

レーザー研における数値シミュレーション研究と大型計算機

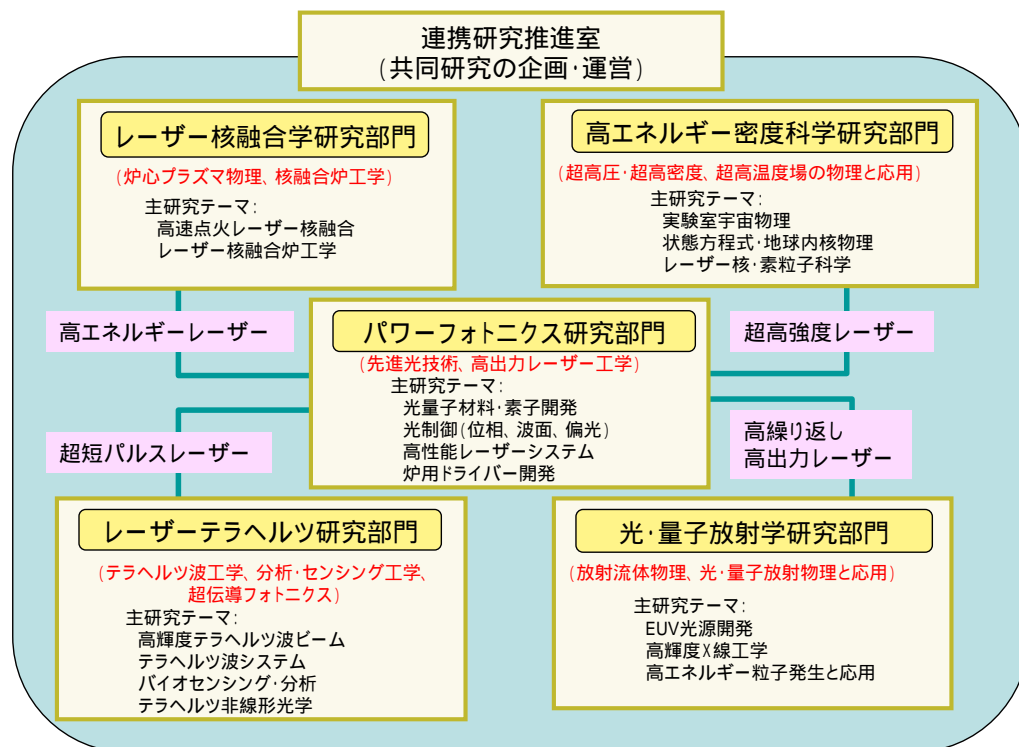


アウトライン

- ・レーザー研における研究概要
- ・数値シミュレーション例
- ・計算機環境
- ・計算機利用の現状
- ・次期システムや運用に関する要望

阪大レーザー研 長友英夫
理論・シミュレーショングループ、計算機室

大阪大学レーザーエネルギー学研究センターの研究組織



ペタワットレーザー



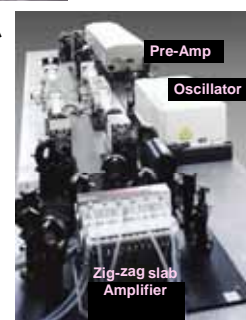
激光XII号レーザー装置



球対称照射システム 一方向照射システム



激光MII号レーザー装置

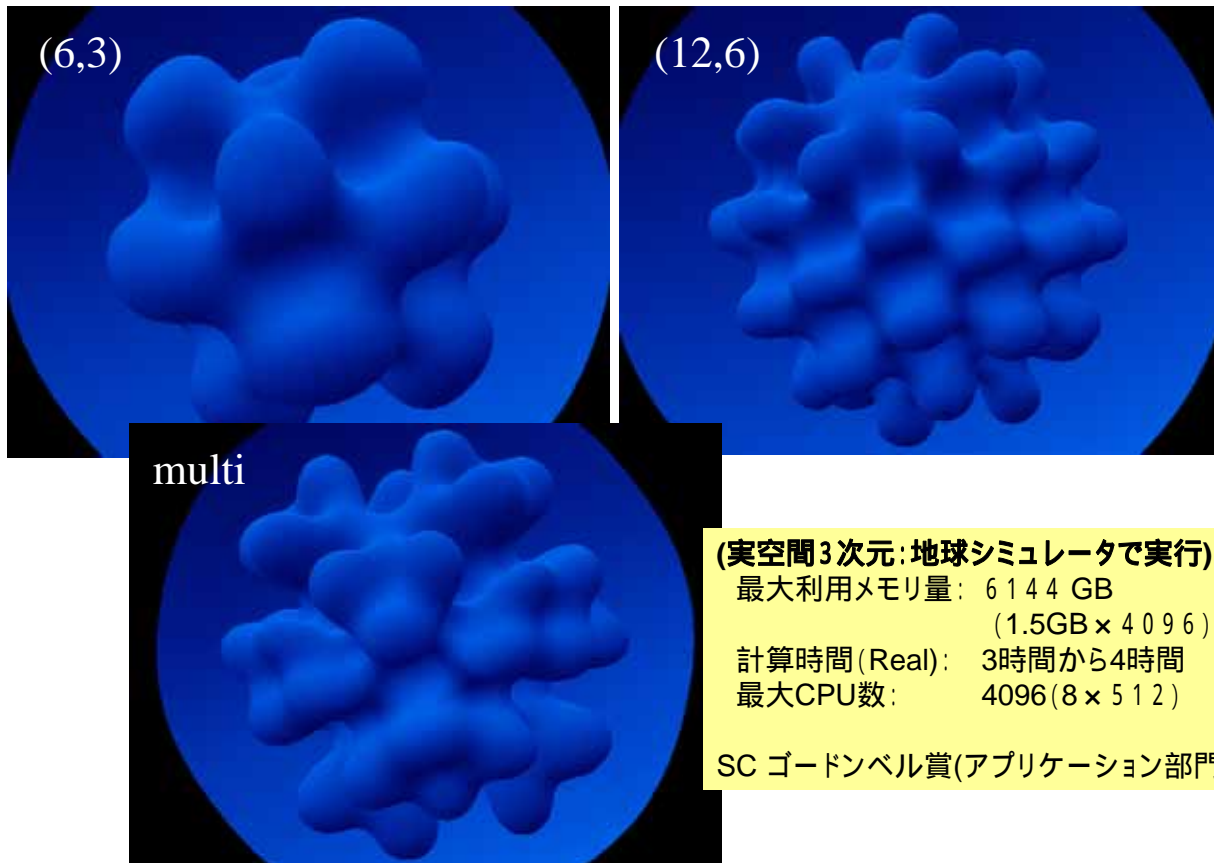


HALNA 10

計算を用いた研究内容

- **レーザープラズマ物理、流体物理、光源開発**
 - 粒子コード Maxell方程式など
 - 電子、粒子の運動論運動論 フォッカー・プランクコードなど
 - 輻射輸送 拡散方程式など
 - 原子過程
 - 流体運動 双曲形方程式
 - 輻射流体 双曲形方程式、拡散方程式などの組み合わせ
- **レーザー物理**
 - 光線追跡
 - 波動方程式
