

ITBL を用いた原子力材料シミュレーション環境構築の取り組み

辻田祐一¹, 有馬 立身², 出光 一哉², 中島 憲宏³, 鈴木 喜雄³, 木村 英雄³

Development of a Computer Simulation Environment for Nuclear Material Engineering Using ITBL

Yuichi TSUJITA, Tatsumi ARIMA, Kazuya IDEMITSU, Norihiro NAKAJIMA, Yoshio SUZUKI and
Hideo KIMURA

Abstract

Effective use of nuclear fuel is an important issue in nuclear material engineering. Pu recycle is refocused for this solution. Although there are active research works about it, they are carried out in limited research institutes because of radiotoxicity of Pu. However, researching characteristics of it in detail is very important for future nuclear energy engineering. We proposed computer simulation technique to analyze it by using a molecular dynamics (MD) simulation method. Although we have done many works, we required huge amount of computational resources to obtain realistic results and realize parameter survey runs. For this purpose, we have executed our simulation program on a Grid computing environment provided by ITBL. Since scientists do not expect to encompass the expertise for the ITBL system, we have tried to build an application-specific computing environment on a client terminal by using an ITBL's Java client API. It realizes seamless access to ITBL's computational resources and parameter survey runs. Moreover, it enables to carry out computation and native applications on a user's client terminal such as a visualization software for our simulation program successively in a single operation.

Keywords: Grid computing, ITBL, client API, Java, nuclear material engineering

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り、実用化に向けた研究開発が進められている。しかし使用済み核燃料から抽出されるプルトニウムを含む核燃料（Pu 含有核燃料）は限られた研究機関でしか扱うことができないため、これ以外の研究機関や大学では実験的に研究することができない。そこ

で Pu 含有核燃料の材料としての特性を調査するための一つの手法として分子動力学法を用いた計算機シミュレーションが行われてきた[1]。この計算機シミュレーションにおいて、分子あるいは原子レベルでの振る舞いを調べることで、Pu 含有核燃料の特性などが予測できると考えている。我々は大規模な計算機資源を利用する為に、グリッドコンピューティング環境を用

1 近畿大学工学部電子情報工学科

2 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

3 日本原子力研究開発機構
システム計算科学センター

Department of Electronic Engineering and Computer Science,
School of Engineering, Kinki University
Institute of Environmental Systems,
Faculty of Engineering, Kyushu University
Center for Computational Science and e-Systems,
Japan Atomic Energy Research Agency

いた計算機シミュレーションに着目し、グリッドコンピューティングプロジェクトの一つである ITBL プロジェクト[2]が提供するグリッドコンピューティング環境を用いて計算機シミュレーション環境の構築を行った。本研究では、利用者の端末からセキュリティー上安全な通信基盤を用い ITBL システムの計算機環境へアクセスし、MPI による並列プログラムを実行している。

ITBL システムでは、参加する各研究機関の計算機資源を Super SINET[3]で接続し、セキュリティー上安全な通信基盤により計算機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、あらかじめ発行してある利用者証明書をを用い、利用者端末の WEB ブラウザから登録された ITBL 拠点サイトのポータルサイトにアクセスする。この仕組みにより、システムに安全にログインすることができる。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、個々の計算機資源がどこにあるのかを意識することなく透過的に利用できる。

ポータルサイトには様々なツール群が用意されているが、一般的な利用のために構築された環境であるため、ユーザの計算プログラムに特化した機能の利用や、利用者端末上で実行するネイティブなアプリケーションとの連動を実現する目的で、ユーザの計算機端末上で動くクライアントアプリケーションを構築するためのクライアント API も提供している。この API セットでは、Linux では Java と C、Windows では Java と C++が利用できる。この API を利用することにより、ユーザの目的に特化したクライアントアプリケーションの作成が可能である。我々は Java の API を用い、ポータルサイトにアクセスすることなく、ITBL システムでの並列計算機でのジョブ実行と利用者端末上で動くネイティブなアプリケーションと連動する利用環境を構築した。

