The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

| | |
|---|---|
| Title | レーザープラズマシミュレーションとHPC |
| Author(s) | 長友, 英夫 |
| Citation | サイバーメディアHPCジャーナル. 2011, 1, p. 5-7 |
| Version Type | VoR |
| URL | https://doi.org/10.18910/70441 |
| rights | |
| Note | |

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

# レーザープラズマシミュレーションと HPC

長友 英夫
大阪大学 レーザーエネルギー学研究センター

大阪大学レーザーエネルギー学研究センター（以下、レーザー研）では、主に大型の超高強度レーザーを用いてレーザー核融合、宇宙・惑星科学、超高圧物性科学、超高強度科学分野などに関連する多様な研究が行われており、HPC を用いたシミュレーション研究もその一翼を担っている。特に、シミュレーションによる現象の解明、実験設計、解析などニーズは多く、長い歴史もある。ユーザーはシミュレーション研究を専門とする者だけではなく、実験を主とする教員・研究者、学生、共同研究者など幅広い。

物質に高強度レーザーを照射した場合、物質はプラズマ化するが、レーザー強度、物質、現象の時間・空間的な振る舞いなどによって支配的な挙動が異なることから、様々な種類の解析が必要である。当然、解析に応じて異なる計算手法が用いられており、その手法によって HPC の利用形態も異なる。また、シミュレーションによる研究には、共同研究、教育に関する要素も含まれており、これらを効率的に実行できるコンピュータ環境が必要である。また、単に計算するだけでなく、データ解析処理などシミュレーション研究者以外のニーズも増えている。ここでは、レーザー研における代表的なシミュレーション手法例を紹介し、それを踏まえたサイバーメディアセンター(以下、CMC)を中心とする HPC の役割について紹介する。

照射するレーザーの照射強度がそれほど高強度でない場合は、発生するプラズマの速度はマクスウェル分布として近似することができ、マクロ的な、いわゆる（プラズマ）流体近似として扱われる。この場合は一般的な流体シミュレーション手法を応用することが可能でベクトル・並列計算のスーパーコンピュータを有効活用することができる。ただし、同じ流体であっても、プラズマの空間広がりや衝撃波の詳細な挙動解析など、目的によっては計算格子を固定するオイラー手法から格子を移動させるラグランジュ的手法など多彩である。さらに、輻射輸送、熱伝導、レーザー光線追跡・吸収、物質依存の状態方程式などの様々な数値モデルやデータテーブル参照なども含まれることからシミュレーションコードは大変複雑になっている。

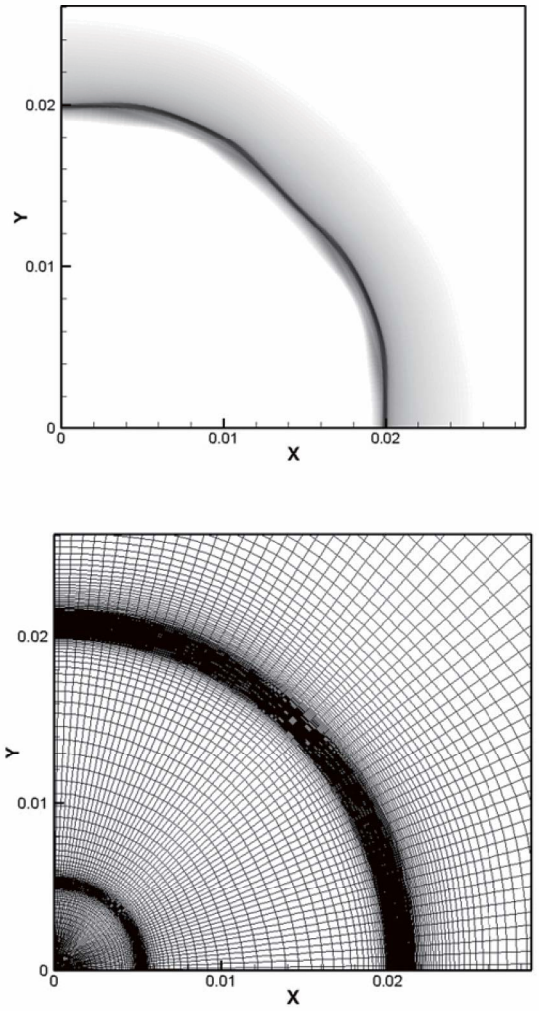


図 1 : 輻射流体コードを用いたレーザープラズマシミュレーション例。レーザー照射によって加速したターゲット（上）を、計算格子（下）を時々刻々移動させながら、計算時間を進めている。

多くのアルゴリズムはベクトル化が可能で CMC のベクトルマシン（SX-8R、SX-9）を活用している。特に、電子・イオン熱伝導、および多群拡散近似化した輻射輸送解析では多くの拡散方程式を解いているため、領域分割して並列化計算を行うより大きな共有メモリで、ベクトル化演算させると大変効率よく解くことができる。また、新たな数値モデルを追加した場合でも、ほとんど再チューニングすることなくマシン本来の高い性能を生かすことができるのも大きな利点である。これはレーザー研で必要なコード開発に限らず、多くの発展途上のコード開発にとっては非常に重要な利点であり、コードチューニングの専門家が少ない大学、研究室レベルでは開発環境・マシンの選択理由になるのではないかと思う。