 - ヘルムホルツ方程式

3次元爆縮系におけるレーリー・テイラー不安定性



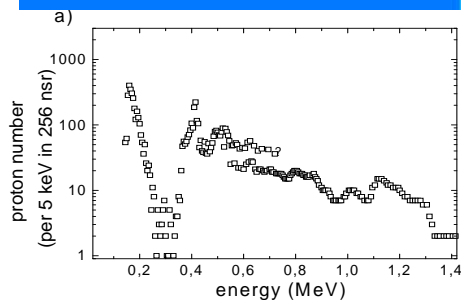
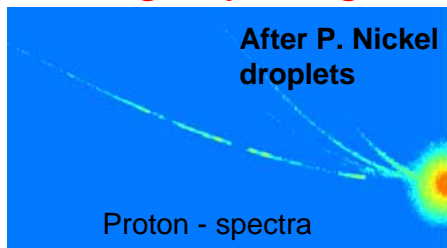
流体コード、磁気流体コード

- IMPACT3Dなど3Dコード
- [現行マシン] SX5,6,8 1-16CPU 数十GB 数日~地球シミュレーター
- 自動並列、OpenMP、HPF
- [今後必要なマシン] > 5TFlops

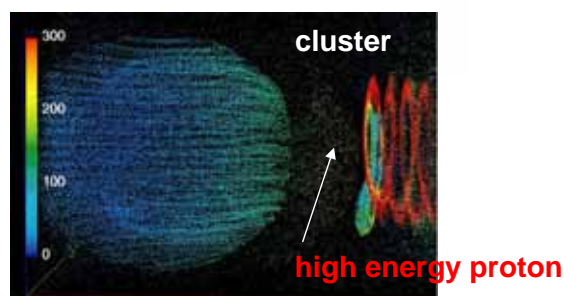
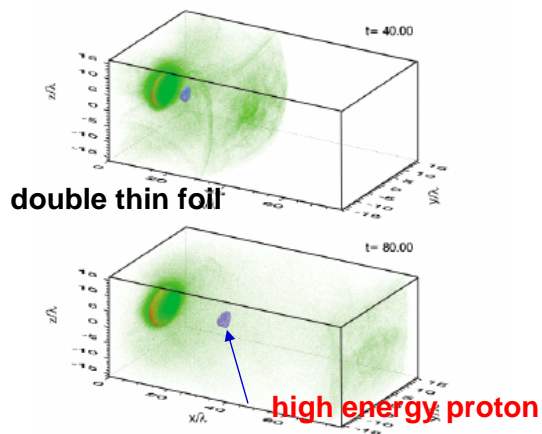
- 3-D磁気流体コード
- [現行マシン]
SX8, 4CPU, 10GB, 500時間
Fujitsu VPP5000; 大メモリーが使えるから。コードがVPP Fortranで並列化してあるから。
- [今後必要なマシン] 100GB, 1TFLOPS

Ultra intense laser interaction with various types of targets for high energy proton acceleration (MeV to GeV)

