計算物理における高速数値シミュレーション ^{曽谷勝義}

NEC ソフトウエア関西 A Fast Numerical Simulation for Computational Physics Katsuyoshi Sotani NEC Software Kansai

Abstract.

The structure of theoretical formula for phenomena is important in the field of computational physics. Plasma phenomena which requires a significant amount of computation, represents a great need for the existence of computational physics. There are especially great expectation for computerized numerical simulations, for use in calculating nonlinear plasma phenomena. We report on having achieved faster simulation by replacing the FFT code used originally, with the improved version of the preconditioning conjugate gradient method.

1.はじめに

計算物理における分野では、現象に対する理 論式の構成が重要であり、いろいろ考えられてい る。今回の研究では、核融合における電磁場モ デルを設定し、その粒子結合を採り上げる。電 磁場モデルとしてのプラズマ挙動解明がテーマ である。プラズマ物理は、電磁場粒子結合シミ ュレーションが重要であり、大規模な連立一次 方程式に構成出来る。この高速解法を目指して、 オリジナルコードの数値解法を改良し、高速数 値シミュレーションが実現出来た報告を行う。

2.マクロスケール粒子コード

核融合プラズマの複雑な物理現象を解明する には、非線形プラズマ現象の粒子効果の研究が 重要である。非線形プラズマ現象は実験で有る 程度の値が得られているが、コスト面から計算 機による高速数値シミュレーションに期待が寄 せられている。ここでは非線形プラズマ現象と なるマクロスケール粒子をとり上げ、その電磁 場粒子結合方程式を定義する。このシミュレー ションコードは、非線形電磁場方程式の形をと り大規模計算になる。そして物理状況を細かく 解明するため、計算精度を十分に得ようとする 〒540-8551 大阪市中央区城見1丁目4-24 場合が多く、1回のシミュレーションでタイム ステップ 10,000 回程度の繰り返し計算が行われ る為、数値解法に多くの計算時間が必要とされ ている。(Fig.1.参照)

<シミュレーションコードの構造>



Fig.1.The Structure of Macroscale Simulation Code.

FORTRAN about 38,000 step . Practical matrix size $55,000 \times 55,000$ Time step 10,000

3.基本方程式の構成

3-1. 第一の方程式

電場 Eⁿ⁺¹、磁場 Bⁿ⁺¹ を未知量と定義して

(3.1)
$$1 + (\alpha c \Delta t)^2 \nabla \times \nabla \times \mathbf{E}^{n+1} = \mathbf{S}$$

(3.2) $\mathbf{B}^{n+1} = \mathbf{B}^n - c\Delta t \nabla \times \mathbf{E}^{n+\alpha}$ 式(3.1)の右辺ソース項の S は以下の形である。

(3.3)
$$\mathbf{S} = \left[1 - \alpha (1 - \alpha)(c \Delta t)^2 \nabla \times \nabla \times \right] \mathbf{E}^n + c \Delta t \nabla \times \mathbf{B}^n - 4\pi \Delta t \times \langle j^{n+\gamma} \rangle$$

の形である。ここで

$$\mathbf{E}^{n+\alpha} = \alpha \mathbf{E}^{n+1} + (1-\alpha) \mathbf{E}^n (1/2 < \alpha, \gamma < 1)$$

であり、<・・・> は空間的にフィルターをかけ る事を意味する。右辺j(電流)項目中の E^n の 値を既知項として解く。 E^{n+1} に関しては対角項 のみ左辺に移して解く。

式(3.1)の右辺 S は第 1,2 項は既知であり、第 3 項は未知である。第 3 項の $j^{n+\gamma}$ は、未知の電 磁場 \mathbf{E}^{n+1} 、 \mathbf{B}^{n+1} のべき関数である。 ここで $(\alpha c \Delta t)^2 = \gamma$ とすると、 $\gamma \ge 1$ である。フ ィルターを掛ける前の $j^{n+\gamma}(x)$ は次の形で表現 出来る。

