラムの最適化チューニング、プログラム移植、講習会開催、利用相談体制）
- 旧システム時代から主要コードの高並列化・最適化が進んでいる
- 高並列スーパーコンピュータを使う能力を有する研究者が数多く育っている

# ― 原子力機構のスーパーコンピュータ利用支援体制 ―

**利用者支援**
**（専門スタッフによる業務請負）**

**講習会・セミナー**
**（利用技術のレベルアップ）**



# － 国内機関のスーパーコンピュータ利用支援体制 －

**原子力機構**

プログラムの最適化（高速化）や利用相談対応など、充実した
利用支援体制の下、研究者のサポートと計算機資源の有効利用

| 機関 | 利用相談 | プログラム最適化 | プログラム作成 | 備考 |
|---|---|---|---|---|
| JAEA | ● (5) | ● (7) | ● (6) | （ ）内は要員数 |
| A機関 | ● | | | |
| B機関 | ● | | | |
| C機関 | ● | ● | ● | プログラム最適化は相談・チューニング支援レベル |
| D機関 | ● | ● | | |
| E機関 | ● | | | |
| F機関 | ● | ● | | |
| G機関 | ● | | | |
| H機関 | ● | | | |

# 5 増大する計算需要への対応

## － 大型計算機利用課題評価制度 －

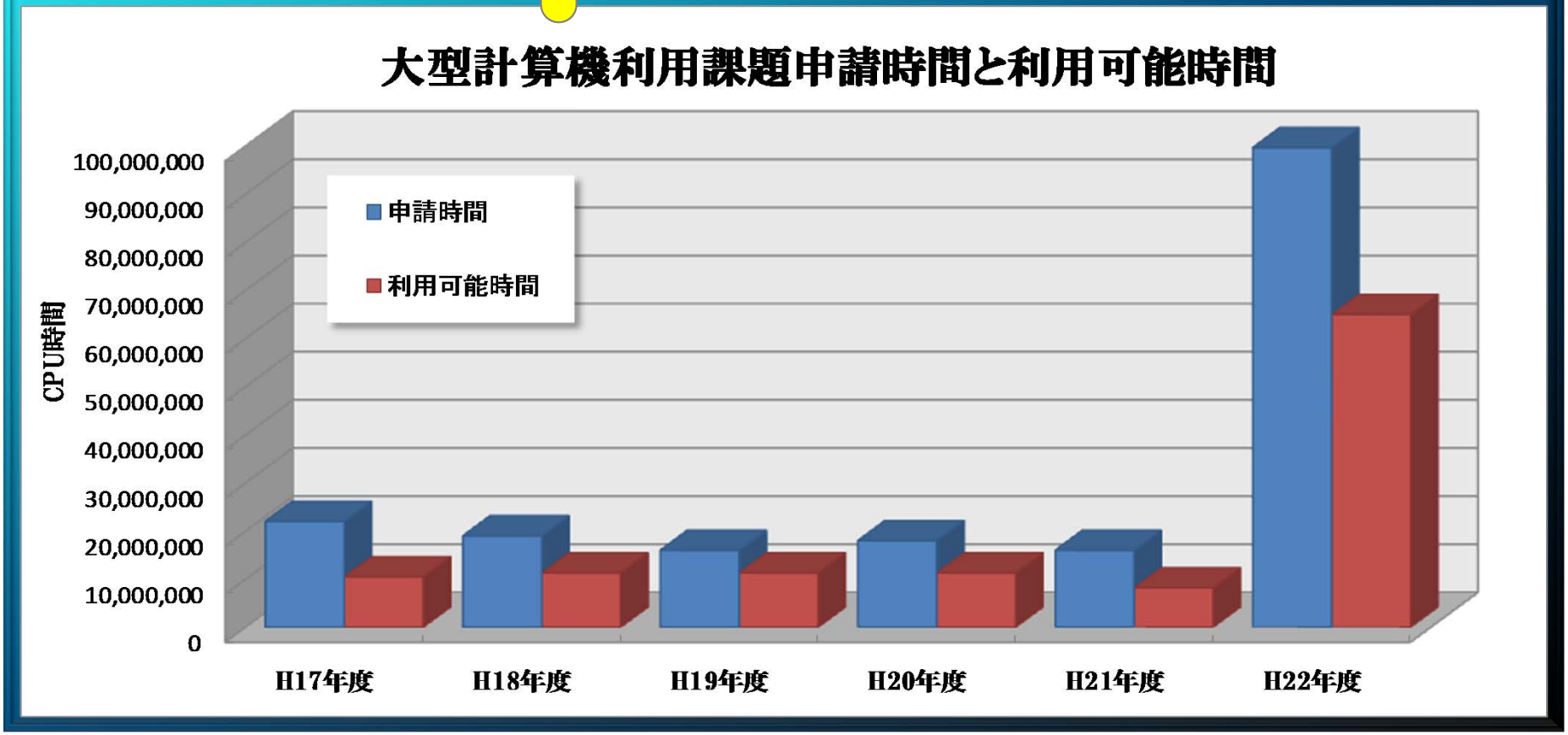
大型計算機資源の効率的・効果的利用を促進するために、平成17年度より、「大型計算機利用委員会」を設置し、大規模利用課題を評価、計算時間を配分

| 対象計算機 | | BX900（資源の約90％を承認課題に配分） |
|---|---|---|
| 課題申請条件 | | 年間 250,000コア時間超、または256並列超 |
| 評　価 | ① | 計算コードの実行効率、並列化効率 |
| | ② | 「研究成果の期待度」、「必要性及び緊急性の程度」、「計算時間設定の妥当性」の3項目について委員会による5段階評価 |
| | ③ | 年度末に利用結果「得られた成果の重要度、達成度及び費用（CPU時間）対効果」について委員会による5段階評価。<br>次年度への継続課題については、この結果を次年度評価に反映 |

