

11-NA25

陰的時間積分法による核融合プラズマの 非線形 MHD シミュレーションの高速化に関する研究

佐藤雅彦（核融合科学研究所）

概要 陰的時間積分法はクーラン条件により時間刻み幅が制限されない利点があるが、連立非線形方程式を反復的に解く過程で現れる連立一次方程式を高速に処理することが求められる。本研究では完全陰解法を用いた 2 次元 MHD コード及び半陰解法による 3 次元 MHD コードに対して、自動チューニング機能付き Xabclib を組み込むことにより、連立一次方程式の高速化を図った。性能評価は核融合科学研究所に設置された HITACHI SR16000/VL1 を利用し、SMT 実行を含む 128 スレッド実行環境において行った。本研究の性能評価試験によれば、反復解法ライブラリ Lis を組み込んだ MHD コードに対して、Xabclib を組み込んだ MHD コードは 10 倍～100 倍と十分に高速であることが確認され、自動チューニング機能の導入による高速化を確認できた。

1. 研究の目的と意義

核融合炉を実現するためには、高温高密度のプラズマを安定に閉じ込める必要があり、プラズマ中で発生する磁気流体力学(MHD)不安定性の非線形現象の解明が重要である。このため、核融合科学研究所では、一流体 MHD モデルに基づいた MHD 非線形シミュレーションコード(MIPS コード)を開発し、MHD 不安定性の非線形現象の解明に向けた研究を進めている。MIPS コードは 4 次のルンゲクッタ法による陽的な時間積分法を使用しているため、時間積分における時間の刻み幅がクーラン条件により制限されるという問題点がある。MHD 不安定性の中において興味のある現象は、プラズマ抵抗値に依存する抵抗性 MHD 不安定性であり、その非線形現象の時間スケールはミリ秒のオーダーである。これに対し、プラズマコア領域においては、一流体 MHD モデルに含まれる最も短い時間スケールの現象は、マイクロ秒のオーダーを持つ速い磁気音波である。このため、現在使用している陽的な時間積分法では、時間刻み幅が速い磁気音波によって制限されることになる。特に、抵抗性 MHD 不安定性の成長率はプラズマ抵抗値に依存し、プラズマ抵抗値が小さくなるとともに成長率も小さくなる性質があるため、プラズマ抵抗値が小さい計算に対しては計算時間を長くとらなければならなくなる。また、プラズマ抵抗が小さくなるとより小さな空間スケールの構造が現

れるため、より高解像度の格子が必要とされるようになる。高解像度格子を使用すると、陽的な時間積分法ではさらに小さい時間刻み幅が要求される。このため、シミュレーションで使用されているプラズマ抵抗値は、実際の実験パラメータよりも 3 桁も大きい値を使用しているのが現状となっている。

そこで本研究では、陰解法を用いた MHD シミュレーションコードの開発することにより、これらの課題を解決することを試みる。陰的時間積分法を使用すれば、クーラン条件に制限されることがないため、高解像度の格子を使用し、かつ、時間の刻み幅を大きくしたシミュレーションが可能となる。これにより、実験結果の解釈や予測を可能とする、実験に即したより現実的なパラメータでの核融合 MHD シミュレーションが可能となり、核融合研究の進展に大きく貢献できると考えられる。

陰的時間積分法においては、連立非線形方程式をニュートン法により解く必要がある。ニュートン法では反復計算により解を求めることになるが、その反復過程において大規模な連立一次方程式を解かなければならない。このため、陰的解法の高速化には大規模疎行列に対する高速な線形ソルバーの開発が必須となる。本研究では、自動チューニング機能付き数値計算ライブラリ Xabclib を導入することにより、大規模連立一次方程式の高速な処理を目指す。この大規模疎行列問題は前処理付きクリロフ法によ

り解くことが有効であると考えられる。一般的な問題と同様に、クリロフ法では有効な前処理法の導入が必要であるが、プラズマが持つ強い非線形性のために大規模疎行列の条件数が非常に大きいことが問題である。そのため、MHD 非線形シミュレーションに適した前処理方法の研究を行い、大規模並列計算機の性能を有効に活用した高速な線形ソルバーの適用を行っていくことも本研究の課題である。ニュートン法で用いられる高速な線形ソルバーは、他の核融合プラズマシミュレーションコードにおいても有用である。固有値問題による MHD 線形安定性コード、他のスキーム（有限要素法、コンパクトスキーム等）による MHD 非線形シミュレーションコード等へも適用することが可能であろう。特に、MHD 線形安定性コードがプラズマの実時間制御に使用される場合、その計算時間の高速化が重要な課題となっている。したがって、本研究の成果はより幅広いプラズマシミュレーション研究の発展に貢献できると期待される。

