平成 20 年度国立天文台天文シミュレーションプロジェクト成果報告書

プラズマ核融合シミュレーションのベンチマークコード開発

坂上仁志 (核融合科学研究所)

利用カテゴリ　XT4S ・ SX9A

大規模な計算機システムの性能を評価する尺度としては，LINPACK を用いた TOP500 が有名であるが，LINPACK は CPU の純粋な演算能力を計測することに偏向しており，総合的な並列計算機の実効性能は評価できない．このため，LINPACK による性能と実際のシミュレーションコードを実行したときに得られる性能とは，一般に大きくかけ離れている．このような LINPACK による評価の弊害を避けるため，HPC Challenge(ICL,US)，SSP ベンチマーク (NERSC,US)，Teraflop Workbench(HLRS,DE) 等の新しい指標を作成する種々の試みがある．しかし，これらはプラズマ・核融合分野を重点的には扱っておらず，この分野における典型的な指標としては不十分である．そこで，我が国におけるプラズマ・核融合科学シミュレーションにおいて，総合的に計算機の性能を評価できるベンチマークスイート，Performance Analysis Suite for PLasma-fUsion Simulation (PAS+，パスプラス) を整備した．PAS+では，網羅的な性能評価を実現するために，本研究所だけではなく広く大学・研究機関等で利用されているこの分野における実用的なシミュレーションコードのうち，MPI を用いて分散メモリ向けに並列化されたもの，OpenMP または自動並列化により共有メモリ向けに並列化されたもの及び MPI+OpenMP または自動並列化により分散・共有メモリ向けにハイブリッド並列化されたものを対象とした．

PAS+として，現在までに整備したベンチマークコードの一覧を下表に示す．

分野	共有並列	分散並列	ハイブリッド
流体MHD		ｉｍｐａｃｔ－３ｄ	ｇｋｖｌ
粒子	ｅｓｐｉｃ３ｄ	ｃｙｌ－ｒ１	
モンテカルロ		ｄｃｏｍ	ｆｏｒｔｅｃ３ｄ
ＭＤ		ｍｄ３	
平衡計算			ｈｉｎｔ２
ＦＦＴ		ｎｓｆｆｔ３ｄ	

また，各コードの作成者と概要は以下の通りである．

- ｉｍｐａｃｔ－３ｄ
  - 坂上仁志（核融合科学研究所シミュレーション科学研究部）
  - カーテシアン系における 3 次元圧縮性非粘性流体方程式を TVD 法を用いて解いており，レーザー核融合の爆縮過程における流体運動の計算に使われている．３次元配列の z 方向のみをプロセッサ数で分散している．
- ｇｋｖｌ
  - 渡邉智彦（核融合科学研究所シミュレーション科学研究部）

- 粒子速度分布関数の時間発展を５次元位相空間において追跡する．実空間および速度空間の微分には差分近似（四次中心差分または五次風上差分），時間積分は四次 Runge-Kutta-Gill 法を用いている．

- ｅｓｐｉｃ３ｄ
  - 石黒静児（核融合科学研究所シミュレーション科学研究部）
  - 3 次元静電プラズマ PIC シミュレーションコードであり，z 方向の外部磁場および周期境界条件を用いている．パラメータ変更によって 3 成分以上のプラズマシミュレーションにも対応している．

- ｃｙｌ－ｒ１
  - 内藤裕志（山口大学大学院理工学研究科）
  - 円筒モデル半径方向１次元の PIC コードである．円筒表面では電位ゼロを仮定し，円筒表面での粒子の境界条件は完全反射としている．応用例として，負イオン計測に関連した光脱離電子のシミュレーションがある．

- ｄｃｏｍ
  - 村上定義（京都大学工学研究科原子核工学専攻）
  - 磁気面座標 (Boozer 座標) において荷電粒子軌道を追跡し，新古典粒子拡散係数を算出する．

- ｆｏｒｔｅｃ３ｄ
  - 佐竹真介（核融合科学研究所理論・データ解析研究系）
  - モンテカルロ法をもちいたクーロン衝突項の計算，ルンゲ・クッタ法による荷電粒子軌道の計算を行っている．また，乱数発生には Mersenne-twister 法を用いている．