# ― 利用課題申請状況と配分 ―

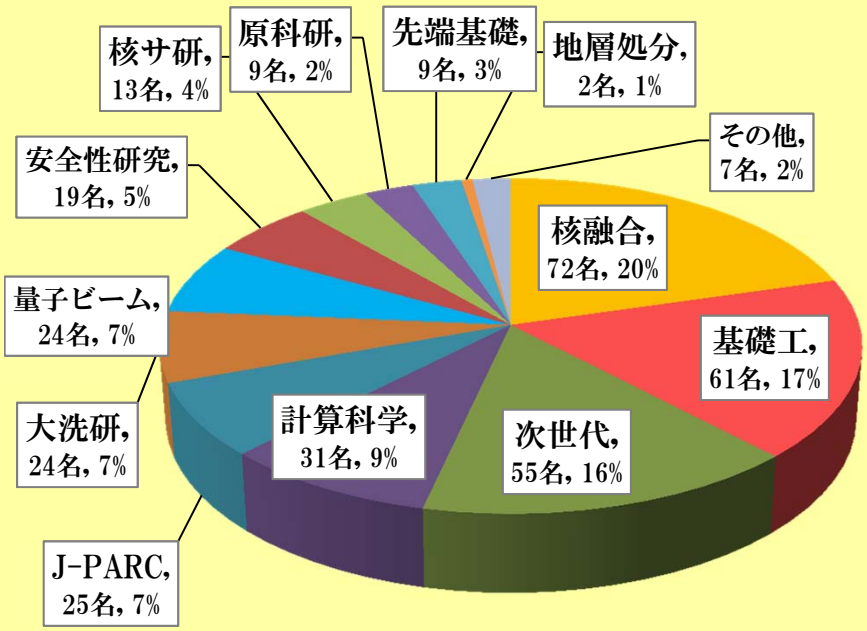
## 高い潜在計算需要

- 計算機能力の1.5倍を超える課題申請
- 新システムの演算性能は、旧システムの約14倍と飛躍的に向上したが、各ユーザの計算規模も大幅に拡大（H22年度）



# －原子力機構における計算科学をリードする研究部門－

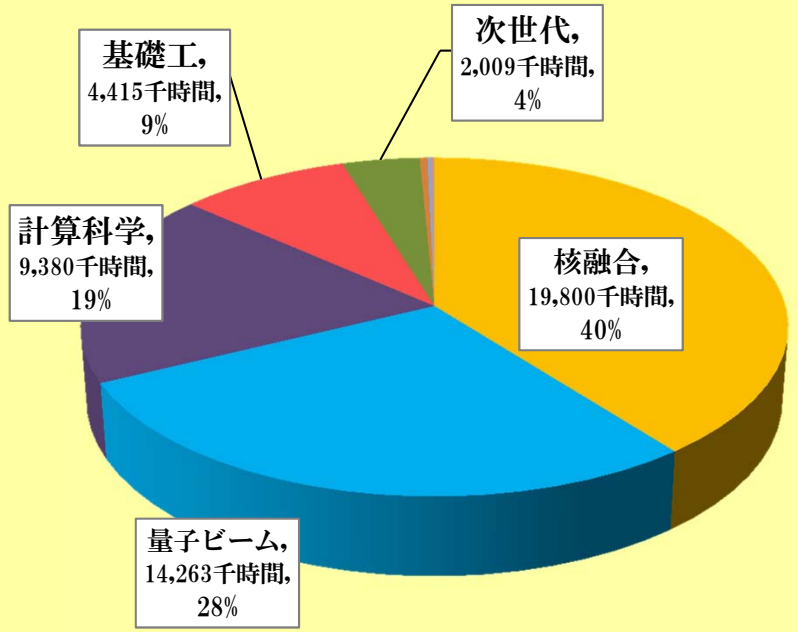
## 部門別計算機登録者数




**総計:351名**

核サ研:プルトニウム燃料技術開発センター、サイクル工学試験部等
大洗研:照射試験炉センター、高温工学試験研究炉部等
原科研:安全試験施設管理部、研究炉加速器管理部等
計算科学:システム運転及び利用支援従事者を除く

## 部門別利用コア時間




**2010.8.31 現在**

# Ⅲ. 新スーパーコンピュータの性能

1 原子力プログラムの特徴

2 新スーパーコンピュータの基本性能 ※Web掲載資料からは削除

# 1 原子力プログラムの特徴

| コード | 対象 | 手法 | 並列化 | 特徴 |
|---|---|---|---|---|
| GT5D | プラズマ乱流 | 差分法<br>有限要素法<br>FFT | Hybrid | 高演算効率<br>（メモリアクセスがボトルネック） |
| NOPIC | レーザー伝播 | 差分法 | FlatMPI | 1対1通信（exchange） |
| exact-diag | 固体中の電子 | 固有値問題<br>（CG） | Hybrid | 集団通信（scatter） |
| TPFIT | 圧縮性流体 | 行列解法<br>（ILUCGS） | FlatMPI | 低キャッシュヒット率<br>（メモリアクセスがボトルネック） |
| AQUA | 非圧縮性流体 | 差分法<br>（ICCG） | OpenMP | （共有メモリ型） |