本稿では、これまでの取り組みや現状を報告する。

2. 材料シミュレーション

材料の性質を原子・分子レベルで計算機シミュレーションにより解析する手法である分子動力学法 (MD 法) は、様々な方面で利用されている計算手法である。MD 法では、材料を構成する原子個々に対し、ポテンシャルモデルを用いて位置・速度・エネルギーなどの物理量の計算をあらかじめ定めたタイムステップごとに計算を行う。より現実的な環境に近づけるためには、原子数を増やす必要があるが、その数を増やすにつれて、必要な計算機資源 (CPU パワーやメモリ資源など) の規模も大きくなる。よって 1 台の計算機では限界が

あり、複数の計算ノードに処理を分割し、並列処理により扱う原子数を増やすことが行われてきている。

原子力発電所で発生する核燃料廃棄物が含む Pu は、MOX 燃料あるいは Zr を含むイナートマトリックス燃料として再利用されるが、それらを安全に利用するためには、材料としての性質を詳しく調査する必要がある。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。しかし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できない。そのため我々は、その特性を計算機シミュレーションにより解析する手法を選択し、MD 法を用い Pu 含有核燃料の材料としての性質の調査研究を行っている。

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[4]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[5]により並列化を行ったものである。プログラムの実行は、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ータをファイルから読み出し、タイムステップ毎に計算結果をファイルに出力する。また、本研究では ITBL 計算環境を用いるため、MPI ライブラリとして、異機種計算機間の MPI 通信をサポートする Stampi[6]を用いている。そこで我々は 4 で述べるように、これらのパラメータ設定に関して、直接ファイルをエディタで書き直すのではなく、クライアントアプリケーションにより自由に設定変更が出来るようにし、さらに計算結果を利用者端末で動くネイティブなアプリケーションで可視化できるようにした。

3. ITBL システム

ITBL システムの基盤ソフト (ITBL 基盤ソフト) により、参加研究機関の並列計算機群が透過的に利用可能になっている。ITBL システムではサイトという運用上独立と見なせる管理単位毎に ITBL サーバ群を設置し、サイト間の安全なデータ通信と透過的な計算機環境を提供している。その概念を図 1 に示す。ITBL サーバ群は、セキュリティー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実行計算機群に与えない構成になっている。各サイト内の実行計算機となる並列計算機には、ITBL 基盤ソフト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になっている。

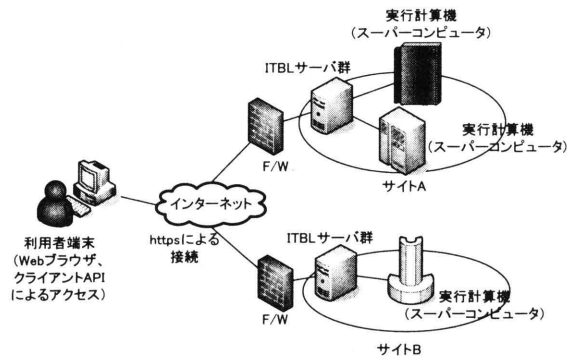


図1. ITBL システムの概念

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 システム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、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 ブラウザにインストールした後、登録サイトのポータルサイトにアクセスすることで、登録サイトに加え、他のサイトにある実行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は https による接続が行われる。ITBL 基盤ソフトの通信基盤は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。サイト内の認証は、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、サイト間の認証はそれぞれのサイトのフロントサーバ間で認証を行うが、これらの処理はユーザからは見えないソフトウェア仕様になっている。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 システムは上で述べたように、Web ブラウザを用いたアクセス・利用が基本となり、ログイン後に現れるポータルサイト画面では、一般的な利用を想定したユーザインタフェースやツール群を用意している。これらは個々のユーザの計算アプリケーションに特化した利用環境ではないため、例えば計算アプリケーションの計算結果を利用者端末で動くネイティブな可視化アプリケーションと連動して動作させることなどは出来ない。そこで ITBL システムではこのようなクライアントアプリケーション開発用の API を用意している。この API では、Linux では C および Java が、Windows では C++ (Visual C++を利用) および Java が利用可能である。これらの API は下層レイヤの通信基盤として ITBL のポータルサイト利用時と同じ通信基盤を用いており、同様に X.509 証明書による安全なアクセスが可能である。API には、ITBL ポータルサイトへのアクセス機能や利用可能な計算機でのファイル参照機能など

