

## MPI通信を用いたEGS5の大規模並列計算化 ～EGS5-MPIの概要と運用方法の紹介～

清水森人

独立行政法人 産業技術総合研究所 計測標準研究部門 量子放射科

今年の秋より10PFLOPSの演算能力を持つ京コンピュータの運用が開始されるのをはじめとして、東京大学や京都大学の大型計算機が更新され、我が国ではPFLOPS級の大型計算機を保有する施設が増えつつある。大型計算機はノード数、コア数の増加、メモリの大容量化が進み、1万プロセスを超える並列計算が当たり前の時代を迎えようとしている。加えてコスト面も大幅に改善され、計算機利用料は非常に安価となり、無料あるいは1万円程度の負担で利用できる計算機施設もある。

EGSなどのモンテカルロ計算の高速化には共有メモリ型並列計算やGPUを利用した並列計算などの努力が行われてきた。しかし、上記のように計算機が比較的安価となり、多数のノードを利用した並列計算が主流となっている現在、シングルプロセス、シングルスレッドを前提として開発されてきた計算コードを並列化する手法として、MPIを用いた分散メモリ型並列計算の実装は最も安価かつ容易な手段の一つである。

そこで、本研究では分散メモリ型並列計算の通信規格であるMPI (Message Passing Interface) を用いて、EGS5を並列化する拡張パッケージEGS5-MPIを開発した。EGS5-MPIは並列モンテカルロ計算において重要な乱数管理やrank管理、同期処理などのサブルーチンをパッケージ化したものであり、ユーザーはこれを用いて、既存のEGS5プログラムを容易に並列化できる。

EGS5-MPIはOpenMPIやMPICH2で動作し、動作OSもCygwin, Linux, Mac OSXなどで動作を確認している。現在、最大動作プロセス数は1044プロセスであり、一般のマルチコアCPUを搭載した計算機から、大型計算機まで幅広く動作するため、デスクトップPCで開発したコードをそのまま大型計算機でコンパイル、実行できるという大きな利点を持っている。

当日はEGS5-MPIの概要と共に実際にEGS5のサンプルプログラムsamppcgの並列化手順を説明し、Mac OSX上でのデモンストレーションを行う。また、EGS5-MPIを用いた医療用リニアックからの高エネルギーX線の特性計算について紹介し、大型計算機における運用上のポイントなどを説明する。

EGS5-MPIホームページ

<http://www.nmij.jp/~quant-rad/xg/egs5mpi/index.html>