Xabclib は、東京大学情報基盤センターの片桐を中心としたグループにより開発が進められている自動チューニング（以降、AT）機能付きライブラリである。数値計算ライブラリにおける AT 技術は密行列や FFT など信号解析ライブラリで成功を収めてきた。これは、階層キャッシュに代表されるハードウェアの複雑化と数値計算ライブラリ特有の複雑なチューニング手法による開発コストの増大が背景にある。

一方、プラズマシミュレーションを含む多くの数値シミュレーションでは、疎行列に対する連立一次方程式の求解が行われる。そのため、疎行列用の数値計算ライブラリ（疎行列ライブラリ）の性能が重要となる。疎行列ライブラリは、入力データの特徴を考慮した実装をしないと、多くの場合、高性能が達成できない。そのため、入力データの特徴を自動抽出し、最適実装を自動選択する方式が研究されている。

このような状況の中、我々は疎行列ライブラリにおける実行時 AT の機能開発を目的として AT 機能付き数値計算ライブラリ Xabclib の開発が進めら

れてきた。実行時にアルゴリズム（実装法）選択のため、入力データとノード内スレッド数の変化に応じた AT 機能を提供することを目的としている。OpenMP で並列化しているため、ノード内高スレッド実行時の AT 効果が、Xabclib では重要となる。

本研究課題は昨年 H22 年度から開始されたものである。H22 年度においては、完全陰解法コードの基礎的検証のために 2 次元モデルに対する完全陰解法コードの開発を行った。この 2 次元コードにおいては、Lis を用いて連立一次方程式を並列処理している。このコードを用いて抵抗拡散時間が依存するプラズマ抵抗値、及び、アルフヴェン波の伝播速度が依存するプラズマ密度のパラメータと完全陰解法コードの収束までの反復回数との関係を調べ、完全陰解法コードの有効性を確認した。これと平行して、Xablib に実装された並列性とキャッシュ再利用性を高めた Blocked BSS (Branchless Segmented Scan) 法の性能検証を最大で 1 ノードあたり 128 スレッド実行が可能な HITACHI SR16000/VL1 (以降、SR16K) を用いて行った。これにより、高スレッド実行で Xabclib の AT 機能の有効性を確認できた。

本年度においては、昨年度の研究成果を基に 2 次元完全陰解法コード及び 3 次元半陰解法コードに Xabclib を組み込み、Xabclib による性能向上の評価を行った。

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

- (1) 共同研究を実施した大学名と研究体制
東京大学
- (2) 共同研究分野
超大規模数値計算系応用分野
- (3) 当公募型共同研究ならではの事項など
高並列スレッド環境として、核融合研究所が所有する HITACHI SR16000/VL1 を利用し、SMT 実行を含む 128 スレッド実行環境での Xabclib を組み込んだ陰解法 MHD コードの性能評価を行った。

3. 研究成果の詳細と当初計画の達成状況

(1) 研究成果の詳細について

本研究の最終的な目標は 3 次元完全陰解法コードの開発であるが、本年度においては、昨年度に開発した 2 次元モデルでの完全陰解法コード及び、半陰解法を用いた 3 次元コードに対して Xabclib を導入して性能評価を行った。本節では開発のベースとなる MIPS コードの概要、3 次元半陰解法コードの概要、2 次元完全陰解法コードの概要について述べた後、Xabclib による性能評価について述べる。

3.1 MIPS コードの概要

MIPS は、下記の一流体モデルの MHD 方程式を円柱座標系 (R, ϕ, z) のもとで解くコードである。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \\ \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} &= -\rho \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v} - \rho \nabla \left(\frac{v^2}{2} \right) - \nabla p + \mathbf{j} \times \mathbf{B} \\ &\quad + \frac{4}{3} \nabla [\nu \rho (\nabla \cdot \mathbf{v})] - \nabla \times (\nu \rho \boldsymbol{\omega}) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} &= -\nabla \cdot (p \mathbf{v}) - (\gamma - 1) p \nabla \cdot \mathbf{v} \\ &\quad + (\gamma - 1) \left[\nu \rho \omega^2 + \frac{4}{3} \nu \rho (\nabla \cdot \mathbf{v})^2 \right. \\ &\quad \left. + \eta \mathbf{j} \cdot (\mathbf{j} - \mathbf{j}_{eq}) \right] \end{aligned}$$