を提供するインタフェースが用意されており、容易にアプリケーション開発が可能である。

4. ITBL システムを用いた原子力材料シミュレーション環境の構築

ITBL システムを用いた MD 法による原子力材料シミュレーションを支援する計算機利用環境構築において、拠点サイトを日本原子力研究開発機構の東京サイトとし、同研究機構の東海サイトの SGI Altix3700Bx2 と東京サイトの IBM p-Series 690並びに NEX SX-6を用い、計算機シミュレーション環境の構築を行った。なお、本報告書では、東海サイトの SGI Altix3700Bx2 を用いた数値計算シミュレーション環境構築と結果について報告する。

本研究では、Java の API を用い、Java アプリケーションとして計算環境を構築した。利用者端末のターミナル (Linux の場合) あるいはコマンド・プロンプト (Windows の場合) で Java アプリケーションとして起動されることにより、図2に示すような初期画面が現れる。

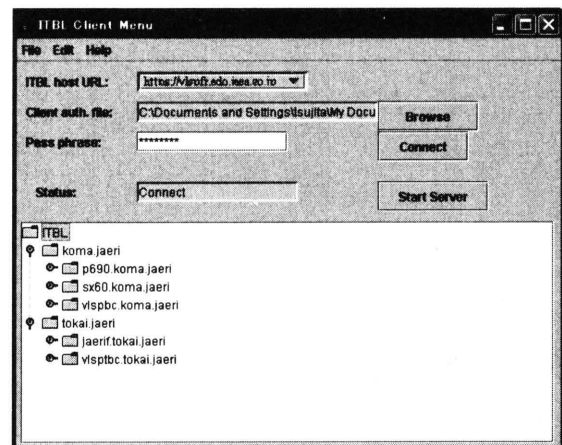


図2. GUI アプリケーションの初期画面

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が読み込まれる。ここで利用者証明書に設定してあるパスフレーズを画面上で入力することで利用者証明書による認証によって拠点サイトにアクセスできる。利用者端末上のクライアントアプリケーションと拠点サイトの間は https により接続される。アクセスが成功すると、利用可能なサイト一覧の下に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” ボタンを押すことにより、実行計算機画面を起動する。この画面の例を図3に示す。

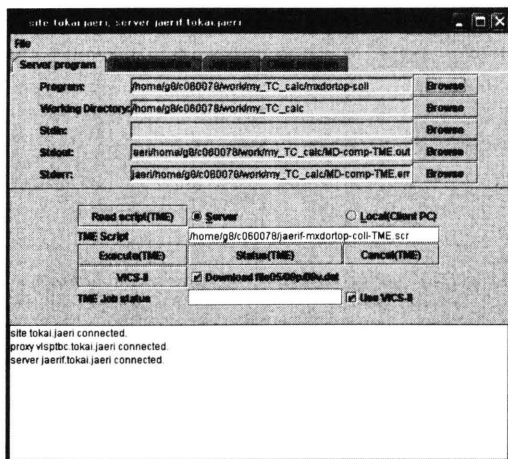


図 3. 実行計算機用画面の例

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される為、クライアント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ることが可能である。

この画面には、タブメニュー画面が4つ用意されている。まず図3に示してある一番左側にあるメニュー画面では、実行プログラム・作業ディレクトリ・標準入力/出力/エラー出力の選択ができる。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4に示すファイル選択画面が起動され、ここからファイルあるいはディレクトリが選択できる。