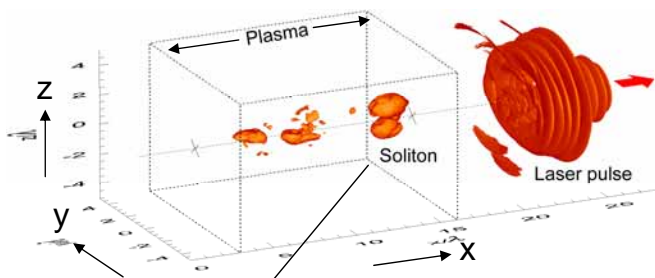
mono-energetic proton generation



最大利用メモリ量: 0.5TB
 計算時間 (Real): 300時間
 CPU数: 32
 CPU SX5

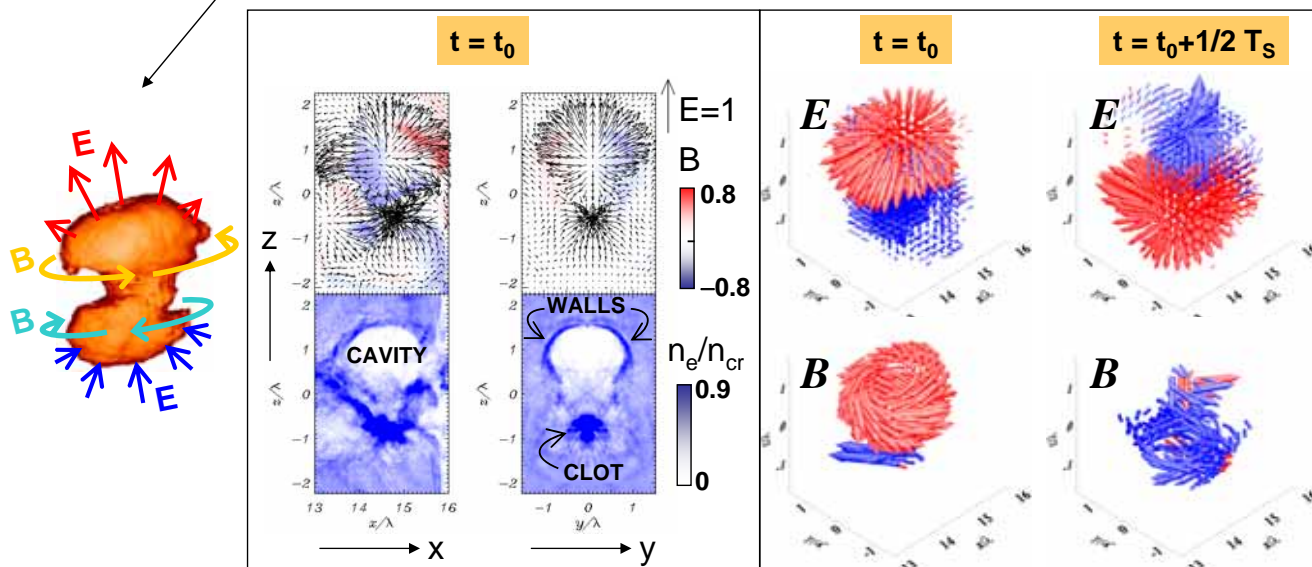


3D Relativistic Electromagnetic Sub-Cycle Soliton in the Laser Plasma

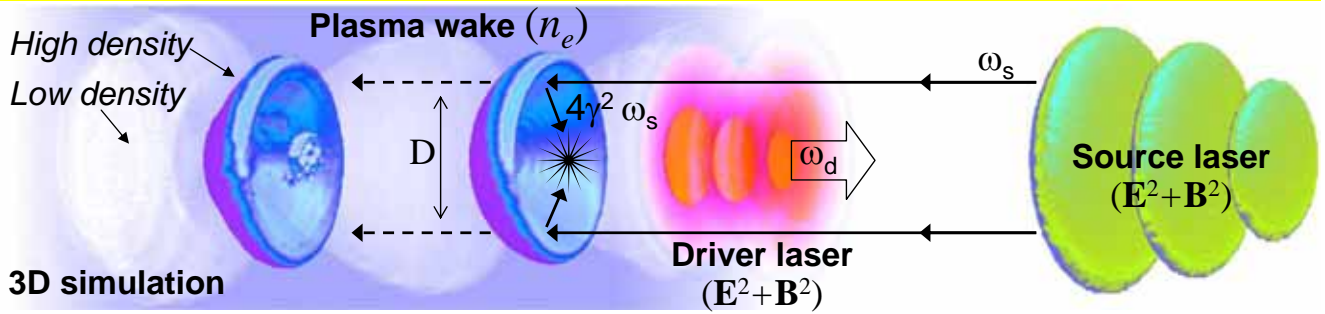


Grid: 660×400×400.
 Quasi-particles: 4.3×10^8 .
 Mem: 30 GB. Disk: 100 GB. CPU: 16.
 Real time: 45 hrs. Comp: NEC SX5.

T.Esirkepov, K.Nishihara, S.V.Bulanov, F.Pegoraro,
 Phys. Rev. Lett., Vol. 89, No. 27, p. 275002 (2002).

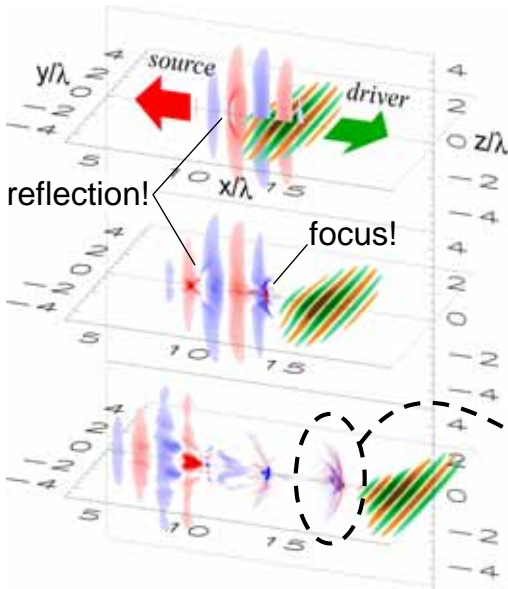


Light Intensification by the Flying Mirror in the Plasma Wake Filled



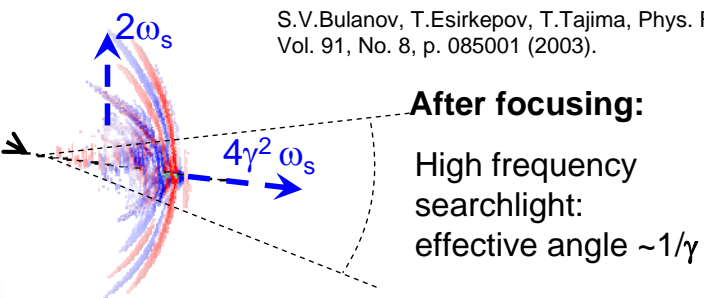
Reflection coefficient $\kappa \approx (1/2) (\omega_d/\omega_s)^2 \gamma^{-3}$

Intensification $_{foc}/I_s \approx 32 (\omega_d/\omega_s)^2 (D/\lambda_s)^2 \gamma^3 !$



Grid: 2200×1950×1920. **Quasi-particles:** 10^{10} .
Mem: 1.1 TB. **Disk:** 2 TB. **CPU:** 720.
Real time: 250 hrs. **Comp:** HP Alpha Server ES40.
Huge resolution required due to $4\gamma^2$ freq. upshift.