$$\mathbf{E} = -\mathbf{v} \times \mathbf{B} + \eta (\mathbf{j} - \mathbf{j}_{eq})$$

$$\mathbf{j} = \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{B}$$

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{v}$$

ここで、 ρ はプラズマ密度、 \mathbf{v} はプラズマの速度、 p はプラズマの圧力、 \mathbf{B} は磁場、 \mathbf{E} は電場、 \mathbf{j} はプラズマ電流密度を表している。 \mathbf{j}_{eq} は平衡での電流密度である。また、 η はプラズマの抵抗値、 ν は粘性、 γ は比熱比である。4 次の中心有限差分により空間方向の離散化を行い、1 階微分、2 階微分はそれぞれ、次式の様に離散化されている。

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial x} &= \frac{1}{12\Delta x} (-f_{i+2} + 8f_{i+1} - 8f_{i-1} + f_{i-2}) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} &= \frac{1}{12\Delta x^2} (-f_{i+2} + 16f_{i-1} - 30f_i + 16f_{i-1} - f_{i-2}) \end{aligned}$$

陽解法版 MIPS コードでは、4 次精度の陽的ルンゲクッタ法を用いて時間積分を行っている。本コードは MPI により並列化され、核融合科学研究所設置のプラズマシミュレータにて、MHD 不安定性の非線形挙動の解明に使用されている。

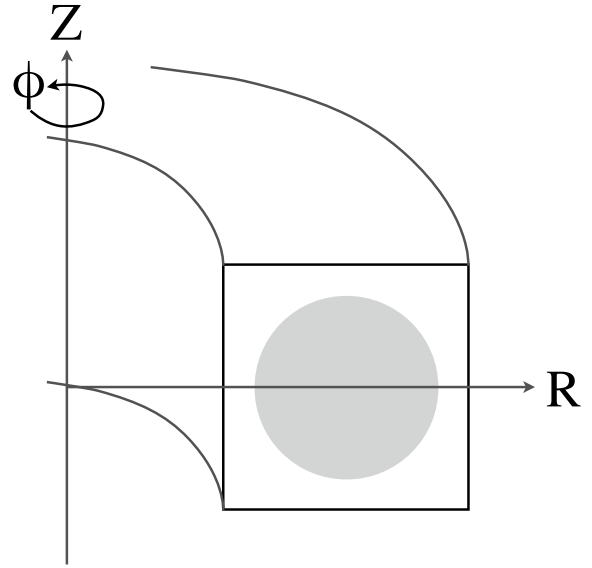


図 1. MIPS コードで使用されている円柱座標系

3.2 3 次元半陰解法コードの概要

MIPS コードの陰解法化の第一段階として、オーム則における拡散項のみを陰的に取り扱う半陰解法コードの開発を行ってきた。ファラデー則とオーム則より、磁場の時間発展方程式は、

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \nabla \eta \times \mathbf{j} + \nabla \times (\eta \mathbf{j}_{eq}) + \eta \nabla^2 \mathbf{B}$$

とかけ、 η を拡散係数とした磁場の拡散項が現れる。この式を分離し、第一ステップにおいて

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \nabla \times (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \nabla \eta \times \mathbf{j} + \nabla \times (\eta \mathbf{j}_{eq})$$

を陽的に時間積分を行った後、

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \eta \nabla^2 \mathbf{B}$$

を陰解法により時間積分を行う。

実際のプラズマにおいては、プラズマ中心から周辺に向かうにつれプラズマの温度は減少するため、プラズマ抵抗が周辺に従うにつれて大きくなる。このため、プラズマコア領域ではアルフヴェン波の伝播時間によりクーラン条件が決まるが、周辺部においては磁場の抵抗拡散時間でクーラン条件が決まるようになる。上記の半陰解法コードにより抵抗拡散時間によるクーラン条件の制限を緩和でき、より実際に近い抵抗分布のもとでシミュレーションを行えるようになる。

