

Windows 版 PHITS の MPI 並列環境構築方法の確立

岡本力, 杉田武志, 関優哉

株式会社ナイス

概要

粒子・重イオン輸送計算コード PHITS は、モンテカルロ計算コードであるため、その計算には多大な CPU 時間を要する場合がある。従来の PHITS 配布パッケージには、Windows 版ロードモジュール (exe ファイル) としてシングルスレッド用とメモリ共有型 (OpenMP) 並列用のみ格納されており、メモリ分散型 (MPI) 並列計算を行うことができなかった。そこで本研究では、Windows PC を用いた MPI 版のロードモジュールの作成方法及び PC クラスタの構築方法を調査し、その手順書を作成した^[1]。本成果により Windows 版の MPI 並列計算用ロードモジュールを含んだパッケージの配布がバージョン 3.06 より開始された。

構築方法の手順

MPI プロトコルとして米国アルゴンヌ国立研究所が配布しているフリーソフト MPICH2 を利用する。手順書には①Windows PC への MPI プロトコルインストール方法 ②MPI をインストールした複数の Windows を内部ネットワークで接続する方法 ③Windows で PHITS を MPI 用にコンパイルする方法の 3 項目を網羅している。

検証計算

PHITS 例題ファイルの中性子遮蔽計算(Shielding)、核反応計算(NuclearReaction)と粒子治療計算(ParticleTherapy)を用いて構築した PC クラスタによる計算速度の検証を行った。

検証に用いた PC のスペックを表 1 に、結果を表 2 に示す。また MPI による計算時間の短縮比を図 1 に示す。OMP では PC 1 台分しかスレッドを確保できず速度に限度が生じるが、MPI は PC クラスタを構築することで計算時間をより短縮できる可能性を示せた。

表 1. PC のスペック

マシン名	CPU	コア(スレッド)	メモリ
master	Core i7-7700K 4.2GHz	4(8)	32GB
node	Core i7-6700K 4.0GHz	4(8)	16GB

表 2. 検証計算結果

	MPI(8+8スレッド)	OMP(8スレッド)	Single(1スレッド)
中性子遮蔽(80万ヒストリ)	273	608	2399
核反応(1億ヒストリ)	220	597	2178
粒子治療(10万ヒストリ)	290	661	2741

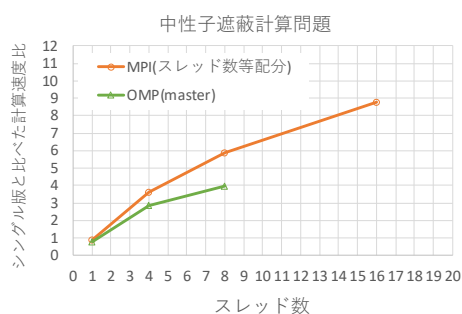


図 1. シングル版と比べた計算速度比

[1] H29 JAEA 役務契約「Windows 版 PHITS の MPI 並列環境構築方法の確立及び手順書の作成」による成果