**演算性能、メモリバンド幅及び通信バンド幅のバランスのとれた計算機が必要**

# Ⅳ. 京の利用に向けたプログラム開発

1. GT5Dコード
2. ハイブリッド並列化
3. FX1を用いた性能予測
4. 1PFLOPSまでのスケーラビリティ

# 1 GT5D: 核融合プラズマ乱流シミュレーションコード*

計算コード名：GT5D

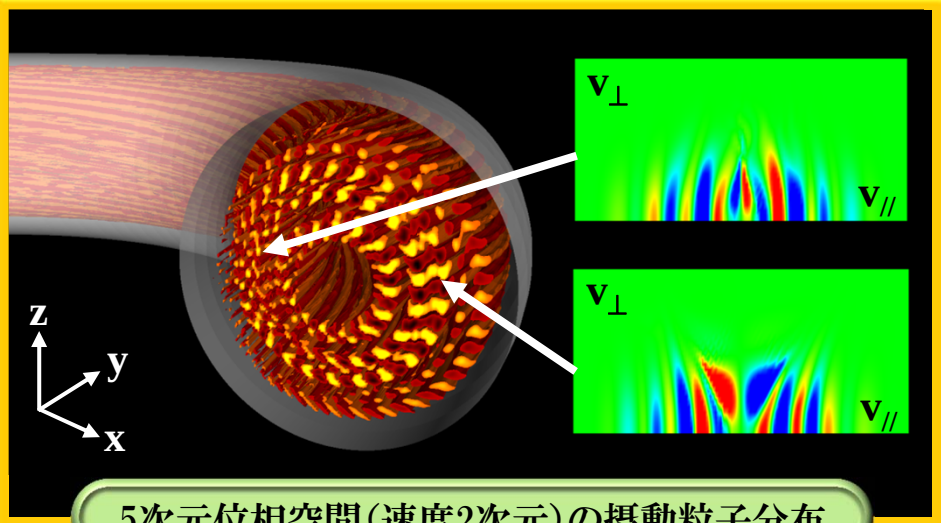
* Idomura et al.,Comput. Phys. Commun.(2008)

## 概　要

核融合プラズマ乱流の第一原理モデルである5次元ジャイロ運動論モデルの直接数値シミュレーションを行い、核融合炉心性能を評価する。

## アルゴリズム

- 5次元位相空間の移流・拡散
  - → 無散逸・保存型差分スキーム
- 時間積分
  - → 半陰的ルンゲ・クッタ法
- ハイブリッド並列
  - → MPI×(自動並列化+OpenMP)




5次元位相空間(速度2次元)の摂動粒子分布

## 今後の計画

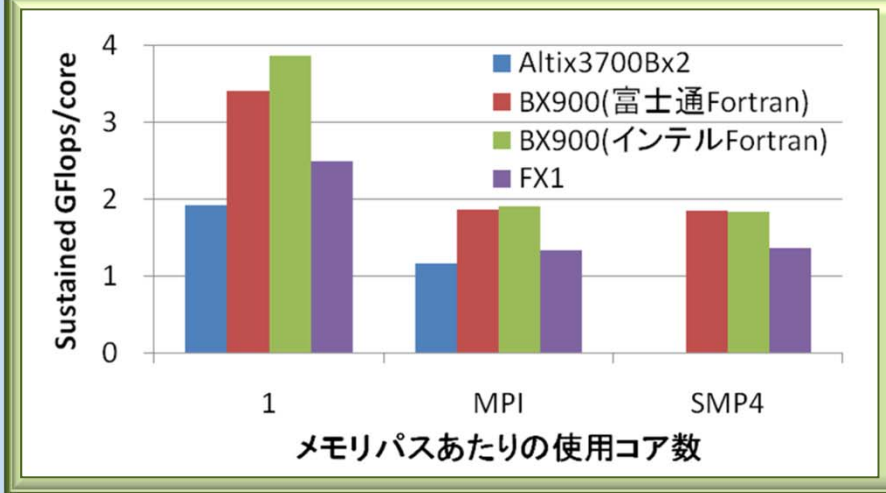
- 臨界プラズマ試験装置JT-60U等の実験データに対する実証解析を実施し、炉心性能評価の確度を向上。 → 1ペタフロップス計算　(問題サイズ：240×240×256×128×32)
- 国際熱核融合実験炉ITERの炉心性能の予測や新たな運転手法の開発に活用。
- 核融合原型炉の開発において、実機試験が困難な核融合炉心の設計支援に活用。

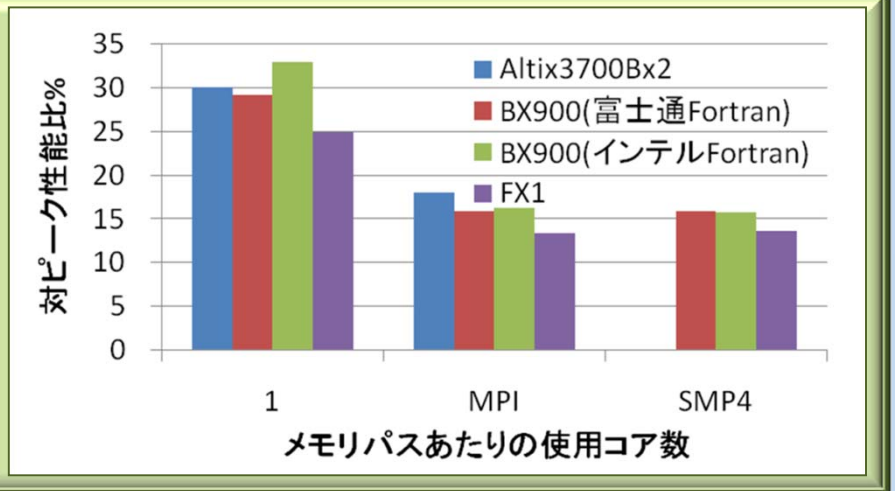
# －GT5Dコードの差分演算カーネルの演算性能比較－

## コア演算性能とメモリバンド幅のGT5Dカーネル処理性能への影響

| 4次元移流項の4次精度森西差分カーネル、配列サイズ：48x80x64x100=200MB | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| ・ | Altix3700Bx2 | Itanium2 | (6.4GF/core,L3=6MB,B/F=0.5) | 1 or 2 コア使用 | as is版 |
| ・ | BX900 | Nehalem-EP | (11.72GF/core,L3=8MB,B/F=0.5) | 1 or 8 コア使用 | as is版 |
| ・ | FX1 | SPARC64VII | (10GF/core,L2=6MB,B/F=1) | 1 or 4 コア使用 | FX1用最適化版 |