3.3 完全陰解法を用いた 2 次元 MHD コードの概要

完全陰解法コードの基礎的検証のため、図 2 に示すような 2 次元スラブ配位を対象とした 2 次元 MHD コードを開発している。(x, y, z)座標系のもとで、物理変数は z 方向に一様と仮定する。(x, y)座標系において、y 方向に周期境界条件、x 方向には固定境界条件を考える。トーラスプラズマとスラブモデルの対応は、トーラスプラズマにおける半径方向とスラブモデルの x 方向が対応し、トーラスプラズマにおけるトロイダル角(ϕ)方向がスラブモデルにおける z 方向に対応していることになる。スラブモデルにおいて、簡単のために速度、磁場の z 方向の成分は 0 とすれば、(x, y)座標のもとで MHD 方程式は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\frac{\partial(\rho v_x)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho v_y)}{\partial y} + D \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \rho + S_\rho \\ \frac{\partial v_x}{\partial t} &= -\left(v_x \frac{\partial}{\partial x} + v_y \frac{\partial}{\partial y} \right) v_x - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} - \frac{1}{\rho} J_z B_y \\ \frac{\partial v_y}{\partial t} &= -\left(v_x \frac{\partial}{\partial x} + v_y \frac{\partial}{\partial y} \right) v_y - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{1}{\rho} J_z B_x \\ \frac{\partial B_x}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial y} (v_x B_y - v_y B_x) - \frac{\partial}{\partial y} [\eta (J_z - J_{eq})] \\ \frac{\partial B_y}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x} (v_x B_y - v_y B_x) + \frac{\partial}{\partial x} [\eta (J_z - J_{eq})] \\ \frac{\partial P}{\partial t} &= -\frac{\partial(P v_x)}{\partial x} - \frac{\partial(P v_y)}{\partial y} + \chi \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) P + S_P \end{aligned}$$

と書き下すことができる。ただし簡単のために、

運動方程式における粘性項及び圧力方程式における散逸からのエネルギー取得項については無視している。

本研究の性能評価試験においては、初期平衡として磁場は y 成分のみを持つとし、その分布を

$$B_y = B_0 \tanh(x / d)$$

として与えた。ここで、 d は磁場のシアアの幅を表すパラメータである。圧力分布は、平衡方程式 $\nabla p = \mathbf{j} \times \mathbf{B}$ から決定している。今考えている問題では、

$$\frac{dp}{dx} = -\frac{dB_y}{dx} B_y$$

から求められる。また、初期速度は 0 と仮定する。この初期平衡のもとで磁場に微少な摂動成分を与え、物理変数の時間発展を計算していくことになる。

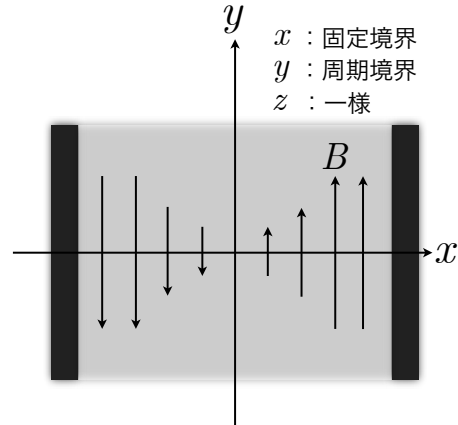


図 2. 2 次元スラブモデル

この 2 次元コードでは、時間積分法として完全陰解法を組み込んでいる。陰的時間積分法では、連立非線形方程式を解く必要があり、ニュートン法により解を反復的に求める必要がある。連立非線形方程式を

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}) = 0$$

とおくと、推定解の近傍で線形化した方程式

$$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{du} = -\mathbf{F}(\mathbf{u})$$

から解の更新量 \mathbf{du} をもとめ、

$$\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{u} + \mathbf{du}$$

により推定解を更新する。この過程を $\mathbf{F}(\mathbf{u})$ が要求

精度を満たすまで反復する。記憶容量の削減等を目的として、ヤコビアン行列を明示的に与えない方法が主に行われているが、本研究で開発した 2 次元 MHD コードでは、ヤコビアン行列は解析的に与えている。

3.3 Xabclib によるソルバ高速化

3.3.1 性能評価試験

本節では、Xabclib2011 利用による疎行列反復解法ソルバ (GMRES (m)法を用いたもの) を、2D および 3D の陰解法 MHD コードに適用した場合のシミュレーション実行時間を評価する。評価環境を以下にまとめる。