S.V.Bulanov, T.Esirkepov, T.Tajima, Phys. Rev. Lett., Vol. 91, No. 8, p. 085001 (2003).



PIC (粒子コード)

REMP 3D

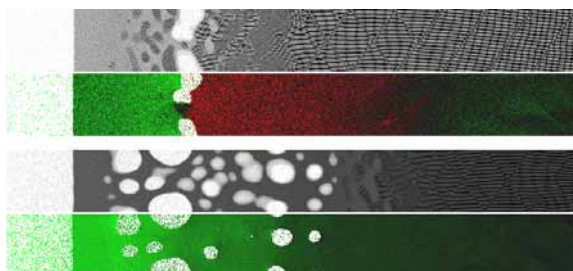
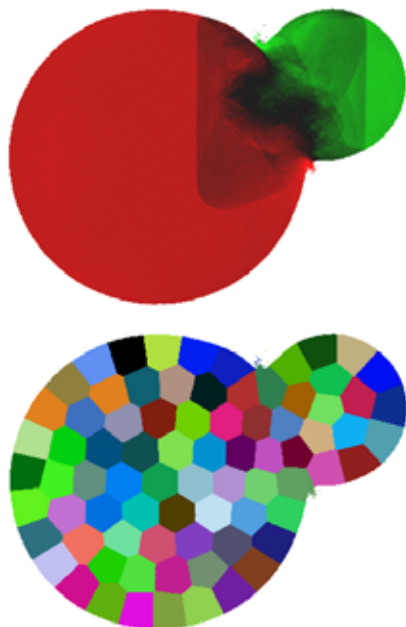
- [現行マシン] SX5 4 CPU 60GB 1日
- [今後必要なマシン] 10TFlops

FISCOF2

- ITBL, Primepower, 16CPU, 72時間
- スカラーマシンのほうが早く、大メモリーを使えるため。
- メモリーが多いほどうれしい。早くて、安定したパラレルマシン。

A New Dynamic Domain Decomposition Method for Parallel Molecular Dynamics Simulation

Maps of velocity (top) and well-balanced CPU distribution/decomposition in MD simulation of high speed collision of two crystal bodies.



Maps of atom density (grey) and velocity (color) in MD simulation of laser ablation of crystal at different surface temperatures (top pair of pictures show ablation near threshold).

最大利用メモリ量:
計算時間 (Real): 300時間
CPU数: 32 ~ 720
CPU SX5 & SX7 (GRID環境)
Compaq super computer

分子動力学

- [現行マシン] Alpha 833MHz 720CPU 数十GB 数週間。原研 AlphaServer SCシステム; コードはベクターとスカラーのどちらでも問題ないが、同時に多くのCPU(flops)が必要である。CPU数以上のjobを投入するスケジューリング(CMC/ILE SX)だと、MPIなどの並列コードでは効率がとても悪くなるため。
- [今後必要なマシン] 100 ~ 1000TFlops (huge PC Clusterのような数千、数万CPUクラス)、メモリは少なくてよい

レーザー核融合の統合爆縮シミュレーション

～多次元輻射流体シミュレーション～

燃料シェルターゲットに高強度レーザーを照射し爆縮する過程を、輻射流体、レーザー光線追跡、物質追跡、テーブル参照の状態方程式などレーザー核融合で求められる様々な物理モデルを組み込んだシミュレーションコードを用いて解析している。特に、輻射輸送が重要で多群拡散近似した輻射エネルギー方程式群を解く。

(米国のASCIプロジェクトでは、このような輻射輸送コードを解くのが主目的の一つである。)

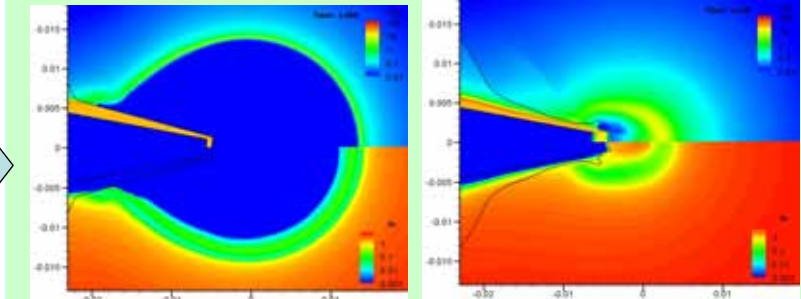
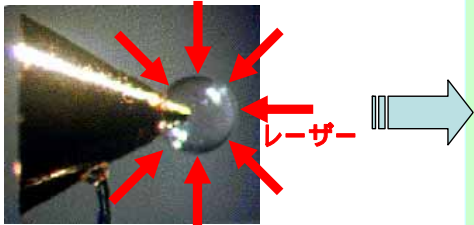


図. レーザー照射による爆縮によって、高密度(固体密度の数百倍)が形成される様子。

現在行われている計算(空間2次元:主にSX-5で実行):

空間格子点数: 400x300 (x32 輻射エネルギー空間)
最大利用メモリ量: 1GB
計算時間: 180h (x4cpu)

今後予定している計算(空間3次元):

空間格子点数: 400x300x50 (x32 輻射エネルギー空間)
最大利用メモリ量: 50-100GB

レーザープラズマコード(1)