インテルFortran：-O3 (-openmp), 完全OpenMP化
富士通Fortran：-Kfast -Kocl -x200 [-Kmfunc=2, -Kprefetch_cache_level=1] (-Kparallel,OMP), 自動並列化+OpenMP化、　　[ ]:FX1用オプション、():SMPオプション
※MPIは通信なしのembarrassingly parallelでノード（メモリパス）を埋めた計算




- ノードあたり1コアではItanium2,Nehalem-EPが30%程度の実効性能
- ノードが埋まった状態では15%程度まで実行性能が低下

# －GT5Dコードの差分演算カーネルの演算性能比較－

## GT5Dによるハイブリッド処理性能ベンチマーク

**問題サイズ：240x240x32x128x32**

BX900:Nehalem-EP(11.72GF/core,L3=8MB,B/F=0.5),4096コア使用

インテルFortran：-O3, フラットMPI(コード全体の完全OpenMP化は未対応)

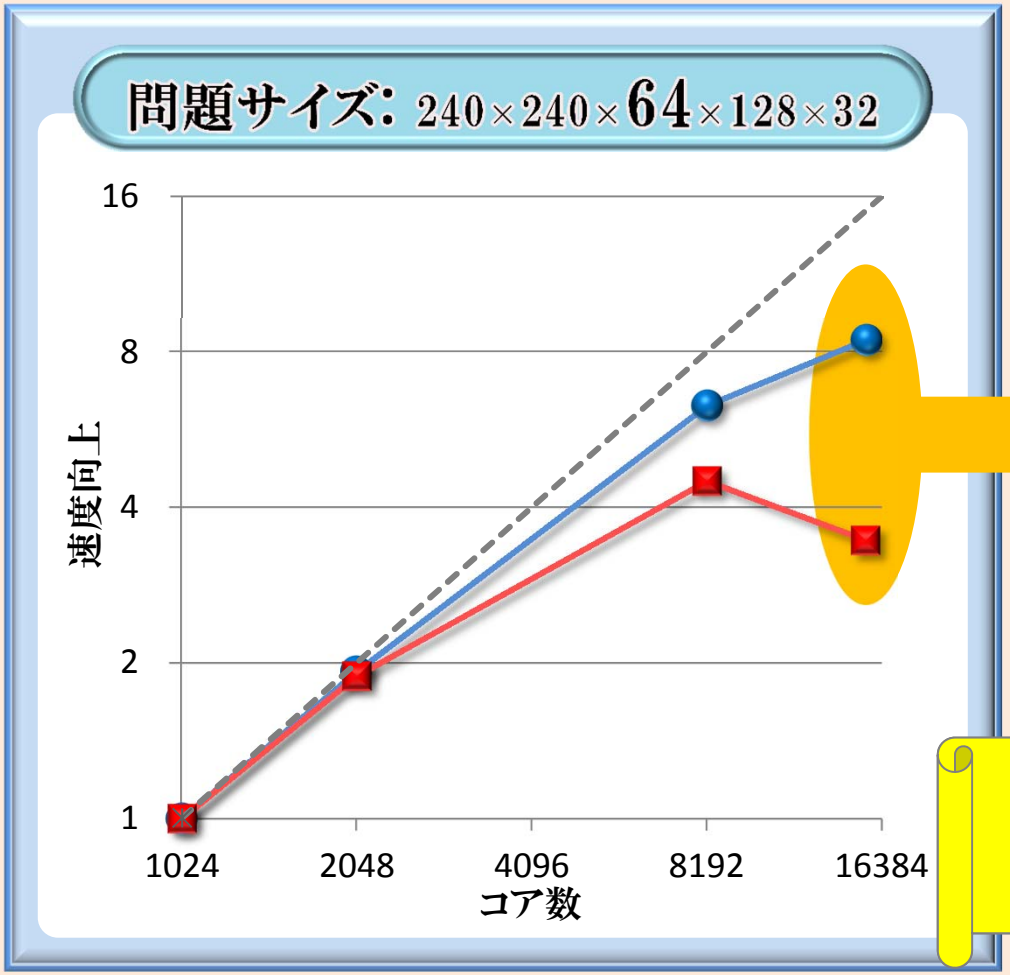
富士通Fortran：-Kfast -Kocl -x200 -Kparallel,OMP, ハイブリッド並列(MPI,自動並列化,OpenMP)

| | BX900 Intel-SMP1 | BX900 Fujitsu-SMP1 | BX900 Fujitsu-SMP4 | BX900 Fujitsu-SMP8 |
|---|---|---|---|---|
| 全体/step (msec) | 10231.35 | 10397.27 | 9286.57 | 10928.65 |
| 通信/step (msec) | 2414.72 | 2608.57 | 1516.63 | 1533.82 |
| メモリ使用量(GB) | 3641.14 | 3754.09 | 1545.49 | 1249.91 |
| 実効性能(Gflops) | 4979.06 | 4899.60 | 5485.61 | 4661.37 |

