

# Consortium for Large Scale Simulations in the Atomic Energy Research Field ( Research Committee on Large Scale Numerical Simulations, Atomic Energy Society of Japan )

Consortium Representative

Hiroshi Okuda      The University of Tokyo

Authors

Hiroshi Okuda      The University of Tokyo

Naoki Inoue         Japan Atomic Energy Research Institute

## 1. Motivation and Objectives

In the history of neutron physics, the numerical experiment has played an important role for its advancements. Also, the computational technology has been an indispensable tool for solving various engineering problems in the nuclear industry, such as the reactor core design, thermal hydraulics, safety design, structural design, etc. It is said that “Design by Analysis” and/or “Computer-Aided R&D (CAR&D)” will be the crucial technology for the future developments in this field. With these view, in 2002, the Atomic Energy Society of Japan founded the Division of Computational Science and Technology, which aims for promoting the exchange of broad range of knowledge and experiences of the computational technologies in the atomic energy field. The Division of Computational Science and Technology triggered off the establishment of a research committee on “the Large Scale Simulation” in AESJ, which is also acting as a consortium for the simulation research using the Earth Simulator in the atomic energy field (Fig. 1). The activities of the consortium are to discuss the candidate research projects for using the Earth Simulator, exchange the software optimization experiences and mutually evaluate the research outputs, and so on.

In the beginning of 2003, nine research topics were selected by the consortium for applying for the collaboration projects with the Earth Simulator Center, and all of them were approved. 218,650 node-hours (4% of the whole node-hours available at the Earth Simulator) was given to the consortium. In 2004, as is listed in the next section, eight topics out of the previous nine ones and a new one (topic (9)) have been selected as the collaboration projects. 205,000 node-hours was given to the nine projects in all.

## 2. Subgroups

In FY2004, following nine subgroups have been approved

as the Collaboration Projects with the Earth Simulator Center. (Name in the bracket is the group representative.) See the report of each research subgroup for details.

- (1) Large-Scale Numerical Simulations on Complicated Thermal-Hdraulics in Nuclear Cores with Direct Analysis Methods  
(Kazuyuki Takase, JAERI)
- (2) First Principles Molecular Dynamics Simulation of Solution  
(Masaru Hirata, JAERI)
- (3) Research on Structure Formation of Plasmas Dominated by Multiple Hierarchical Dynamics  
(Yasuaki Kishimoto, Kyoto University)
- (4) A Simulation of the Interaction among the Pressure Wave Propagation of Liquid Mercury, the Wall Deformation and the Bubble Dynamics in the Mercury Target  
(Chuichi Arakawa, University of Tokyo / JAERI)
- (5) Numerical Studies for Novel Superconducting Properties and Neutron Detector Applications by Superconductor Nano-fabrication Techniques  
(Masahiko Machida, JAERI)
- (6) Electronic and Atomistic Simulations on the Irradiation Induced Property Changes and Fracture in Materials  
(Hideo Kaburaki, JAERI)
- (7) First-principles Molecular Dynamics Simulation of Oxide Layers for Radiation-Tolerant SiC Devices  
(Atsumi Miyashita, JAERI)
- (8) Large-Scale Simulation of Groundwater Flow and Radioactive Nuclide Transportation  
(Hiroshi Okuda, University of Tokyo)
- (9) Direct Numerical Simulation of Turbulent Flows in Subchannels of a Tight Lattice Bundle  
(Hisashi Ninokata, Tokyo Institute of Technology)