1次元統合爆縮コード

- [現行マシン] SX5,6,8 1CPU 数10MB 数分-1時間
- [今後必要なマシン] ソースコードが複雑でマシン毎にチューニング、デバッグ、検証する必要があり管理が非常に難しい。現行コードがそのまま動くことが望ましい。

1次元輻射流体コードStar-1D

- [現行マシン] SX5 4CPU 50時間(Star-1D)
- [今後必要なマシン] 今の10倍ほしい

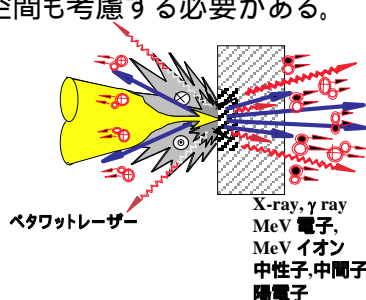
レーザープラズマコード(2)

2次元統合爆縮コード(PINOCO)

- [現行マシン] SX5,6,8 4-8CPU 数100MB~数GB
1日~数週間
- [今後必要なマシン]コードが複雑なためできる限りマシン毎のチューニングは避けたい。反復法計算では分散メモリーで計算するとコードチューニング、計算時間がかかるので1CPU当たり高性能な共有メモリーのマシンが必要。
3次元化を考慮するとメモリーは、100GB以上共有で使えることが望ましい。(HPFで試作中)

超高強度レーザープラズマ相互作用で発生した 相対論高速電子の輸送の解析

超高強度レーザー($1 \times 10^{18} \text{W/cm}^2$ 以上)を物質に照射した場合、レーザープラズマ相互作用によって電子は超高速に加速される。この発生した電子の運動のシミュレーションを行う場合電子の速度位相空間も考慮する必要がある。



超高強度レーザーによって様々な粒子が加速される。短時間、高エネルギーの減少であるため計算機シミュレーションによる解析が重要である。

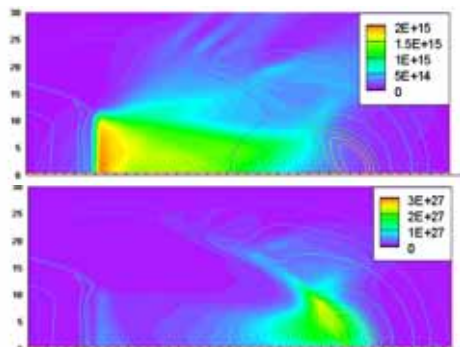


図. 相対論高速電子が高密度(固体密度の数百倍)を加熱する様子

現在行われている計算(実空間2次元:主にSX-5で実行):

空間格子点数: 128 × 256 × 30 × 16 × 16
最大利用メモリー量: 22 GB
計算時間: 120h (x8cpu)

今後予定している計算:

空間格子点数: 256 × 512 × 64 × 16 × 16
最大利用メモリー量: 160GB

フォッカープランクコード

FIBMET "Fusion Ignition and Burn : 2次元Fokker-Planck, 輻射、流体結合コード

- [現行マシン] SX6, SX8
相対論的高速電子輸送: SX5, 8CPU 20 ~ 30GB, 100時間
核燃焼: SX8, 4CPU, 1GB, 100時間
- [今後必要なマシン] 3次元化を考えると、現在の計算資源では実行不可能 早いほどうれしい。メモリーも2桁増加。これが共有メモリーで自動並列可能だとなおうれしい。MPI等の並列化の知識がなくとも高度に自動並列できるとうれしいです。もちろんベクトル計算機

レーザープラズマのFPコード

- [現行マシン] SX-6, SX-8
非常に長時間実行。
- [今後必要なマシン]
1TFLOPS程度(今の10倍ほしい)
未知変数の大きさが12GB = 8byteX(500X500X200)X30変数 = 12Gの計算を行えるメモリーが必要。
FP計算、もしくは輻射流体計算としては、とにかく高速CPU希望!
今のままだと8CPUで実質1000時間の計算になってしまうのを一週間程度で計算できてほしい

複数コードの協調実行・多階層シミュレーション

1. FI³コード

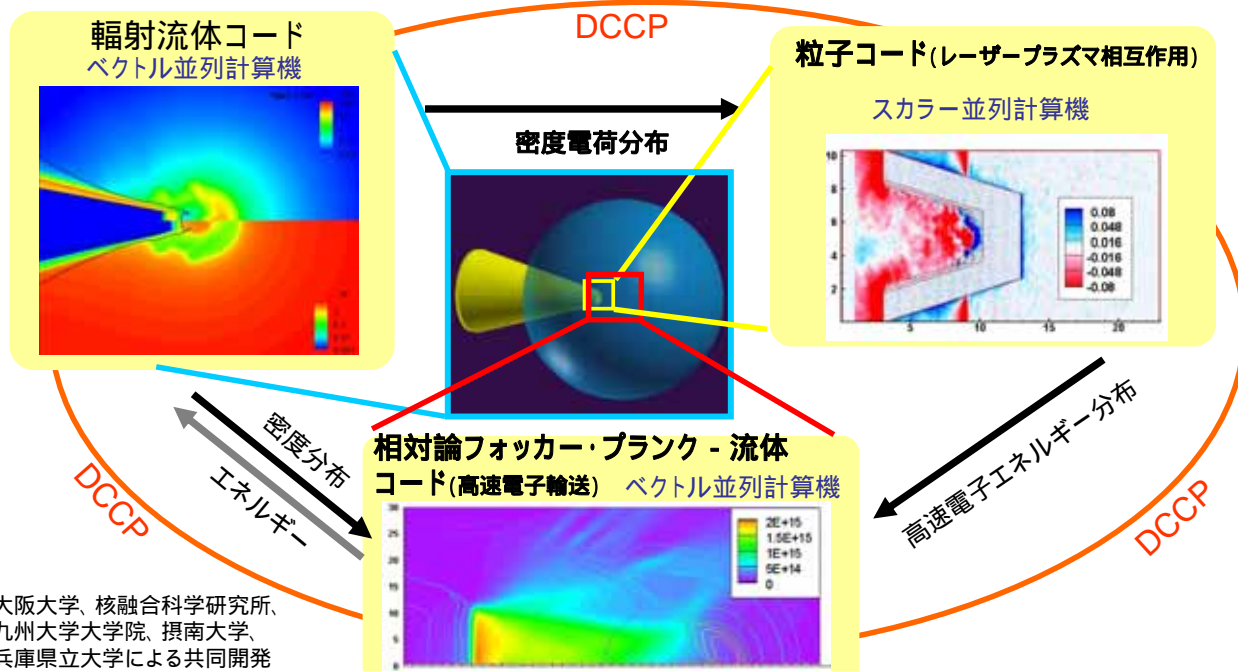
- ・流体コード、フォッカー・プランクコード、PICコードなど時間、空間スケールの異なるシミュレーションを協調実行する。
- ・コード間でデータの授受はネットワークを介す。
- ・各コードは最適なマシン(スカラーor/andベクトル)を利用。