- 計算機環境：核融合研に設置された HITACHI SR16000/VL1 の 1 ノード (64 コア)。
- 利用スレッド数：16、32、64、128 (SMT)
- 評価対象
 - 代表者佐藤による陰解法 MHD コード。2D 問題、および 3D 問題のプログラムで評価する。
 - ◇ 利用言語：Fortran90
 - ◇ コンパイラ：日立最適化 Fortran90 コンパイラ。コンパイラオプションは” -Oss -omp”。
 - 比較対象のライブラリの詳細
 - ◇ Xabclib2011：OpenATLib2011 の OpenATI_LINERSOLVE 関数を呼び出す。GMRES (m)法を利用。数値計算ポリシーは「実行時間」。疎行列 - ベクトル積の実装、リスタート周期 (m) の調整には、自動チューニングを適用。
 - ◇ Lis ver.1.2.26 における関数 lis_solve() を呼び出す。GMRES (m)法を利用。リスタート周期 (m) は、デフォルトである 40 を指定。
 - ◇ Lis, Xabclib2011 とも、ライブラリや行列の初期化などの実装は同等のユーザ関数として実現。

3.3.2 2D 問題の評価結果

図 3 に 2D 問題の実行時間 [秒] を載せる。図 1 では、スレッド数を 16、32、64、128 と変化させている。

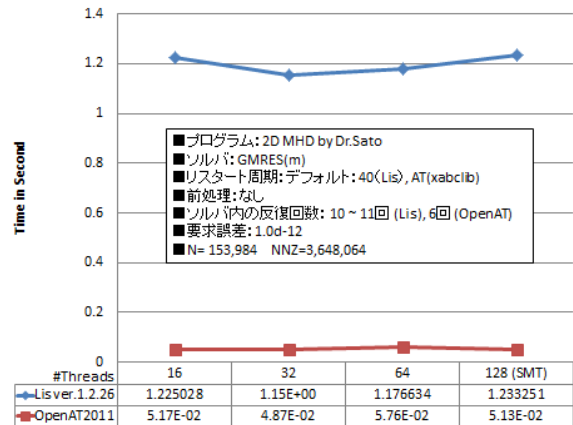


図 3 2D 問題の実行時間 [秒]。N=153,984。

NNZ=3,648,064。要求誤差：1.0d-12。

前処理は「無し」を指定。

図 3 により、Lis に対し Xabclib2011 (以降、” Xabclib” と記載) は約 24 倍高速化されている。収束までの反復回数は、Lis は 10 回～11 回、Xabclib では 6 回であった。

3.3.3 3D 問題の評価結果

図 4 に、3D 問題の実行時間 [秒] を載せる。

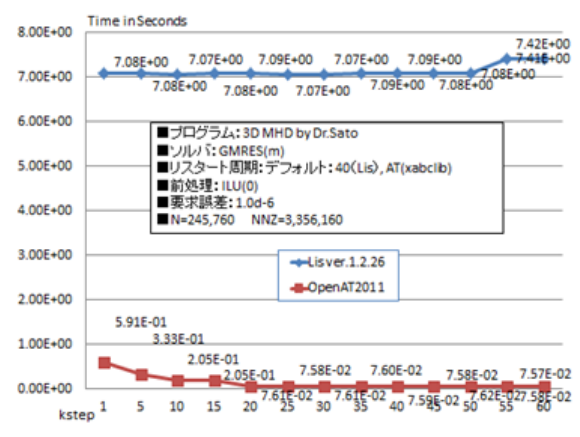


図 4 3D 問題の実行時間 [秒]。N=245,760。

NNZ=3,356,160。要求誤差：1.0d-6。前処理は

「ILU(0)」を指定。32 スレッドを利用。

図 4 では、X 軸にシミュレーションにおけるステップ (kstep と記載) を取っており、kstep ごとに反復解法ソルバが呼ばれる。

図 4 から、Xabclib ではシミュレーションが進

むにつれ、実行時間が減少している。しかし Lis では、実行時間は変化しない。Xabclib を利用することで Lis に対し、シミュレーションの開始時に約 12 倍の高速化、シミュレーションが進むにつれて約 98 倍の高速化が達成される。

この 3D シミュレーションでは、各 kstep において前回の解を利用することで、ソルバ内の収束加速を行う実装になっている。したがって、理論的にはシミュレーションが進むにつれて実行時間は減少するはずである。Lis および Xabclib では、前回の解ベクトルを利用するように、実行時オプションの指定、および初期ベクトル設定 (Xabclib) を行っている。したがって、Lis の実行時間は予想外である。そこで、収束するまでの反復回数を調べた。図 5 にそれを載せる。