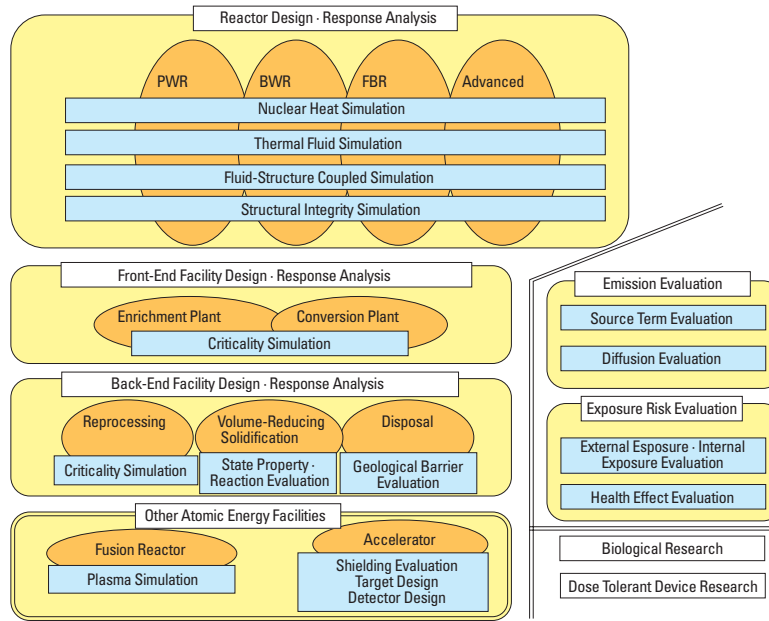


Fig. 1 Computational Issues in Atomic Energy Research

### 3. Activities of the Consortium and Collaboration among Subgroups

The consortium held meetings seven times for discussing the effective use of the Earth Simulator, which have been the currently available most powerful computational resource. Through the discussions, collaboration projects, which are for the peaceful use of the atomic energy, have been selected. Also, progress and outcome of the projects were evaluated at the meetings[2]. In FY2004, meetings were held four times for doing similar discussions. Two or three presentations, which have research interests and computational techniques in common, were given at every meeting. For instances, codes used in subgroups (6) and (7) are based on the same first principle code VASP. Subgroups (1), (8) and (9) are using the grid-based discretization, and the domain decomposition and the vectorization manners can be discussed together. Besides these technical meetings, steering committee of which members are the project (subgroup) representatives has been held every three month for controlling and redistributing the node-hours given to the nine projects.

Research activities of the consortium were also reported at the special sessions at the annual conferences of the Atomic Energy Society of Japan[1][3].

### 4. Future Works

The AESJ regulates that the term of the research committee is two years. However, the consortium does recognize

the importance and necessity of promoting the large-scale simulation, especially, in the field of atomic energy research, which is the integrated technology and has various overlapped interests with the other fields. The consortium is continuously expected to act as the steering committee to optimize the use of large-scale computational resources, help researchers exchange fruitful information, discuss the research strategies and promote the effective collaborations. Therefore, the consortium applied to the AESJ to extend its term for additional two years, and the application was approved.

Forthcoming mission of the consortium will be:

- continuously to discuss and promote high-end computing of the current projects using the Earth Simulator,
- enlighten other topics in the atomic energy research, and
- expand its interests in the next generation computer environments, e.g. grid computing.

### References

- [1] Comprehensive Report, Large-Scale Simulations in the Atomic Energy Research Using the Earth Simulator, Proc. Fall Meeting of AESJ, Vol.III, pp.25-, 2003.
- [2] Annual Report of the Earth Simulation Center, April 2002-March 2003.
- [3] Comprehensive Report, Large-Scale Simulations in Nuclear Engineering Using the Earth Simulator, Proc. Spring Meeting of AESJ, Vol.III, pp.25-, 2005.

# 原子力分野における大規模シミュレーション(日本原子力学会「大規模シミュレーション」研究専門委員会)

コンソーシアム責任者

奥田 洋司 東京大学

著者

奥田 洋司 東京大学

井上 直樹 日本原子力研究所

## 1. 背景および目的

中性子物理の歴史において数値実験はその発展に大きな役割を果たした。また、原子力産業、例えば、原子炉設計、熱水力、安全解析、構造設計などさまざまな工学問題においても、計算科学技術は欠くべからざるツールとなっている。当該分野においては、今後の研究開発に向けて、“Design by Analysis”あるいは“Computer-Aided R&D (CAR&D)”が必須の技術と言われている。こうしたことを背景として、日本原子力学会では、原子力分野における計算科学に関する広範な情報交換を促進するために、2002年に計算科学技術部門を設置した。そして、計算科学技術部門の設置が引き金となって、原子力分野(図1)における地球シミュレータ利用の大規模シミュレーション研究のコンソーシアムとしての役割を果たす「大規模シミュレーション」研究専門委員会が設立された。

本コンソーシアムは、地球シミュレータ利用の研究プロジェクトについての議論および提案、ソフトウェアの最適化などに関する情報交換、研究成果に関する相互評価、などの活動を行うことを目的としている。

2003年度には本コンソーシアムから9件の地球シミュレータ共同研究プロジェクトが提案され、採択された。218,650ノード時間(地球シミュレータ全利用時間の約4%)がコンソーシアムに割り当てられた。2004年度においては、次節に列挙されている9件(前年度の9件のうちの8件と新たに提案された1件(サブグループ(9)))が共同プロジェクトとして採択され、それらに合計205,000ノード時間が割り当てられた。

## 2. サブグループ

2004年度においては、以下の9件が地球シミュレータセンター共同プロジェクトとして採択された。カッコ内はサブグループの代表者である。各サブグループの詳細な研究成果については、それぞれの報告書を参照されたい。

- (1) 直接解析手法による原子炉内複雑熱流動挙動の大規模数値シミュレーション  
(高瀬和之、日本原子力研究所 東海研究所)
- (2) 溶液の第一原理分子動力学シミュレーション  
(平田勝、日本原子力研究所 東海研究所)
- (3) 多階層ダイナミクスが支配するプラズマの構造形成に関する研究  
(岸本泰明、京都大学)

- (4) 水銀ターゲットにおける液体水銀の圧力波伝播と容器壁の変形挙動と気泡成長の相互作用のシミュレーション  
(荒川忠一、東京大学/日本原子力研究所 計算科学技術推進センター)
- (5) 超伝導ナノファブリケーションによる新奇物性と中性子検出デバイス開発のための超伝導ダイナミクス研究  
(町田昌彦、日本原子力研究所 計算科学技術推進センター)
- (6) 放射線照射に伴う材料の物性変化と破壊の微視的シミュレーション  
(蕪木英雄、日本原子力研究所 計算科学技術推進センター)
- (7) 耐放射線性SiCデバイス用酸化膜の第一原理分子動力学シミュレーション  
(宮下敦巳、日本原子力研究所 高崎研究所)
- (8) 地下空間における放射性核種移行と地下水挙動の大規模シミュレーション技術に関する研究  
(奥田洋司、東京大学)
- (9) 稠密格子燃料集合体サブチャンネル内冷却材直接乱流シミュレーション  
(二ノ方寿、東京工業大学)