2. 分子動力学コード(GRID利用)

- 超大規模計算のため、計算機の負荷状況を考慮しながら空いている計算機で実行する。

FI³(Fast Ignition Integrated Interconnecting Code)が完成

レーザー核融合の高速点火等、ペタワットレーザープラズマの統合シミュレーションが可能になる

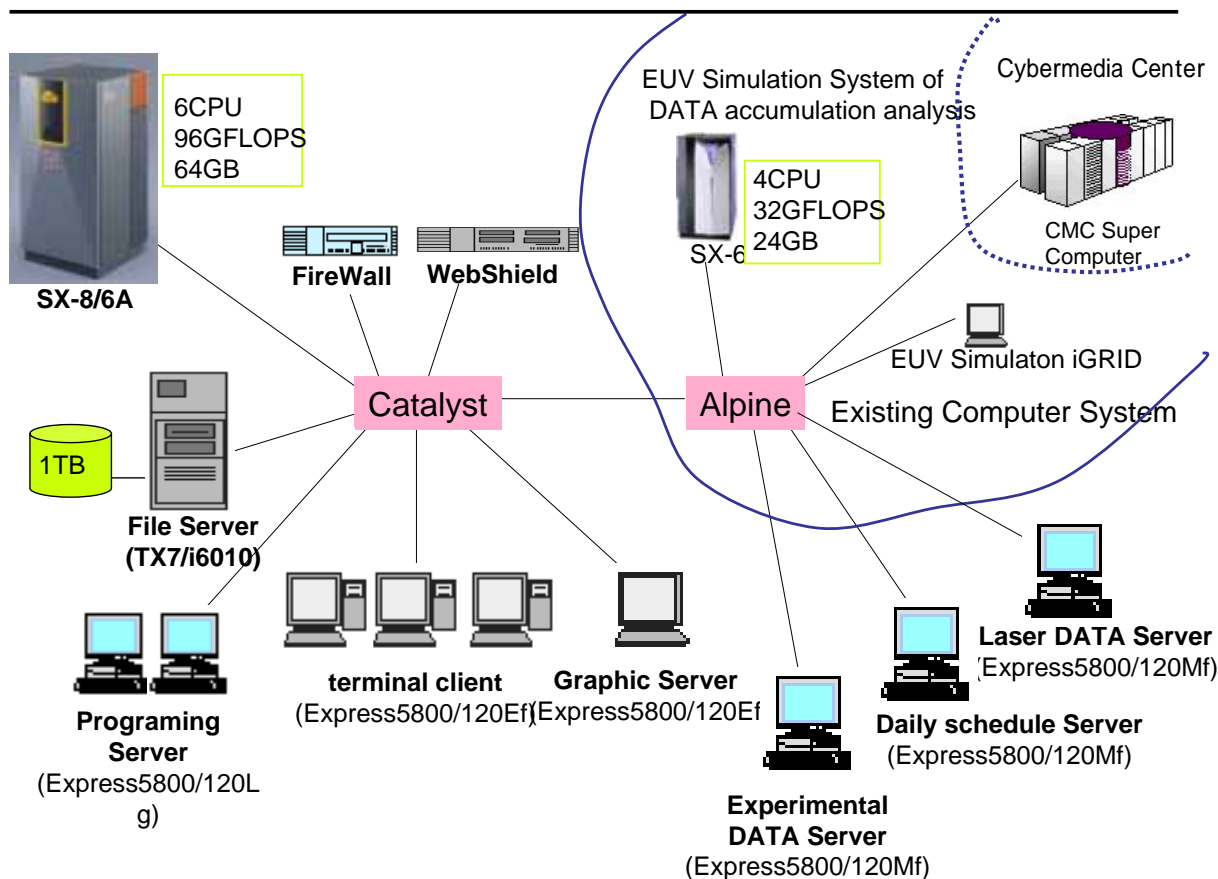


大阪大学、核融合科学研究所、九州大学大学院、摂南大学、兵庫県立大学による共同開発

プラズマの瞬間加熱実験[Nature (Kodama, et al); 0.8keVまで加熱]に対し、0.5keVまでの加熱を確認。今後、乱流モデル、自発電界・磁界による自己組織化の効果を要検討。

2005ヨーロッパ物理学会, Laser Physics '05等でプレナリ・トーク
H.17.6.23報道発表 朝日新聞、日本経済新聞、日刊工業新聞

計算機環境



レーザー研の新システム(NEC SX-8)、HPCチャレンジにて 8部門で1位、13部門で2位達成！ (2005.3.1時点)