- ｍｄ３
  - 田中基彦（核融合科学研究所連携研究推進センター）
  - 帯電した粒子系（イオン，電子）について分子動力学法で計算を行い時間発展を求めている．クーロン力とレナード・ジョーンズ力（コア間斥力）を使用しており，直接粒子間力を計算しているため２体衝突効果が正しく取り入れられている．

- ｈｉｎｔ２
  - 鈴木康浩（核融合科学研究所理論・データ解析研究系）
  - まず，計算グリッド点からスタートした磁力線上の平均圧力を求める．磁力線方程式の積分は 8 段 6 次ルンゲクッタ法，任意の点の磁場ベクトル，圧力は 4 次精度補間により求められる．次に，散逸 MHD 方程式の時間発展を計算する．

空間微分は 4 次精度の中心差分公式で近似し，時間積分は 4 次精度のルンゲクッタ法で解く．磁場ベクトル，速度ベクトル，圧力は回転ヘリカル座標系とよばれる非直交一般座標系上で表される．

- ｎｓｆｆｔ３ｄ
  - 後藤俊幸（名古屋工業大学大学院ながれ領域）
  - $N = 2^m$ の 3 次元 FFT の逆変換，変換を複数 (iloopmax) 回行なう．

PAS+を XT4 システムで実行した結果の例として，impact-3 の結果を図１ (a) に，gkvl の結果を図１ (b) に示す．横軸は PE の数であり，縦軸は NEC SX-8 の 1 プロセッサにおける実行時間を基準とした並列性能である．また，同じ PE 数でも，1 ノード当りに起動するプロセス数を 1，2，4 と変更して実行した．PE 数を 100 とすると，ノード当りに 1 プロセスしか起動しない場合は 100 ノードを使っていることになり，4 プロセス起動する場合は 25 ノードを使っていることになる．両ベンチマークコード共，並列性能については，まずまずのスケーラビリティを示している．しかし，impact-3d ではノード当りのプロセス起動数による差は小さいが，gkvl ではプロセス数の増加に伴って性能が低下している．これは，gkvl の方がメモリバンド幅に対する要求が厳しいことを意味しており，例えば，256 ノードの資源を占有する場合を考えると，ノード当り 4 プロセスを起動して PE 数を 1024 とするより，2 プロセスを起動して PE 数を 512 とする方が，実行時間が短くなることになる．なお，SX-9 については東北大学で実行したため，最終的には国立天文台の SX-9 システムは利用しなかった．

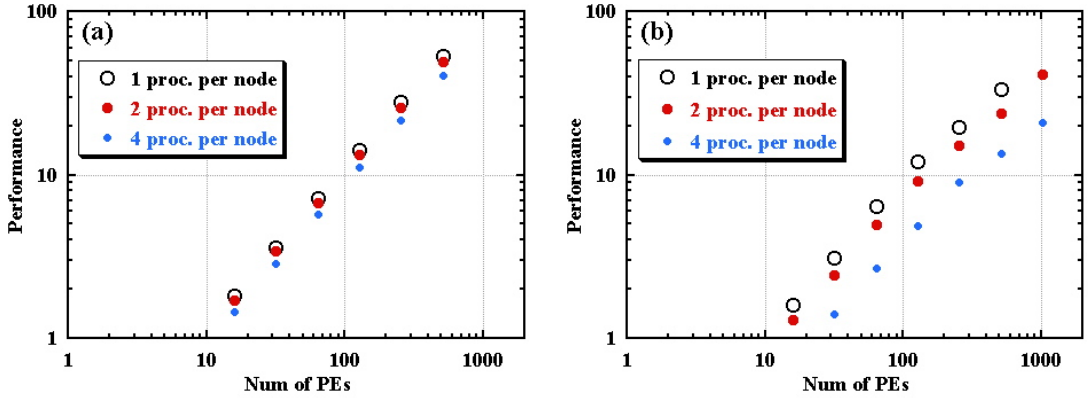

図 1: PAS+の実行結果の例．(a) は impact-3d，(b) は gkvl である．なお，性能は，NEC SX-8 の 1 プロセッサでの実行時間を 1 としている．

PAS+で整備したベンチマークコード群や実際に各サイトで実行した結果は，特別な事情がない限り，入手を希望する者に対して以下の URL で公開している．国立天文台 XT4 システムの結果についても，詳細は以下を参照のこと．

- http://www.dss.nifs.ac.jp/sakagami/PAS+/