- ハイブリッド並列によるメモリコストの大幅な削減が可能
  - ベンチマークケースでは領域分割袖領域やフィールドソルバ演算子レプリカの削減によって8SMPで約1/3までメモリ使用量を削減
- MPI通信コストの減少による全体処理性能の高速化
- BX900では4SMPで最大性能が期待できる
- 富士通Fortranの自動並列化はかなりの部分で有効

# ― Hybrid 並列 ―

- スレッド並列によるメモリ使用量の大幅な削減
- MPIプロセス間通信量の減少による全体処理性能の高速化

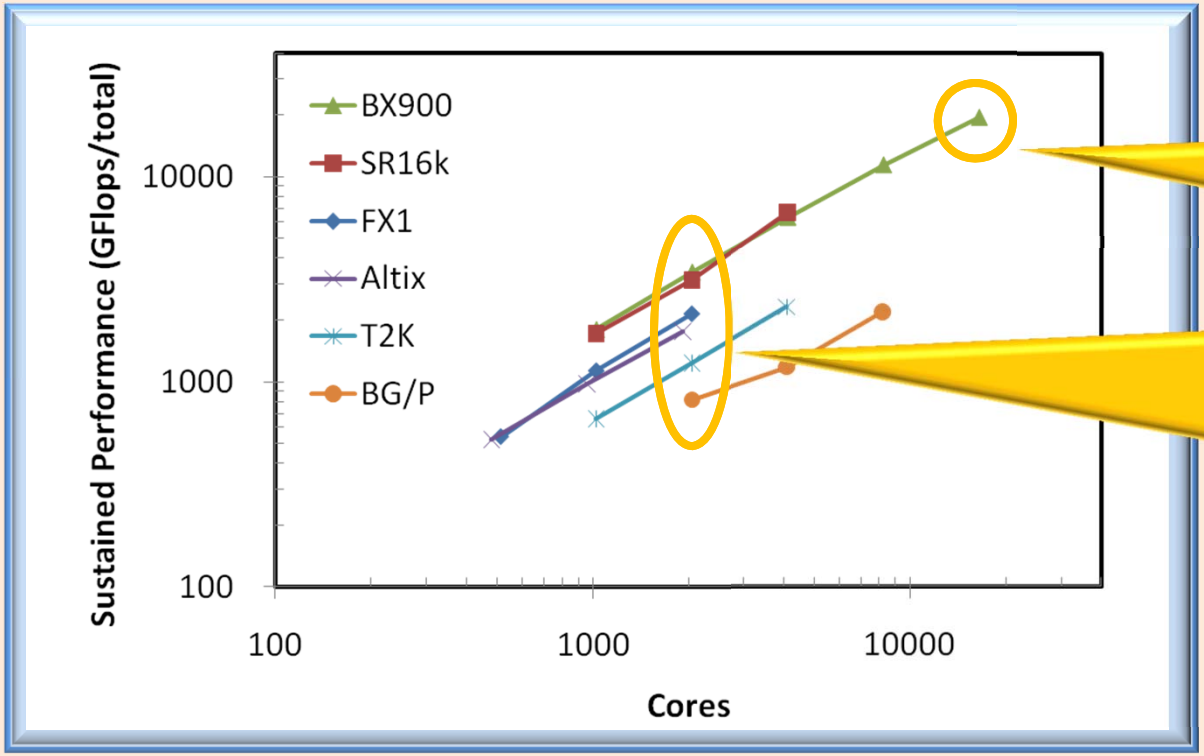



BX900における計算コスト

| | FlatMPI (15360) | Hybrid (3840×4) |
|---|---|---|
| 経過時間 /10step (秒) | 188.3 | 75.0 |
| 内、通信時間 (秒) | 145.0 | 34.7 |
| メモリ使用量 (TB) | 15.0 | 4.7 |

富士通Fortranの自動並列化は
かなりの部分で有効

# －GT5Dコードの並列処理性能のstrongスケーリング－




**BX900/16384コア**

実効性能~19.4TF (10.1%)

**2000コアの性能比較**

BX900: ~3.42TF (14.2%)
SR16k: ~3.12TF (8.1%)
FX1 : ~2.14TF (10.5%)
Altix: ~1.75TF (14.3%)
T2K : ~1.23TF (6.6%)
BG/P : ~0.81TF (11.7%)