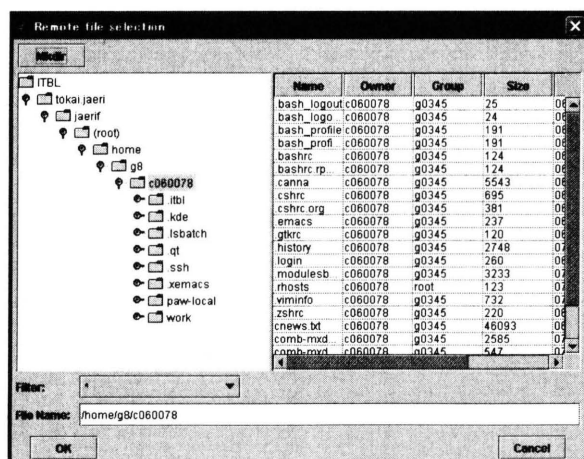


図 4. ファイル選択画面

この画面の左側には選択している実行計算機のディレクトリがツリー表示され、選択されているディレクトリ配下のファイルが右側に表示される。

図3と同じ画面で、"Run parameters"タブを選択すると、図5に示すようなプログラムに設定するパラメータ選択やプログラム実行方法の選択などができる画面に切り替わる。

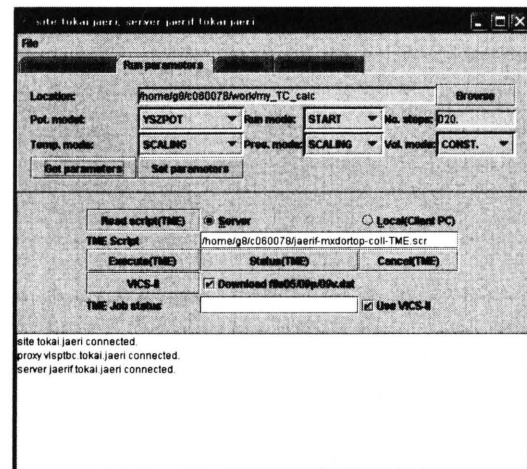


図 5. 実行計算機用画面（プログラム実行用パラメータ設定画面）

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、実行ステップ数や圧力・体積・温度の制御方法など（それぞれ図中の"Pot. Model", "No. steps", "Temp. mode", "Pres. Mode", "Vol. mode"）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設定ファイルに反映される。さらに"Job type"のタブメニューを選択すると、図6に示す画面に切り替わり、キュークラス・利用CPU数・インタラクティブ実行又はバッチ処理などの選択など、プログラム実行に関わるパラメータ設定ができる。