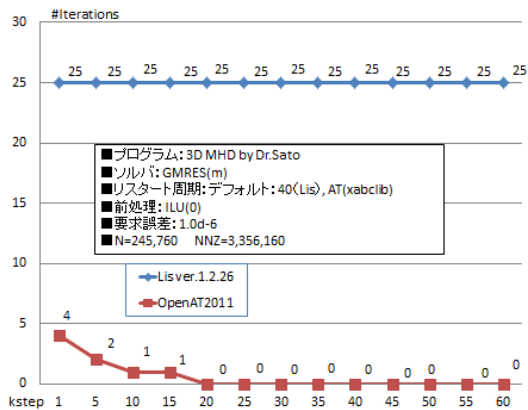


図 5 3D 問題における収束するまでの反復回数。N=245, 760。NNZ=3, 356, 160。要求誤差 : 1.0d-6。前処理は「ILU(0)」を指定。32 スレッドを利用。

図 5 より、Lis では一定回数の 25 回反復をしているのに対し、Xabclib では 4 回、2 回、1 回と、kstep が進むたび減少している。kstep=20 以降では反復は 0 回（前処理のあと 1 回だけ反復解法の処理を行い収束したということ）となる。したがって、Lis の本バージョンにおいては、解ベクトルの再利用に関するバグの可能性が高い。

1 回あたりの反復回数を調べることで、より詳細な実行時間評価をすることができる。そこで、図 6 に 1 反復あたりの実行時間 [秒] を載せる。ただし反復回数 0 回は 1 回とみなしている。

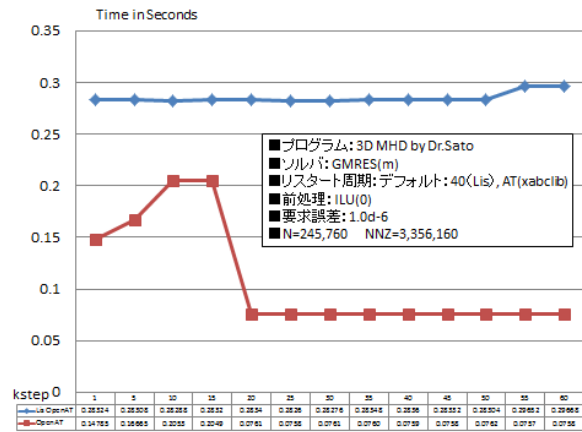


図 6 3D 問題における 1 反復あたりの実行時間 [秒]。前処理時間を含んだ時間。N=245, 760。NNZ=3, 356, 160。要求誤差 : 1.0d-6。前処理は「ILU(0)」を指定。32 スレッドを利用。

図 6 より、kstep=20 以降では Xabclib は反復 0 回なため、ほとんど前処理時間になると考えられる。この場合には、Lis より Xabclib は 1 反復あたりの実行時間が約 3.7 倍高速化されている。一方、kstep=20 未満では、Lis より最大でも約 1.9 倍高速化されるに留まる。

3.3.4 考察

2D 問題、3D 問題ともに、Lis に対して Xabclib は 10 倍～100 倍と十分に高速であることは疑いようがない。したがって、自動チューニング機能の導入により高速化が実現されたといえる。

2D 問題の結果を考察する。前処理なしの GMRES 実行については、Lis は 10 回～11 回反復であり、Xabclib では 6 回反復と少ない。これは、GMRES 法の実装の違いにより生じた可能性が高い。具体的には、Xabclib では直交化部分に「完全 QR 分解」を使っている。このことで演算の高効率化と、場合により高精度化されることが予想される。結果としてそれが、高速化と反復回数の原書に貢献した可能性がある。

3D 問題の結果を考察する。前処理のみの実行時 Xabclib は Lis に対してより高速である。この理由は、ILU(0)の実装に関して、Xabclib と Lis の実装の違いにより生じたと考えている。Xabclib の ILU(0)実装では、対角部分のみしか値更新をし

ない軽量化した ILU(0)実装を採用している。このこと、容易に収束する行列では、Lis より ILU(0)前処理が高速化される可能性が高い。

以上は、実装の違いによる定説的な考察といえる。問題の性質やスレッド数を変化させた状況下で、性能モニタを用いて定量的に性能解析をすることが必要である。これは今後の課題である。