新システムメインマシン NEC SX-8/6(6CPU 96GFlops)にて挑戦



HPCチャレンジベンチマーク (<http://icl.cs.utk.edu/hpcc>)

7つのコードによる統合ベンチマークセット

HPC(1項目) : Linpack-HPCと同等

PTRANS(1項目) : 行列の転置

STREAM(8項目) : メモリ性能

Random Access (3項目) : ランダムメモリアクセス性能

Latency、Bandwidth(10項目) : レイテンシ性能

DGEMM(2項目) : 行列積の演算

FFTE(3項目) : FFTの演算性能

CPUあたりでは最速

8項目で2位

2項目で1位

5項目で1位、4項目で2位

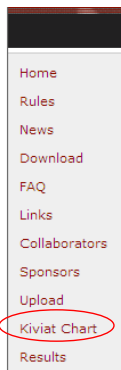
1項目で1位、1項目で2位

計28部門中 8部門1位、13部門2位

ベクトルマシンの心臓であるメモリバンド幅に加え、FFTの演算性能、FCRAM (Fast Cycle RAM)による極低レイテンシが記録更新にカギとなった

Horikoshi, ILE Osaka University

HPCチャレンジのサイトによる指標 Kiviat Chart にて8項目中6項目で1位、2項目で2位！



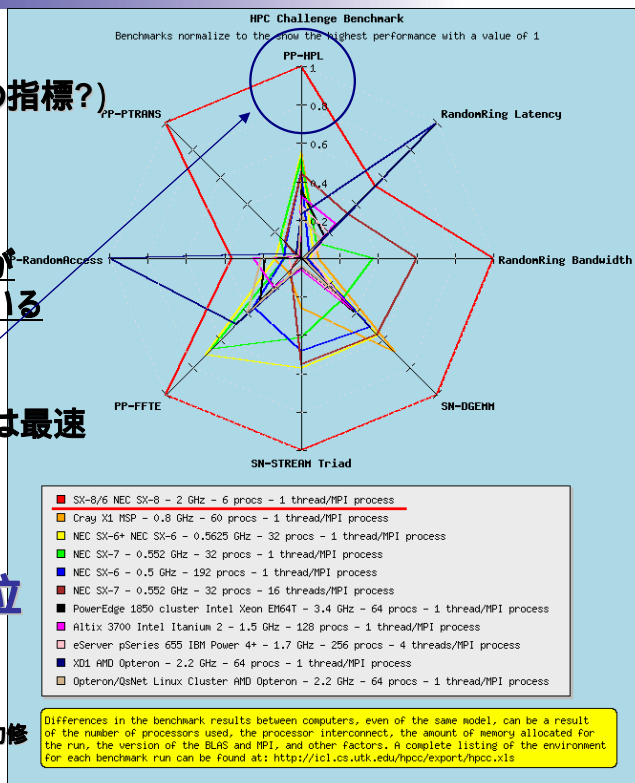
HPCチャレンジサイトによる
Kiviat Chart (統合ベンチマークへの指標?)
<http://icl.cs.utk.edu/hpcc/custom/index.html?lid=93&slid=171>

Linpack等(CPU数多いほど有利)が
CPUあたりのスコアに焼き直されている
(実効性能を重要視してる?)

CPUあたりのLinpackではSX-8は最速



計8項目中6項目で1位、2項目で2位



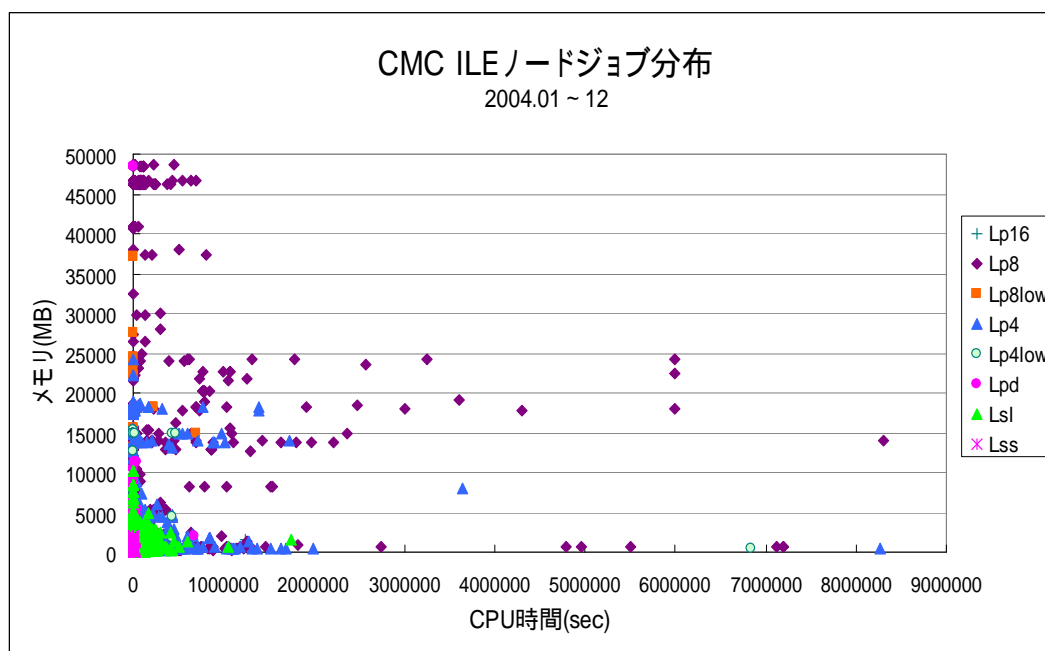
測定チーム: 阪大レーザー研 堀越将司、長友英夫、福田優子、西原功修
協力: NEC