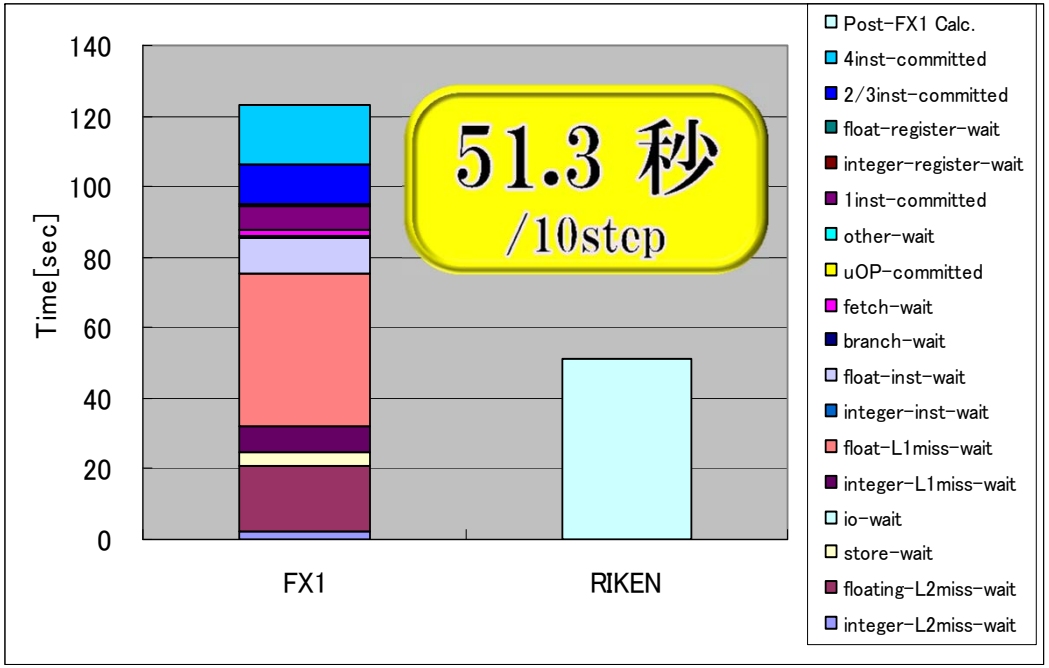
**格子数：240x240x64x100x32(Altix,T2K), 240x240x64x128x32(BX900,FX1,SR16k,BG/P)**

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| • | BX900 | Nehalem-EP (11.72GF/core,L3-8MB) | InfinibandQDR (8GB/s) | ハイブリッド並列4SMP |
| • | SR16000 | POWER6 (18.8GF/core,L3-32MB) | InfinibandDDR (32GB/s) | ハイブリッド並列4SMP(SMT) |
| • | FX1 | SPARC64VII (10GF/core,L2-6MB) | InfinibandD (2GB/s) | ハイブリッド並列版4SMP |
| • | Altix3700Bx2 | Itanium2 (6.4GF/core,L3-6MB) | NUMAlink (3.2GB/s) | フラットMPI |
| • | T2K(HA8000) | Opteron (9.2GF/core,L3-2MB) | Myrinet-10G (5GB/s) | ハイブリッド並列4SMP |
| • | BlueGene/P | PowerPC450 (3.4GF/core,L3-8MB) | BG/P Network (5.1GB/s) | フラットMPI |

# 3 性能予測－FX1から京へ：4096並列（500TFlops）の場合－

## 演算時間の推定

- 問題を1プロセスあたりの規模を保ったまま、4096プロセス並列から256プロセス並列にスケールダウン（weak scaling）
- FX1の256CPU（1024コア）を用いてプロファイリング。
- 変換表を用いて演算時間を推定。