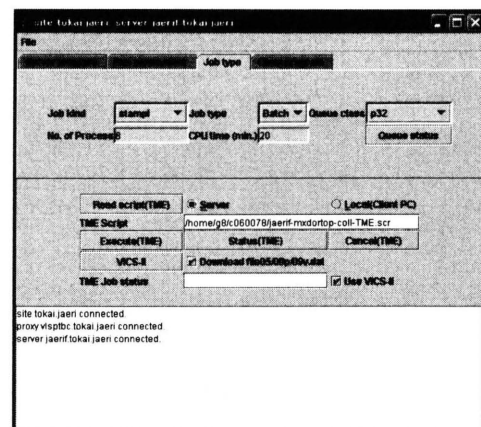


図 6. 実行計算機用画面（プログラム実行方法選択画面）

バッチ処理においては、この画面の"Queue status"ボタンを押すことで、各キュークラスの稼働状況が表示される。

4つ目のタブメニューとして、クライアント端末上で動作させるプログラムの起動を支援するメニューがある。その画面の例を図7に示す。

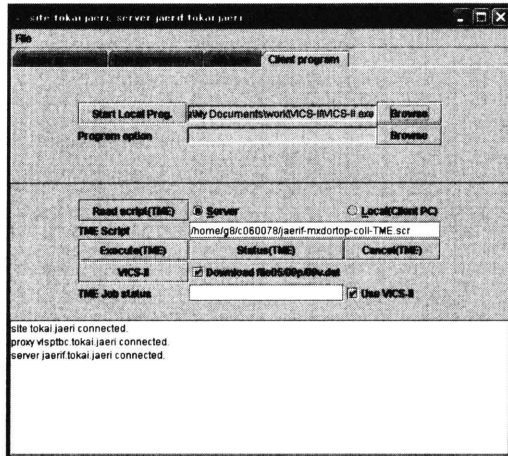


図 7. クライアント端末で動作するプログラム起動画面

この画面では、クライアント端末上のプログラムを選択することができ、必要であればコマンドラインで与えるオプションも設定も可能である。起動ボタンを押すことで、指定したプログラムが実行できる。

以上のパラメタ設定が完了した後に、この実行計算機画面の真ん中にあるボタン等により、ジョブの実行・状態の確認・キャンセルさらに可視化プログラムとの連携が行える。あるいは、この中にある”Read script(TME)”ボタンにより、ジョブ実行用スクリプトを読み出すことにより、個々に設定をしなくてもジョブ実行を行うことも可能である。このジョブ実行用スクリプトは、ITBL のポータル画面におけるジョブ実行支援ツールである TME のタスクフロー画面から生成することができるもので、これを自計算機あるいは実行計算機から読み込むことができる。以上のいずれかのジョブ実行設定が完了後、”Execute(TME)”ボタンを押すことで、設定したパラメタに基づいてターゲットの実行計算機でジョブが実行される。ジョブ実行の状態は、定期的な監視あるいは”Status(TME)”ボタンにより、この実行画面のテキストフィールドに表示される。また”Cancel(TME)”ボタンによりジョブのキャンセルが可能となっている。また、”Download file05/09p/09v.dat”チェックボックスは、ポスト処理としてこれらのファイルを用いた計算結果の映像生成のためにファイルのダウンロードを支援する機能である。これを ON にしておくと、ジョブ終了時にファイルのダウンロード確認画面が現れ、指定した場所にファイルをダウンロード可能である。さらに計算結果の可視化に関して、利用者端末上の可視化プログラムと

の連動操作の有無をチェックボックス (Use VICS-II) により選択できるようになっている。現時点では、VICS-II[7]という Windows および Linux で稼働する可視化アプリケーションを利用している。ジョブが無事終了すると、クライアント GUI アプリケーションにおいてこのアプリケーションの利用オプションが選択されていれば、実行計算機からこの可視化アプリケーションに計算結果の出力ファイルが渡され、可視化アプリケーションが立ち上がり計算結果の可視化が行われる。あるいはこの画面上の”VICS-II”ボタンを押すことによって、計算プログラムとは独立に動かすことも可能である。可視化を行った例を図8に示す。

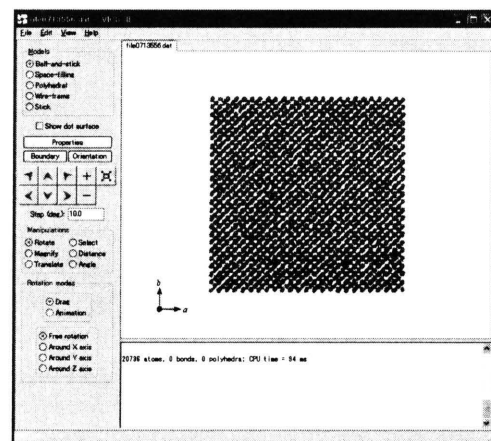


図 8. クライアントアプリケーションと連動した VICS-II による可視化の例

この画面では、 PuO_2 約 20,000 原子を 20 ステップ (40 fs) に相当 : 実際に計算機シミュレーションを行う場合は、目的により数万から数十万ステップの計算を行っている。) 実行した時の原子配置を VICS-II で可視化したものである。この画面上で VICS-II の機能により様々な可視化操作が行える。