(3.4) $j^{n+\gamma}(\mathbf{x}) = \mathbf{Q}(\mathbf{x}) + \mathbf{R}(\mathbf{x}; \mathbf{E}, \mathbf{B}) + \mathbf{T}(\mathbf{x})\mathbf{E}$ $+ \mathbf{U}(\mathbf{x})(\mathbf{E} \cdot \mathbf{B})\frac{\mathbf{B}}{\mathbf{B}^{2}} + \mathbf{V}(\mathbf{x})(\mathbf{E} \times \mathbf{B}) / \mathbf{B}^{2}$

ここで係数 Q, R, T, U, V は空間の関数で あり、普通なめらかなプロファイル(釣り型や スクリュー型にピークした分布)の短波長の微 小変動が乗っている。係数 R は E, R にも弱 く依存する。第 3、第 4、第 5 項は、式(3.3)にお いていずれも主要項である。係数 T, U, V のう ち成分の時間変動は緩やかである。周期座標が 存在する場合、その座標についてのフーリェ分 解が用いられる。E, S でのフーリェ分解後の 成分 E_k , S_k とすれば、この E_k , S_k はも との実空間での値 E, S をフーリェ変換したも のに当たる。この方法に於いては、 S が強い空 間依存性を持つ時(例えばスクリュー状変形) にも収束性が落ちないことが要求される。

3-2. 第二の方程式

第一の方程式を解いて得られた電場(\mathbf{E}^{n+1} と表現しこの段階では既知)を補正する。 即ち $\mathbf{E}^{n+1} = \mathbf{E}^{n} - \nabla \delta \phi$ の関係にあるスカラ 量 $\delta \phi$ の方程式 (3.5) $-\nabla^2 \delta \phi = 4\pi < \rho^{n+1} > -\nabla \mathbf{E}^{n+1}$

を解く。式(3.5)でソース項 ρ^{n+1} は未知の $\delta \phi$ 関数であり、 $< \rho^{n+1} >$ は空間的にフィルター を掛ける事を意味する。この時点で磁場 B は確 定している。実質的には、式(3.5)の右辺の未知部 分は次式で与えられる。

(3.6) $4\pi < \rho^{n+1} >= Q(x)$

+ $\nabla [\mathbf{R}(\mathbf{x}) \nabla \delta \phi + \mathbf{T}(\mathbf{x}) \times \nabla \delta \phi + \mathbf{U}(\mathbf{x}) (\mathbf{B} \nabla \delta \phi)]$

この場合も係数 $\mathbf{Q}, \mathbf{R}, \mathbf{T}, \mathbf{U}, \mathbf{V}$ は空間的になめ らからに変化する成分の上に激しく変動する短 波長成分が乗っている。式(3.4)の電流 $j^{n+\gamma}(\mathbf{x})$ は、 具体的な形として次式で示される。

$$j^{n+\gamma}(x) = J_{x}^{n}(x) + \gamma \Delta t \frac{e_{i}}{m_{i}} \left[q_{i}(x) \mathbf{E}^{n+\alpha} + J^{n+\frac{1}{2}}(x) \times \mathbf{B}^{n+\alpha} \right]$$
(3.7)
$$+ J_{c}^{x}(x) + J_{c}^{n}(x) b^{n+\frac{1}{2}} + \gamma \Delta t \frac{(-e)}{m_{e}} q_{e}(x) \mathbf{E}_{|}^{n+\alpha} b^{n+\frac{1}{2}}$$

$$+ e(t)q_{e}(x) (\mathbf{E}^{n+\alpha} \times \mathbf{B}^{n+\alpha}) / (\mathbf{B}^{n+\alpha})^{2}$$

$$- (-e)\gamma \Delta t \mu_{c}(x) (\nabla_{|} \mathbf{B}^{n+\alpha}) b^{n+\frac{1}{2}}$$

