

jh130040-NA20

輻射流体シミュレーションコードの高速化手法に関する研究

長友英夫（大阪大学レーザーエネルギー学研究センター）

概要 レーザープラズマの数値計算では、様々な物理モデルが含まれている。特にプラズマ流体と光など、異なる時間、空間スケールの物理が混在するため、数値解析は困難を伴う。本課題では、このようなコードの計算の高速化のために 2 次元一般曲線座標系における輻射輸送、および熱伝導を扱う拡散方程式の陰的解法の反復法についての改善を試みる。特に本研究課題では、これまで共有メモリ上で自動、あるいは OpenMP で並列していた部分に関して MPI、HPF 等を用いることによって分散メモリ上でも並列計算を行えるようにし、大規模シミュレーションを実現可能にする。

1. 研究の目的と意義

レーザープラズマなど高温高压状態を伴うプラズマの流れ場では、輻射輸送の影響が無視できないため流体コードに直接組み込んで計算を行う必要がある。通常、流体と輻射輸送を同時に解くためには光子の運動方程式を拡散方程式に近似して求める。ただし、レーザープラズマでは輻射エネルギーのレンジが大きいことから、エネルギー毎の拡散方程式を解く方式、多群拡散法を用いており、通常、これら拡散方程式は反復法で求解する [1]。しかし、拡散方程式解法における計算負荷は大きく、一般的なレーザープラズマ解析では総 CPU 時間の 95%以上が反復法に費やされている。

これは、反復法を解くアルゴリズムの並列化が難しく、ベクトル化のチューニングしか施されていないことが主因である。並列化に関しては、多群拡散近似していることから、エネルギー毎にノード内並列化(エネルギー分割法)することによってある程度の高速化は可能になっている。しかしながら、エネルギースペクトル毎に反復の収束性が異なることから並列化の効率が悪く、さらに、エネルギースペクトルの数より CPU 数が多い場合や分散メモリ環境では並列化率が低下する。この点を改良し、多ノードを用いた並列計算が行えるようにする。さらに、各エネルギー内で領域分割、並列化することによって計算の高速化を図り、より大規模計算を可能にすることを最終目標とした。ここでは主に MPI による並列化を考えているが、

利便性を考え、可能であれば HPF(High Performance Fortran),XscalableMP[2]などの並列アプリケーションを用いた並列化も検討した。

これら最適化されたコードでは、これまで大規模計算が必要でシミュレーションが困難であった短波長擾乱を伴うレーザー駆動レーザー・テラレーザー不安定性の解析などの実用的なシミュレーションに結びつける。

現在、大阪大学サイバーメディアセンター(以下、阪大 CMC)の SX-8R、および SX-9 を利用しており、反復法についてはベクトル化されたライブラリ、あるいは自前のコードを使っている。これらを用いたコードは、自動並列、計算効率が格段に向上し高速化されるだけでなく、分散メモリで解くことができるようになると、これまではシミュレーションを行うことができなかった計算格子点数のシミュレーションも可能になる。レーザー駆動ターゲットの流体力学的不安定性について、より短い波長の擾乱の挙動を調べることができるようになる。さらに、3次元シミュレーションにも繋がる重要なステップであると考ええる。

ここでは、レーザープラズマシミュレーションにおける輻射輸送の多群拡散近似法における拡散方程式の解法に主眼をおくが、同じ手法は類似した反復法を用いる解法すべてに適用可能で、熱伝導方程式、磁場の拡散輸送など様々なコードの最適化が可能になる。これらは、他の研究分野でも活用可能でそれら知見は阪大 CMC と共有、公開す

ることによって、他の利用者にも有益なものとなる。

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拠点名および役割分担

大阪大学サイバーメディアセンターで実施し、特に MPI (HPF) 化に関する技術的支援を中心に、共同研究として実施した。

(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

物理モデルに関するコード研究は、研究代表者で行えるものの、計算機に依存する計算法については、情報基盤センターなどで計算手法の専門家の協力が必要であった。今回は、ベクトル・並列計算機の効果的な活用方法について、阪大 CMC と共同研究を実施した。