## 通信時間の推定

- 通信の種類，データ長，通信回数を調査。
- インターコネクトの仕様（トポロジーを仮定）を もとに机上計算により推定。

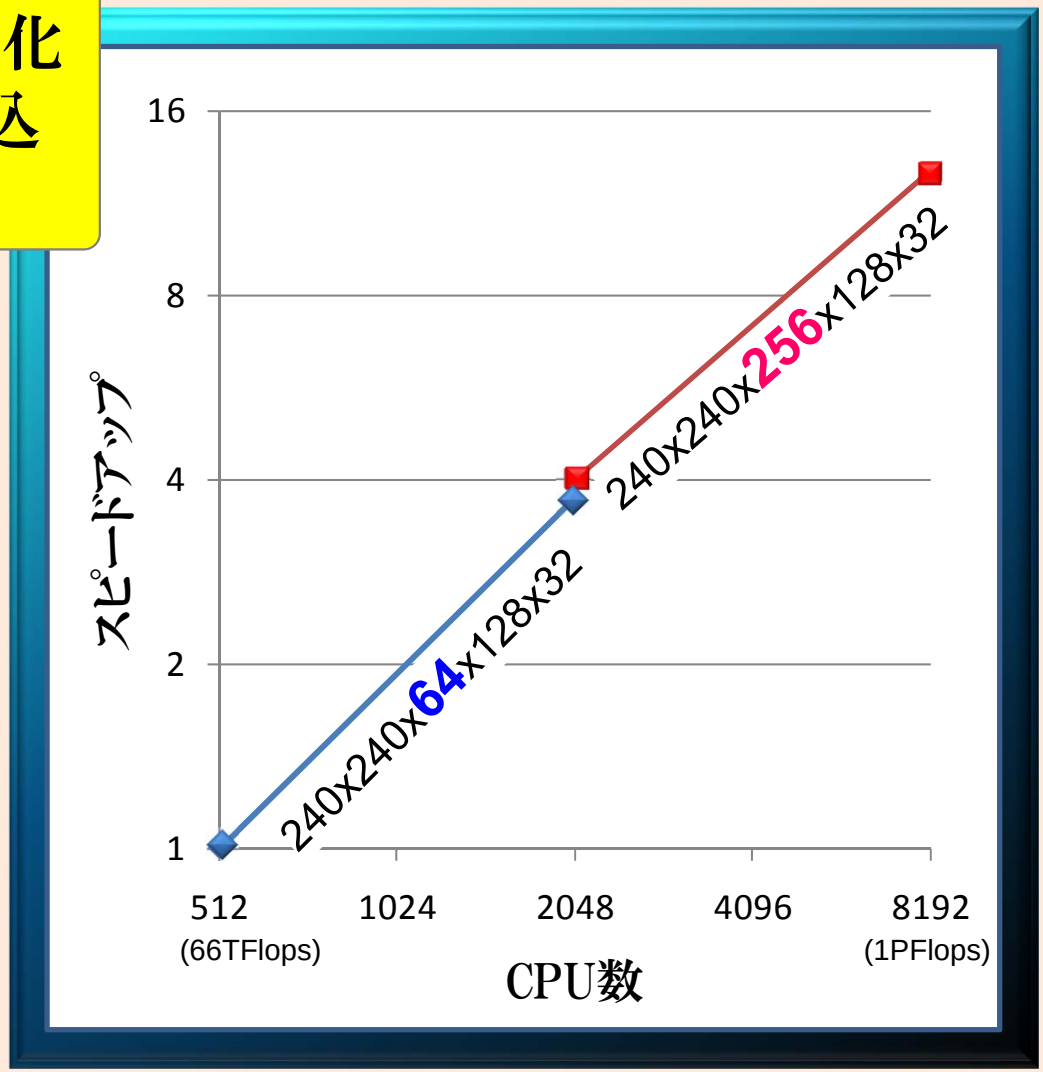
24.6 秒
/10step

**実行性能：26.9TFlops（5.1%）**

# 4 1PFLOPSまでのスケーラビリティ

1PFlopsにおいても良い並列化性能（スケーラビリティ）が見込まれる

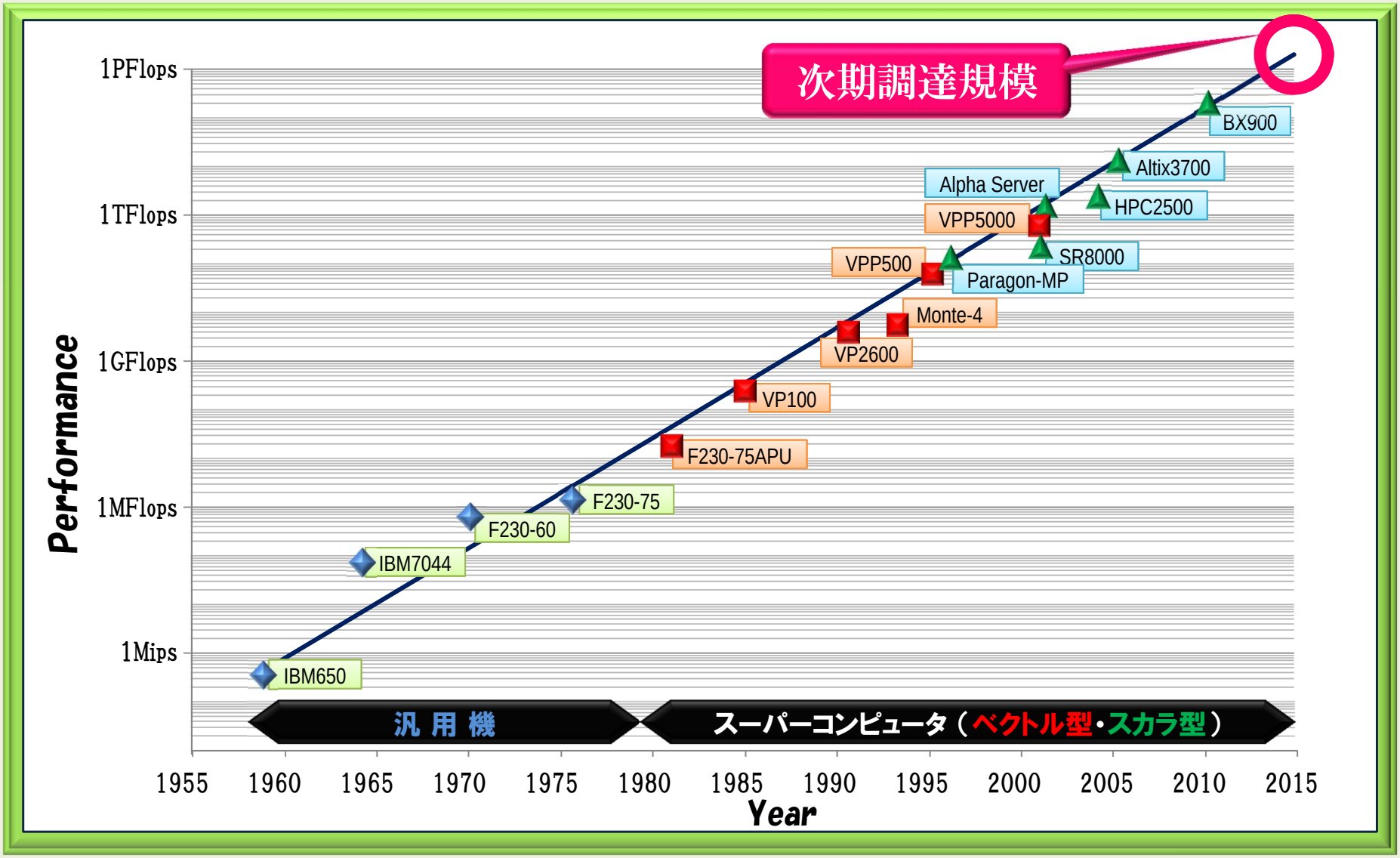
| 問題サイズ | CPU数 | 時間推定値（秒/10step） |
|---|---|---|
| 240×240×64×128×32 | 512 | 227.6 |
| | 2048 | 61.2 |
| 240×240×256×128×32 | | 225.9 |
| | 8192 | 71.0 |



# VI. まとめ

- 原子力研究開発を進める上で、計算科学技術の積極的活用は必須
- 原子力機構では、既に年間の論文数の20%以上が計算科学技術を用いた研究にシフト
- 計算機資源の不足は深刻であり、一研究所で準備できる資源量を超過
- 京コンピュータの積極的利用が不可欠
- FX1を用いた京コンピュータ用チューニングは極めて有効
- 原子力コードについて、1PFlopsまでの良好なスケーラビリティを確認