+ (-e) $\frac{\mathrm{me}}{(-\mathrm{e})\mathbf{B}} \mathbf{b}^{n+\gamma} \times \left[\mu_{\mathrm{e}}(\mathbf{x}) \nabla \mathbf{B}^{n+\gamma} + T_{\mathrm{e}}(\mathbf{x}) (\mathbf{b}^{n+\gamma} \cdot \nabla) \mathbf{b}^{n+\gamma} \right]$

 $但し \mathbf{E}_{\parallel}^{\mathbf{n}+lpha}$ 及び $abla_{\parallel}$ はそれぞれの垂直成分を表す。

3-3. 2 つのインプリシット方程式の解法

インプリシット方程式を解く為には式(3.3)の右 辺未知量 $j^{n+\gamma}(x)$ の中で $E^{n+\alpha}$ をとりあえず E^{n+1} を用いてエクスプリットな方程式とし、こ れを解いて得られる E^{n+1} より新たな右辺項 $j^{n+\gamma}(x)$ を得る。これを収束する迄、反復させ て真の解を得る事が出来る。これを高速で行う 為にはエクスプリットな方程式を解く為、計算 速度及び収束性の優れた高速数値解法へ導く必 要がある。

境界条件;

電場 E に関して、X方向Y方向は導体壁とし0 とする。Z方向には周期境界条件を持つとする。 非相対論的なプラズマでは、静電的性質が重要で ある。静電ポテンシャルからポアンン方程式が求められる。 静電ポテンシャルをφ とすると次式が成り立つ。

 $(3.8) \mathbf{E} = -\nabla\phi$

マクスウエル方程式 $\mathcal{E}_0 \nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x},t) = \boldsymbol{\rho}(\mathbf{x},t)$ から、次のポア ツ方程式を導くことが出来る。

 $(3.9) \quad \nabla^2 \phi = -\rho / \varepsilon_0$

一般にこうした場合、計算を簡略化させる為、境 界条件を周期境界条件に持ってきて、計算の高速 性を求めて FFT が用いられる事が多い。

3-4. 机ジカル版に用いられた FFT (高速フーリェ変換)

非相対論的なプラズマ運動では、静電ポテンシャル に対してマックスウエル方程式を立て、そこからポアソン方 程式に導く。楕円型の偏微分方程式を求める事 になるが、この差分計算において粒子コードでは周 期境界条件になり、この場合高速7-リェ変換が効果 的であると考えられ、計算物理において広く用い られている。これは静電ポ デンシャル φ 関数を差分計 算する分だけの個数をフーリェモードに展開して求める。 利ジ 加版ではこの計算を Danielson と Lanczos に よる FFT アルi リズムを用いて求めている。FFT で は 2 を基数(N= 2^{n})とする形となっている。こ れはベクトル計算機特有のバンクコンフリクトを多発させる 事になる。この時の演算量はNlog、Nであるから 平均ループ長は√N に比例する。つまり大きさ \sqrt{N} のループを $\sqrt{N}\log_{N}N$ 回繰り返す事になる。 ここで境界条件を一般的にした場合、2次元では 次の形の5点差分形式となる。

(3.10) $\begin{aligned} (\phi_{l+1,m} - 2\phi_{l,m} + \phi_{l-1,m}) + (\phi_{l,m+1} - 2\phi_{l,m} + \phi_{l,m-1}) \\ = -\rho_{l,m} \frac{\Delta^2}{\varepsilon_2} \end{aligned}$

Δ² は空間格子である。式(3.10)は連立一次方程式 の形に導くことが出来る。

4. 高速化技術における数値計算

高速化を目指して数値解法を改良する。

4-1. 改良版シミュレーションコート として用いた解法

計算物理に広く使われている FFT 法を用いたオ リジ カコード に対して、モデルを連立一次方程式とし、 三項対角近似因子分解としての TF 前処理を採り 上げる。基礎反復は CGS 法を適用する。