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

これまでのシミュレーションでは、並列化は自動並列で行っていたため、共有メモリ上で実行できる規模のシミュレーションとしての限界があった。一方で、コードには流体、輻射輸送、レーザー光の光線追跡・吸収、状態方程式、輻射の放射率・吸収率のテーブル参照、等の様々なスケールの物理モデルが含まれ、容易に並列化を行えない状況であった。そこで、今回は全計算量の約 95% を占める輻射輸送部分の並列化を重点的に行い計算効率の向上を試みた。輻射輸送では、多群拡散近似法を用いており、群数（通常は 32 群）の拡散方程式を反復法で解く。また、時間的に移動する一般曲線座標系を用いているため、歪んだ計算格子でも収束するよう、反復法には 2 次元 9 点の ILUBCG 法を採用している。

特に、これまでは並列処理を sxf90 による自動ベクトル・並列機能に依存していたが、今回の共同研究の準備段階において、輻射輸送については

OpenMP、あるいは sxf90 の指示行を加えることによってエネルギースペクトル毎にマクロタスク型並列処理を図ることによってノード（共有メモリ）内で高速化が図れることを確認した。そこで、まず、OpenMP から比較的容易に分散メモリによる並列処理に拡張できる HPF による並列化への拡張を試みた。

エネルギースペクトル毎に拡散方程式を解く多群拡散近似法を採用しており、このスペクトル方向に CPU 数に応じて空間分割を行った。これは、OpenMP と同様に HPF の指示行を加えることによって分割したので実際にはソースコードに指示行を 5-6 行追加しただけである。それ以外の部分には自動並列のマイクロタスク機能を用いて並列化した。

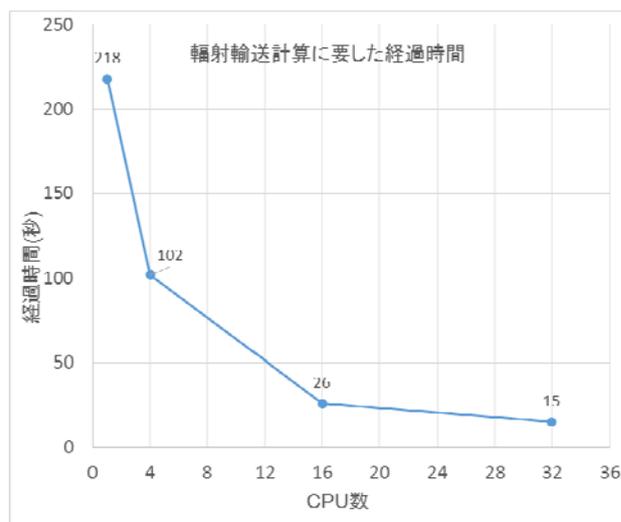


図 1. 並列化による CPU 数と計算時間の関係

ベンチマーク計算は阪大 CMC の SX-9 を用いて行った。計算格子点数は 300x61 で、輻射輸送は 32 群で近似している。図 1 に CPU 数と経過時間の結果を示す。単にマクロタスクで自動並列化した場合、4CPU で 132 秒であった。また、従来の計算ではノード内共有メモリの制約から最大 16CPU の計算が限界であったが、これによってより多くの CPU を用いた並列計算が可能になった。

計算例として、レーザー照射によるプラスチックシエルの爆縮において外部磁場を与えた場合の磁場圧縮のシミュレーション結果を示す。初期に

300T の磁場が与え、爆縮に従って磁場が圧縮する様子が捉えられるようになった。図 1 に、その過程の磁力線、および密度分布を示す。この 300ps 後に爆縮は最大圧縮に到達するとともに、磁場も 10kT を超える高強度場を形成することが明らかになった。