## 3. コンソーシアムの活動およびサブグループ間の連携

コンソーシアムでは、初年度に7回会合を開催し、現存する最高性能の大規模シミュレーション資源である地球シミュレータを対象として、その有効な活用方法について議論し、原子力の平和利用にかかわる大規模シミュレーションのテーマを抽出して平成15年度の利用プロジェクトとして申請した。さらに、これらのテーマの進捗状況と成果を評価し[2]、これらを踏まえて平成16年度の利用プロジェクトを申請した。

平成16年度には、同様に4回の会合を通じて各サブグループの進捗状況と成果を評価した。各回の会合においては、物理事象や計算手法に共通点の多い2~3テーマについて議論された。例えば、サブグループ(6)と(7)で用いられているコードは、共に第一原理コードVASPをベースにしている。サブグループ(1)、(8)および(9)は格子を用いた離散化を行っており、領域分割やベクトル化などの方式について議論、情報交換が行われた。こうした技術的な議論とは別に、各サブグループの代表者で構成されるユーザー幹事会

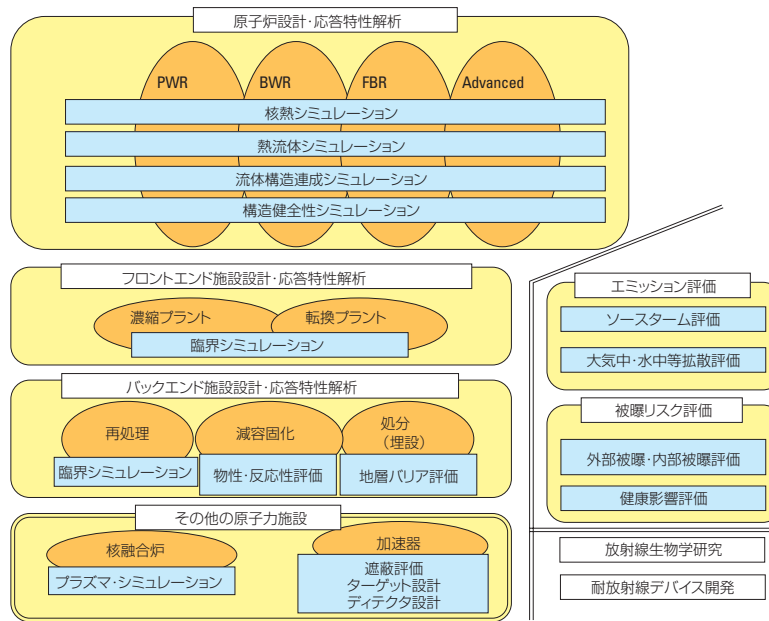


図1 原子力分野における計算科学上の課題

が約三ヶ月ごとに開催され、コンソーシアムに割り当てられたノード時間の利用調整やサブグループ間での融通が行われた。また、一連のコンソーシアムの研究活動は日本原子力学会の企画セッション[1][3]において報告された。

#### 4. 今後の展望・計画

大規模計算科学シミュレーションの推進が今後の日本の発展に大きな貢献をし得る可能性に鑑み、本コンソーシアムでは、特に多分野との境界領域をもつ原子力関連分野において当該研究の飛躍的進展を図るため、大規模計算機資源の利用で要求される研究コミュニティ全体を考慮した役割分担の最適化、関係者間の緊密な情報交換等を行い、具体的な研究戦略の検討・提言、計算機資源戦略、共同研究の企画・推薦などを通じて効果的な産学官連携による協力・協調体制の形成を促進することが必要、との認識に至っている。日本原子力学会の規定では研究専門委員会の設置期間は2年間であるが、こうした目的を果たすために、本コンソーシアムはさらに2年間の委員会設置延長を申請し、認められた。

今後、本コンソーシアムでは以下のミッションをもって活動を行っていく予定である。

- ・引き続き、地球シミュレータ利用テーマの企画、実施、評価
- ・原子力分野における、今後のシミュレーション研究の方向の調査
- ・次世代計算機、ネットワーク資源(グリッドなど)を用いた研究戦略、連携の検討

#### 参考文献

- [1] 日本原子力学会, (総合報告)「地球シミュレータを用いた原子力関連大規模シミュレーションの計画及び成果」, 2003年秋の大会予稿集, 第III分冊, 総p.25-, 2003.
- [2] Annual Report of the Earth Simulation Center, April 2002-March 2003.
- [3] 日本原子力学会, (総合報告)「地球シミュレータを用いた大規模原子力シミュレーション」, 2005年春の年会予稿集, 第III分冊, 総p.25-, 2005.