4-2. 前処理法 [TF法、三項対角近似因子分解法]
 前処理付き反復法を持つ三項対角近似因子分
 解法 (TF Method)、 A は n×nとする。

(4.1) A x = b

行列Aに対してその対角行列を A_D 、×方向の

微分に関する副対角要素から構成される行列を A_x 、同じくy方向の行列を A_y として分離する。 この時の前処理行列は次式(4.2)で定義される。

(4.2)
$$\mathbf{M}_{\mathrm{TF}} = (\mathbf{A}_{\mathrm{D}} + \mathbf{A}_{\mathrm{x}}) \mathbf{A}_{\mathrm{D}}^{-1} (\mathbf{A}_{\mathrm{D}} + \mathbf{A}_{\mathrm{y}})$$

逆行列計算は、計算上各因子毎に行い、例えば ×方向因子は、 $(\mathbf{A}_{D} + \mathbf{A}_{x})\mathbf{v} = \mathbf{g}$ の形をとり、 これは×方向の連立した \mathbf{n}_{y} 本の独立した \mathbf{n}_{x} 元の連立一次方程式となり、前進後退代入は相 互の行の参照関係がない為、、 かい化が出来る。 y方向の場合も同じである。

一般的な IC 及び ILU 前処理法に対する並列性 は、計算パート のゲリット ポイントが斜め方向並列計算 として進む事が知られている。(Fig.2.参照) DOI-HARADA 流に見る TF 前処理法に対する並 列性は、計算のパート のゲリット ポイントが × 方向並列 計算として進む。(Fig.3.参照)



Fig.2. Parallelism for ILU Preconditioner.

Fig.3. Parallelism for TF Preconditioner.

4-3. 基礎反復 [CGS 法] (Conjugate Gradient Squard Method) 自乗共役勾配法
式(4.1)に対して、双対な方程式を組み合わせた
2n元連立一次方程式を次に定義する。

$$\widetilde{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}^{\mathrm{t}} \end{bmatrix}, \quad \widetilde{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} \mathbf{X} \\ \mathbf{x}^{*} \end{bmatrix}, \quad \widetilde{\mathbf{b}} = \begin{bmatrix} \mathbf{b} \\ \mathbf{b}^{*} \end{bmatrix}$$

(4.3) $\widetilde{\mathbf{A}} \quad \widetilde{\mathbf{x}} = \widetilde{\mathbf{b}}$ 次の停留値を共役勾配法により求める。 (4.4) $F(\widetilde{\mathbf{x}}) = <(\widetilde{\mathbf{x}} - \widehat{\mathbf{x}}), \widetilde{\mathbf{A}}(\widetilde{\mathbf{x}} - \widehat{\mathbf{x}}) >_{\mathbf{H}}$

第 k 回反復後の残差ベクトル \mathbf{r}_k と方向ベクトル \mathbf{p}_k は 初期残差ベクトル \mathbf{r}_0 を用いて

 $\mathbf{r}_{k} = \mathbf{R}_{k}(\mathbf{A})\mathbf{r}_{0}$ 、 $\mathbf{p}_{k} = \mathbf{P}_{k}(\mathbf{A})\mathbf{r}_{0}$ 、新しいやかい $\mathbf{r}_{k} = \mathbf{R}_{k}^{2}(\mathbf{A})\mathbf{r}_{0}$ 、 $\mathbf{p}_{k}^{'} = \mathbf{P}_{k}^{2}(\mathbf{A})\mathbf{r}_{0}$ 、 $\mathbf{r}_{k}^{'} = \mathbf{R}_{k}^{2}(\mathbf{A})\mathbf{r}_{0}$ が小さくなったとき、 $\mathbf{p}_{k}^{'} = \mathbf{P}_{k}^{2}(\mathbf{A})\mathbf{r}_{0}$ は更に小さくなり、この 点で高収束性が期待出来る。

4-4. 前処理付き自乗共役勾配法

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{u}_0$$
, $\mathbf{p}_0 = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{r}_0$, $\mathbf{e}_0 = \mathbf{r}_0$, ;
 $k = 0, 1, 2, \cdots$