3.4 physics-based preconditioning の導入

昨年度実施した陰解法を用いた 2 次元 MHD コードの性能評価では、プラズマ密度が減少するにつれて反復法の収束が悪化し、計算時間が大きく増大することがわかった。これは、密度が減少するにつれてアルフヴェン波の伝播速度が増加し、双曲型問題の性質が強くなったためと考えられる。この問題を解決するために、物理変数に対して Schur 分解を行うことで双曲型問題が放物型問題に変換し、収束を向上させる手法が提案されている。この手法は MHD 問題においても有効であることが確認されている (L. Chacon *et al*, J. Comput. Phys., **178**, 15 (2002))。本研究ではその手法の効果を確認するために、下記の 2 次元線形 MHD モデルに対して評価を行った。

$$\begin{aligned} \frac{\partial v_x}{\partial t} &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial x} - \frac{1}{\rho_0} J_0 B_y - \frac{1}{\rho_0} \left(\frac{\partial B_y}{\partial x} - \frac{\partial B_x}{\partial t} \right) \\ \frac{\partial v_y}{\partial t} &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{1}{\rho_0} J_0 B_x \\ \frac{\partial B_x}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial y} (B_0 v_x) + \eta \nabla_{\perp} B_x \\ \frac{\partial B_y}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x} (B_0 v_x) + \eta \nabla_{\perp} B_y \\ \frac{\partial P}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial x} (P_0 v_x) - \frac{\partial}{\partial y} (P_0 v_y) + \chi \nabla_{\perp} P \end{aligned}$$

ここで、下付の 0 は平衡量を表している。本テストではプラズマ密度の値と収束性能に注目するため、非拡散項のみを陰的に処理し、その後で拡散項を陽的に処理する。このとき、陰的に処理をする非拡散項の部分は、

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_1 &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{\Delta t} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\Delta t} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{\Delta t} \end{pmatrix}, \mathbf{D}_2 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\Delta t} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\Delta t} \end{pmatrix} \\ \mathbf{L} &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{B_0}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial y} & -\frac{J_0}{\rho_0} - \frac{B_0}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial x} \\ -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial y} & \frac{J_0}{\rho_0} & 0 \end{pmatrix}, \mathbf{U} = \begin{pmatrix} -\frac{\partial}{\partial x} (P_0) & -\frac{\partial}{\partial y} (P_0) \\ \frac{\partial}{\partial y} (B_0) & 0 \\ -\frac{\partial}{\partial x} (B_0) & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{u} &= \begin{pmatrix} P^{n+1} \\ B_x^{n+1} \\ B_y^{n+1} \end{pmatrix}, \mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_x^{n+1} \\ v_y^{n+1} \end{pmatrix}, \mathbf{r}_1 = -\frac{1}{\Delta t} \begin{pmatrix} P^n \\ B_x^n \\ B_y^n \end{pmatrix}, \mathbf{r}_2 = -\frac{1}{\Delta t} \begin{pmatrix} v_x^n \\ v_y^n \end{pmatrix} \end{aligned}$$

とおけば、

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 & \mathbf{U} \\ \mathbf{L} & \mathbf{D}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{r}_2 \end{pmatrix}$$

と書くことができる。このとき、Schur 分解により下記のように分解できることが知られている。

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 & \mathbf{U} \\ \mathbf{L} & \mathbf{D}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{L}\mathbf{D}_1^{-1} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{D}_1^{-1}\mathbf{U} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

ここで、

$$\mathbf{S} = \mathbf{D}_2 - \mathbf{L}\mathbf{D}_1^{-1}\mathbf{U}$$

である。これを利用すると、

$$\begin{aligned} (1) \quad \mathbf{u}^* &= \mathbf{D}_1^{-1}\mathbf{r}_1 \\ (2) \quad \mathbf{v}^* &= \mathbf{r}_2 - \mathbf{L}\mathbf{u}^* \\ (3) \quad \mathbf{v} &= \mathbf{S}^{-1}\mathbf{v}^* \\ (4) \quad \mathbf{u} &= \mathbf{u}^* - \mathbf{D}_1^{-1}\mathbf{U}\mathbf{v} \end{aligned}$$

から解を求めることができる。いま、

$$\mathbf{D}_1^{-1} = -\Delta t \mathbf{I}$$

であるから、

$$\mathbf{S} = \mathbf{D}_2 + \Delta t \mathbf{L}\mathbf{U}$$

となる。この行列 S はもとの行列と比べて次元が小さくなるとともに対角優位となるため、クリロフ法の収束が早くなることが期待できる。計算コードの性能評価においては、図 2 で与えられている平衡に対して行った。プラズマ密度分布は $\rho_0 = (1 - \rho_a)(1 - x^2)^4 + \rho_a$ と仮定した。周辺での密度