一方、レーザーが発生する極めて強い電磁場によって運動が支配される粒子（電子、イオン）のミクロな挙動は、流体近似では扱えなくなる。そのため、粒子に係る力から個々の粒子の運動を直接計算で求める電磁粒子(PIC: Particle-in-Cell)法に基づくコードが用いられる。一般に PIC 法では、解析精度を向上させるためには粒子数を大きくする必要があり、できる限り大きなメモリ領域を確保する必要がある。ベクトル化による性能向上よりも並列度を上げることに重点を置いて PC クラスターマシン（以下、PCC）を利用することが多い。

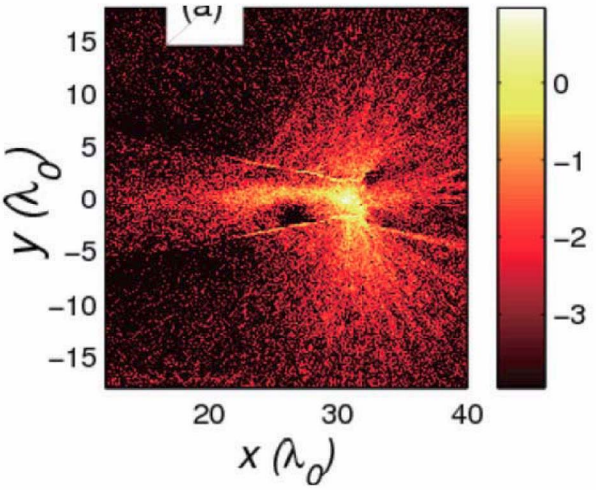


図 2：PIC 法によるシミュレーション例。超高強度レーザーが左から入射されている。各点が粒子（電子）の分布を表していて運動量、電荷などの情報を持っている。さらに、全空間で電磁場を解いている。

これ以外にも、フォッカー・プランク方程式、分子動力学、モンテカルロ法に基づく手法なども用いられていて、ユーザーにとっては適切なマシンの選択が難しい。レーザー研では、利用申請時に計算機室が中心となって、計算規模、手法に応じて CMC の HPC システムかレーザー研内のワークステーション等への利用を勧めている。多様化するコンピュータ環境を効率よく活用するために、このような活動もユーザーサポートの観点では重要である。

様々な解析を追究すると単一のシミュレーションコードでは取り扱えない課題もある。レーザープラズマでも、多階層、マルチフィジックスで取り扱わなければいけない場合もあり、その場合は前述した輻射流体コードや PIC コードを複数のマシン、ジョブで実行、連動させる統合シミュレーションを試験的に CMC で実施させていただいた。ジョブ管理、データ転送などの課題が残されているものの複数コードを連動させる可能性を示すことができた。

現状で、ユーザーにとって最大の問題の一つはコード開発環境である。利用しているシミュレーションコードのほとんどは独自に開発したコードで、市販されているコードはほとんど利用されていない。また、学生や共同研究者も利用することから、随時モデルの追加、修正をしながら発展を続けている。コード開発において非常に困難な作業としてコードのデバックがある。通常は PC あるいはワークステーションで開発したコードを HPC マシンに移し大規模シミュレーションを実施するが、シミュレーション条件によっては単に計算スケールを拡大だけでもトラブルの要因になりうる。MPI 等で並列化したコードを PCC で実行させた場合のコードディバッキングは特に難しい。標準で出力されるエラーメッセージだけではエラーの主因を把握できない場合が多い。ユーザーが色々と原因を追究しても解決できず、結局のところ通信系などのハードウェア障害であったり、ジョブ管理システムのメモリ管理不備などユーザーからは直接把握できない要因でジョブが障害を受けることも多々ある。SX で計算を行っている限りはこのようなトラブルはほぼ皆無であり、時間と労力の節約になる。PCC は発展途上ということ

もあるが、ユーザーフレンドリーなシステムに改善していかないと利用者が離れてしまう恐れがある。異なるアーキテクチャーのマシンを限られたスタッフで管理することには限界があるのも確かであるので、例えば、CMC では主マシンのアーキテクチャーを限定し、他のアーキテクチャーの利用に関しては他機関と協力して相互利用できる環境を整えるなどの管理面も考慮したシステムを構築することが、結果として管理者、ユーザー双方の利便性向上に役立つのではないだろうか。

一方、今後のマシンのさらなる高性能・大規模化は、利用者にとっては、計算環境の最適な選択を行う必要があるとともに、増大する計算結果のデータ処理環境の整備も重要になる。データのポストプロセスも含めた計算結果の再現性確立、重複や類似した大規模計算の回避、データ共有のためのきめ細かい権限設定、検索機能強化などは今後必要性が増すと予想している。レーザー研では、昨年の実験データ解析システム更新時に、従来の市販データベースを用いた実験データベースシステムを一新し、カスタム設定に長けているシステムを導入した。これによって、実験研究者が実験データ解析とシームレスにシミュレーション解析を行えるような環境を構築することを目指している。今後も HPC のニーズは、多彩で変化も急であると思われるが、CMC の利用、協力を強化しながら研究を進めていきたい。