# — JAERI・JAEA 主要導入計算機 —

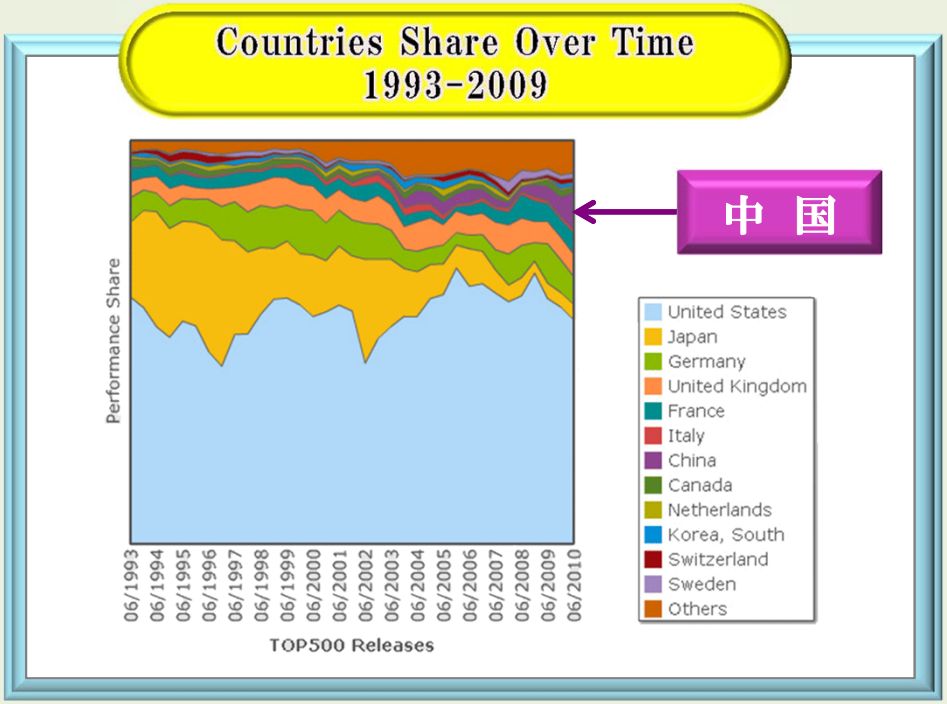


# －世界のスーパーコンピュータ整備動向（導入計画）－

| 国　内　（500Tflops以上） | | |
|---|---|---|
| 1) | 九州大学 | スーパーコンピュータ<br>システム |
| | 総演算性能：500Tflops | 稼働開始：2011年/5月以降 |
| 2) | 東京大学 | 大規模超並列<br>スーパーコンピューター<br>システム |
| | 総演算性能：1Pflops | 稼働開始：2011年/10月以降 |
| 3) | 東京工業大学 | クラウド型グリーン<br>スーパーコンピュータ |
| | 総演算性能：2.4Pflops | 稼働開始：2010年 |
| 4) | 理化学研究所 | 京 |
| | 総演算性能：10Pflops | 稼働開始：2012年/6 |

| 国　外 | | |
|---|---|---|
| 1） | イリノイ大 | BlueWaters |
| | 総演算性能：1～10Pflops | 稼働開始：2011年 |
| 2） | ローレンス・リバモア | Sequoia |
| | 総演算性能：20Pflops | 稼働開始：2012年 |
| 3） | NASA | Pleiade |
| | 総演算性能：10Pflops | 稼働開始：2012年 |
| 4） | ロスアラモス | Cielo |
| | 総演算性能：1Pflops | 稼働開始：2010年 |
| 5） | ロスアラモス | Roadrunner ? |
| | 総演算性能：20Pflops | 稼働開始：2012年 |
| 6） | EU | PRACE |
| | 総演算性能：？Pflops | 稼働開始：2010年 |
| 7） | EU | ITER-BA |
| | 総演算性能：1Pflops | 稼働開始：2012年 |
| 8） | 中国 | Nebulae |
| | 総演算性能：3Pflops ? | 稼働開始：2010年 |

# －世界のスーパーコンピュータ動向（Top500）－



| 2010.6 | 台数 | 割合 [%] | Rmax合計 [TFLOPS] | 割合 [%] | 世界ランク (国内1位) | Rmax* [TFLOPS] |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 米国 | 282 | 56.4 | 17,969.3 | 55.4 | 1 | 1,759 |
| 英国 | 38 | 7.6 | 1,785.4 | 5.5 | 16 | 275 |
| フランス | 27 | 5.4 | 1,706.9 | 5.3 | 18 | 238 |
| 中国 | 24 | 4.8 | 2,992.6 | 9.2 | 2 | 1,271 |
| ドイツ | 24 | 4.8 | 2,248.5 | 6.9 | 5 | 826 |
| ロシア | 11 | 2.2 | 814.7 | 2.5 | 13 | 350 |
| インド | 5 | 1.0 | 283.4 | 0.9 | 33 | 133 |
| 韓国 | 1 | 0.2 | 274.8 | 0.8 | 14 | 275 |
| 日本 | 18 | 3.6 | 1,252.7 | 3.9 | 22 | 191 |

※ Rmax：Linpack性能値

- ◆日本の計算機資源の割合は、原子力機構のスパコン導入により前回（2009.11）よりは僅かに回復したものの、欧米や中国に比べ急減している。
- ◆中国はもはや米国に次ぐスパコン大国に。日本との差は急拡大中。
- ◆日本の国内1位（原子力機構）の計算機は、ロシア、韓国の1位にも及ばない。

CCSE
Center for computational
science & e-systems