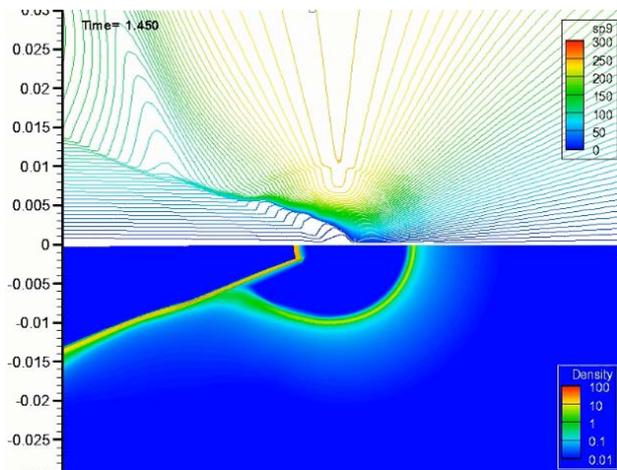


図 2. コーン付シェルの爆縮途中の磁力線 (上) および密度分布 (下)。

(2) 当初計画の達成状況について

エネルギースペクトル毎に分割されたエネルギー群を MPI、あるいは HPF によって並列化されたことによって、分散メモリ上で処理できるようになった。この結果、これまでノード内のコア数で制限されていた並列度がより大きくとれるようになった。しかしながら、当初の目標としていた空間方向の分割によって並列度を増やすことを試みたが、反復法の収束安定性の悪化などの問題に直面し改善されなかった。

4. 今後の展望

今回の改善によって可能となる大規模計算では、シェル表面の微細な擾乱(モード 100-200 程度)を考慮した計算が実行可能となった。さらなる並列度を高めるために、空間分割あるいは方向分離によって並列度を向上させることができないか検討を続ける。また、反復法については、代数的マルチグリッド法など反復法の改善が急務である。特に、レーザー吸収領域や希薄プラズマと接する領

域付近は、物理量の急峻になる場合があり、反復法の安定的な解法を追及する必要がある。さらに、実際には 3 次元シミュレーションが求められているが、現状では 2 次元シミュレーションしか行えていない。今回の手法は 3 次元シミュレーションにも活用可能であり、検討を進める。

なお、今回並列アプリケーションとして採用した HPF だけでなく、XcalableMP[2]なども利便性が高いのではないかと考える。今後のコード開発についても活用を検討する。

参考文献

- [1] Nagatomo H. *et al* Phys. Plasmas 14 056303, 2007.
- [2] 次世代並列プログラミング言語検討委員会 (<http://www.xcalablemp.org/index-jp.html>)

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)
H. Nagatomo, T. Johzaki, A. Sunahara, H. Sakagami, K. Mima, H. Shiraga and H. Azechi, “Computational study of strong magnetic field generation in a cone-guided implosion, Nucl. Fusion **53** 063018 (2013)

(2) 国際会議プロシーディングス

- H. Nagatomo, T. Sano, T. Johzaki, A. Sunahara, H. Sakagami, K. Mima, “Compression of the Magnetic field in a Coned-guided Implosion”, *Journal of Physics, to be submitted.*

(3) 国際会議発表

- H. Nagatomo, T. Sano, T. Johzaki, A. Sunahara, H. Sakagami, K. Mima, “Compression of the Magnetic field in a Coned-guided Implosion”, 7th International Conference on Inertial Fusion and Science Applications, Nara, Sep.12, 2013.
- H. Nagatomo, T. Sano, T. Johzaki, A. Sunahara, H. Sakagami, K. Mima, “Magnetic field compression in an implosion for fast ignition” Annual meeting of

Annual meeting of American Physical Society,
Division of Plasma Physics, Denver USA, Nov.17,
2013.

(4) 国内会議発表

長友英夫、城崎知至、砂原淳、佐野孝好、坂上仁志、西口彰夫、三間罔興、「爆縮による外部磁場のシミュレーション」日本物理学会秋季大会 2013 年 9 月 25 日、徳島大学常三島キャンパス。

長友英夫、城崎知至、砂原淳、坂上仁志、藤岡慎介、中井光男、白神宏之「高速点火実験炉におけるコーン付爆縮に関する物理と炉心設計」第 30 回プラズマ・核融合学会年会，2013 年 12 月 6 日、東京工業大学。

長友英夫、朝比奈隆志、佐野孝好、城崎知至、砂原淳、坂上仁志、三間罔興、「外部磁場中のレーザー爆縮の輻射流体シミュレーション」第 27 回数値流体力学シンポジウム 2013 年 12 月 17 日、名古屋大学東山キャンパス。

長友英夫、朝比奈隆志、佐野孝好、城崎知至、砂原淳、坂上仁志、西口彰夫、三間罔興、「キロテスラ級磁場のレーザー爆縮への影響」物理学会 第 69 回年次大、2014 年 3 月 27 日、東海大学湘南キャンパス。

(5) その他（特許，プレス発表，著書等）