値 ρ_a と、時間ステップを 20 ステップ進めるのに要した実計算時間の関係を図 7 に示す。計算では 16 コアを使用し、Lis ライブラリに組み込まれている GMRES 法を用いた。従来の Schur 分解を使用しないコードと比較して、改良コードでは計算時間が大幅に削減できていることが確認できる。特に、周辺密度が小さくなるにつれてその違いが大きく現れており、physics-based preconditioning の導入が効果的であることを確認できた。

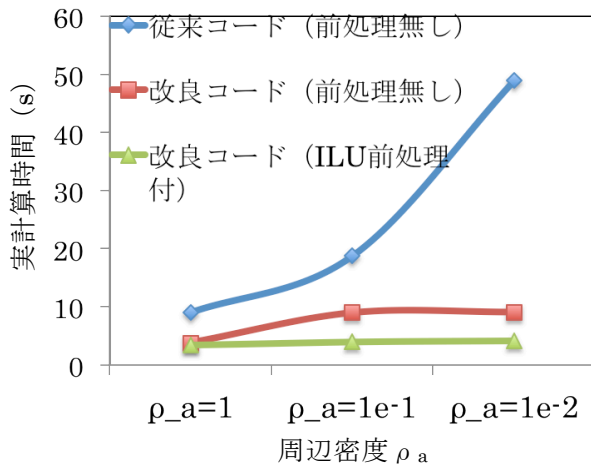


図 7. 周辺密度に対する計算時間の関係

(2) 当初計画の達成状況について

最終的な目標は 3 次元非線形コードの陰解法化であったが、現在のところ 2 次元非線形コードの陰解法化まで達成している。2 次元モデルのもとでソルバーの改良及び検証を進め、その有効性を確認した。ここで行った成果をふまえて 3 次元コードへの拡張を進めていく予定である。

4. 今後の展望

これまでに開発してきた陰解法を用いた MHD コードは、OpenMP を使用したノード内並列を行っている。さらなる高速化のため、また、高解像度メッシュを用いた大規模計算を行うためには MPI を用いたノード間並列も行っていく必要がある。陰解法コードにおいては、前処理付きクリロフ法により連立一次方程式を解く必要があるため、大規模ノード間並列にて計算速度の向上を図るためには領域分割法の導入が必要不可欠と考えられる。領域分割法を用いた連立一次方程式の解法として、下記の 2 つの方法について検討を行う予定である。

(a) グローバルな行列問題を解かない手法

単純に連立一次方程式をプロセスごとに分割した際、となりのプロセスが担当する変数の値をどのように取り扱うかが問題となる。もっとも簡単な方法は、隣のプロセスが担当する変数は固定境界としてそのプロセスで取り扱う方法である。このようにすることで、各プロセスで独立に連立一次方程式を解くことができる。連立方程式を解いた後、各プロセスの境界部分の値を更新し、再び連立一次方程式を解く。この作業を境界部分の値が収束するまで反復させる。この手法ではグローバルな行列問題を解く必要がない、プログラミングが行いやすいという利点があるものの、連立一次方程式を反復手法により解く上で、収束性能が悪化する問題点がある。

(b) 静的縮約法

Schur 分解を用いた領域分割を行うことより計算時間の削減が期待できる。しかしながら、MPI 並列を用いた Schur 行列問題の高速解法、および、疎行列同士の積の高速化などの課題がある。この 2 手法のうち、まず (a) の手法により MPI+OpenMP ハイブリッド並列コードの開発を進め、既存ライブラリと Xabclib との性能比較試験を進めていく。その次の段階として、より複雑な (b) の手法を用いた計算コードを今後開発していく予定である。

5. 研究成果リスト

- (1) 学術論文 (投稿中のものは「投稿中」と明記)
- (2) 国際会議プロシーディングス
- (3) 国際会議発表
- (4) 国内会議発表
 - ・佐藤雅彦、プラズマシミュレータシンポジウム 2011、自然科学研究機構 核融合科学研究所主催、2011 年 9 月 13 日 (火)~14 日 (水) 「陰的時間積分法を用いた MHD コード開発」
 - ・片桐孝洋、T2K シンポジウム 2011@京大、2011 年 11 月 30 日 (水) 「e-Science プロジェクト「シームレス高生産・高性能プログラミング環境」成果報告」
- (5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)