 $\frac{\alpha_{k+1} = (\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_k) / (\mathbf{r}_0, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)}{\alpha_{k+1} = (\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_k) / (\mathbf{r}_0, \mathbf{A}\mathbf{p}_k)}$

 $\mathbf{h}_{k+1} = \mathbf{e}_k - \alpha_{k+1} \mathbf{A} \mathbf{p}_k$ $\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}_k + \alpha_{k+1} \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{e}_k + \mathbf{h}_{k+1})$ $\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_{k+1} \mathbf{A} \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{e}_k + \mathbf{h}_{k+1})$ $\beta_{k+1} = (\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_{k+1}) / (\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_k)$ $\mathbf{e}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_{k+1} \mathbf{h}_{k+1}$ $\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{e}_{k+1} + \beta_{k+1} \mathbf{h}_{k+1}) + \beta_{k+1}^2 \mathbf{p}_k$

4-5. 前処理付き共役残差法の検討 [ILUCR法] 合わせて前処理付き共役残差法においても改良 した点も掲載する。共役残差法では、汎関数と して残差ベクトル \mathbf{r} の関数 $\mathbf{F}(\mathbf{r}) = (\mathbf{r}, \mathbf{r})$ を定義 する。特徴として \mathbf{A} の対称部 $\mathbf{S} = (\mathbf{A} + \mathbf{A}^{t})/2$ が正定値となる必要条件がある。前処理として ILU 法を用いた ILUCR 法を適用した。

5.マクロスケール粒子コード数値シミュレー ションの比較

5-1. 数值シミュレーション状況

オリジナル版の FFT 法、改良版 1, TFCGS 法、 改良版 2, ILUCR 法による数値シミュレーション状況比較



p1:FFT,24,384sec, p2:TFO3S,4,926sec, p3:ILUCR,5,076sec

Fig.4. Comparative Illustration. 5-2. 同一収束値における数値計算結果比較 計算結果は以下の形となった。(Table 1.参照) 計算機環境: スーパーコンピュータSX5/1CPU、メモリ64GB、 倍精度計算、打ち切り10⁻⁶時点での各解法によ

る比較値を示す。

Table 1. Comparative Table of Computational Results.

	Original	Improved	Improved
	Version	Version1	Version2
	FFT	TFCGS	ILUCR
Vectorized ratio(%)	69.8	87.9	87.4
Elapse time	6H46m24s	1H22m06s	1H24m36s

6 . 結言

非線形プラズマ現象であるマクロスケール粒 子コードは、周期境界条件の特徴により、従来 から FFT の適用が定着している。連立一次方程 式として構成し、前処理付き共役勾配法にする ことで、シミュレーションコード全体の実行時間においてオリ ジ 11版に対して、改良版1では約4.95 倍の高速結 果が得られ、改良版2では約4.80倍であった。 利 ジ 11版では十分に手の付けられていない箇所に対 して、改良版では各ルーチンに対してベクトル化率向 上の為のチューニングを施している。新旧の解法を同 一条件で比較していない問題点はあるが、モデ ルを大規模連立一次方程式とした時、高速計算 を目指す上で TF 前処理法は優れていると言える。 今回は現在の計算機の限界能力を考慮し、適切 な時間内での計算可能なモデルとしたが、現象 を細部に見るには、メッシュを一層細かくした 大規模計算が必要とされる。今後、更に格段に 優れた高速計算機の出現を期待したい。

参考文献

[1] C.K. Birdsall and A.B. Langdon, Plasma Physics via Computer Simulation, McGraw-Hill, New York, 1985.

[2] Katsuyoshi Sotani, A Fast Numerical Solution of Neutron Diffusion Equation,

^r The First International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications J SNA'90. Japan Atomic Energy Research Institute, Nuclear Energy Data Center, 1990.

[3] M.Tanaka, S.Murakami and T.Sato, Macroscale Implicit Electromagnetic Particle Simulation of Inhomogeneous and Magnetized in Multi-Dimensions, NIFS-91, Jun, 1991.