5. 関連研究

ネットワーク上に散在する計算資源を繋いで大規模な仮想計算機環境を実現するグリッドコンピューティングに関するプロジェクトが国内外で盛んに行われている。グリッドコンピューティングにおける代表的な通信基盤として Globus[8]や UNICORE[9]が挙げられる。現在、グリッド通信基盤を含め、グリッドコンピューティング環境の標準仕様策定が精力的に行われている[10]。

CoG Kit[11]は Globus を用いたグリッド環境において、ポータル構築やクライアント端末でのアプリケーション作成を支援するツール群である。容易にグリッド利用環境をユーザに提供する機能を有しているが、

インストール作業において、グリッドの利用経験が無いと設定が難しい面がある。一方 ITBL システムのクライアント API はユーザアプリケーション作成のためのライブラリ群であり、インストール作業を必要としない。よってグリッド環境の利用経験が無くても容易に利用でき、計算プログラムのための実行環境構築に専念することができる利点がある。

6. まとめ

我々は、ITBL システムが提供するクライアント API を用いて原子力材料シミュレーションのための計算機環境の構築を行った。ITBL システムが提供する並列計算機資源は透過的な計算環境を用い利用可能であるが、計算アプリケーションに特化した機能や、可視化などに用いるクライアント端末におけるネイティブなアプリケーションソフトウェアとの連携を行うべく、ITBL システムが提供するクライアント API を用い、ITBL システム利用による大規模並列計算環境支援を行うクライアントアプリケーションを構築した。このアプリケーションにより並列計算に必要な計算パラメタをタブメニューなどにより入力することが出来る。またジョブ実行に必要な諸パラメタの入力も同様にタブメニュー等からの入力が可能となった。ジョブ実行においては、個々のジョブ実行が独立に実行されるように、ジョブ実行支援ツールはスレッド処理により、ジョブ実行中にも他の処理が利用可能となるようにした。

さらに ITBL システムにある並列計算機で出力された計算結果をクライアント端末で利用できるネイティブな可視化アプリケーションとの連携が可能になった。本研究では、この可視化ソフトウェアとして VICS-II を用い、計算の終了とともに、クライアント API の基盤ソフトウェアにより安全な通信経路を通して出力結果がクライアント端末に送られ、VICS-II で可視化結果が出ることを確認した。

現状では、計算結果として原子配置の表示のみ可視化ソフトウェアと連携するようにしたが、本計算機シミュレーションで重要な計算結果である材料の温度・熱伝導度等について計算結果を可視化により確認することが必要と考えている。このためのプログラムと MXDORTOP との連成シミュレーションの実現などを今後検討してゆきたい。

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 システム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に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、また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., Yamasaki, S., Yamahira, K., Idemitsu, K. and Inagaki, Y., and Degueldre, C.: 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) Super SINET, http://www.sinet.ad.jp/s_sinet/index.html
- 4) 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>
- 5) Message Passing Interface Forum, <http://www.mpi-forum.org/>
- 6) Imamura, T., Tsujita, Y., Koide, H., and Takemiya, H.: An Architecture of Stampi: MPI Library on a Cluster of Parallel Computers, *LNCS*, Vol. 1908, pp. 200-207 (2000).
- 7) VICS-II, http://www.geocities.jp/kmo_mma/crystal/jp/vics.html
- 8) Foster, I., Kesselman, C., and Tuecke, S.: The Anatomy of the Grid: Enabling Scalable Virtual Organizations, *The International Journal of High Performance Computing Applications*, Vol. 15, No. 3, pp. 200-222 (2001)
- 9) Erwin, D. W.: UNICORE - a Grid computing environment, *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, Vol. 14, No. 13-15, pp. 1395-1410 (2002)
- 10) Open Grid Forum, <http://www.gridforum.org/>
- 11) von Laszewski, G., Gawor, J., Lane, P., Rehn, N., and Russel, M.: Features of the Java commodity grid kit, *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, 14 (13-15): pp. 1045-1055 (2002)