Horikoshi, ILE Osaka University

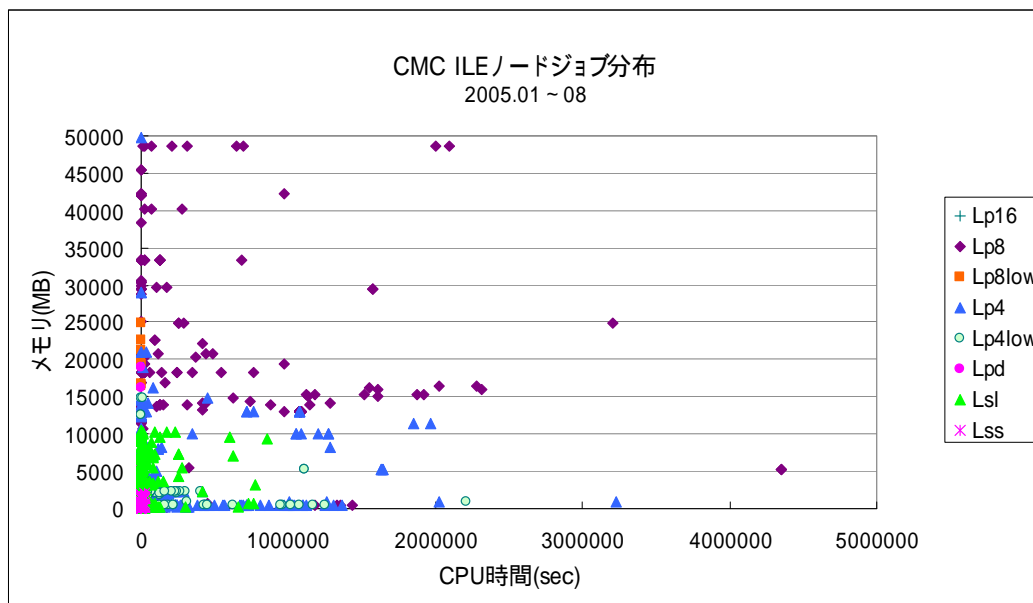
レーザー独自のジョブ管理

- ジョブ時間、メモリーの柔軟な運用
 - 混み具合に応じてキューの制限が変化できればいいがジョブクラスの設定が複雑なる。
キューの制限は緩めにして紳士的なジョブ投入をする。
- ユーザーはすべてお互いの状態を把握できる。
 - 急ぎのジョブは、口頭で連絡。
ホールド、他のマシンへ移動
- システム規模が大きくなったときに対応できるか？

CMC SX-5、ILEノードの負荷状況(2004.1-12)



CMC SX-5、ILEノードの負荷状況(2005.1-8)



2004-05のジョブの状況について

- 50GB程度までのジョブが稼動。
ノード占有ジョブを除くとSX-5の1ノードとしてはほぼ限界だと思われる。
- 比較的長時間ジョブが多い
複雑なコードで、リスタートし難いコードが多い。
- 並列化効率の頭打ち。
4並列程度が効果的な場合が多い。自動並列の限界？(簡単なディレクティブで効率が改善する場合もある。並列化講習会が重要である)

利用状況のまとめ(ベクトル機ユーザー)

- CMC SX-5(160GFLOPS, 128GB), ILE SX-6(32GFLOPS, 24GB), ILE SX-8(96GFLOPS, 64GB) の使い分け。
 - f90, 自動並列(多数), OpenMP(少数), HPF(極少数), C(極少数), C++(極少数)
- その他
 - 核融合科学研究所 SX-7 が利用可能。利用形態の違い(1ジョブmax8時間)、データ転送などを理由に利用率は低い
 - 天文台 VPP コードの都合上 VPPで動かしている。

利用状況のまとめ(スカラー機ユーザー)

- 原研関西研 SCシステム、ITBL Primepower 共同研究、近くの大きなスカラーパラレルマシンだから。
- クラスタ
 - 初期投資で自由に使える。(電気代、管理が意外と大変、トータルコスト?)

データ転送・処理、利用の利便性を考えると、CMCにベクトル機だけでなく、スカラー機も入れて欲しい。

汎用機の活用、他の計算機センターと相互利用はできないのか？ベクトル機の拠点としてのCMCは必要不可欠である。

その他、要望など(大規模計算環境)

- 現行コードはソースコード書き換えなしで、移行できることが理想。(計算機が大きくなっても配列サイズの変更だけで)
自動並列の限界? OpenMP, HPF, MPI などと併用?
講習会、テキストの充実
- データ量は自然に増えるのでそのためのI/O、ディスク、ネットワーク環境の強化。並列I/Oなども。
- 可視化環境の強化。超大規模データ処理システム。持ち帰りのできないデータ処理への対応。データ移動のないシームレスな環境。
- 大規模計算をトータルに最適に実行できるシステムが必要。

次期システムでは、基本的には現状システムのスケールアップを望むが、メインマシンだけでなく周辺システムもそれに付随していかなければいけない。システムの限界が見えているのであればユーザーもそれに備える必要がある。意識改革のための啓蒙活動も必要になってくるだろう。

その他、要望など(ジョブ管理)

- CPU数以上のjobを投入するスケジューリング (CMC/ILE SX)だとアプリの性能評価やチューニングができない、またMPI動作時に不都合が多い。全ノードまでとは言わないが、CPU数以上のjobを投入しないノードがほしい。
- ノードごとのきめ細かいジョブ管理はできないでしょうか。
- スカラーI/Oを多用するプログラムはクラスタ系/PCに集約して欲しい。

その他、要望など(利用環境)

- MPIの講習会をして欲しい。
並列化、ベクトル化講習会は効果が出ている。
- front サーバーについて;
負荷が高くレスポンスの悪い時がある。frontでのプログラム実行の制限をする必要がある。
- VPNの導入
セキュリティ確保と利用環境の向上