ハイパフォーマンス
コンピューティング 74－8
（１９９８．１２．１１）

多次元輻射輸送計算コードの超並列計算機への実装：Multiple Wave Front 法

中本泰史

筑波大学 計算物理学研究センター

概要 輻射輸送方程式を多次元空間内で計算することは計算量が膨大となるため従来は困難であった．しかしこの困難は，大型計算機を利用すれば克服できる．ただし，計算順序には制約がある．この制約の範囲内で実際の超並列計算機を効率的に利用するために，独自の工夫を考案した．この方法では，同じ方向・振動数を計算している PU が PU空間内で波面を構成する．そして異なる方向・振動数を計算する複数のPU波面が全PU空間を覆うことにより，高い並列性が実現される．この方法を我々は，Multiple Wave Front (MWF) 法と呼んでいる．この MWF 法をCP-PACSに実装し，効率的な並列化が実現されることを確認した．

Implementation of a Multi-Dimensional Radiative Transfer Calculation Code onto a Massively Parallel Processors : the Multiple Wave Front Method

Taishi Nakamoto

Center for Computational Physics, University of Tsukuba

Abstract It has been difficult to carry out multi-dimensional radiative transfer calculations, because they demand huge amount of calculations. But the difficulty can be overcome by using large computers, though calculation sequences have to be considered carefully Under the calculation sequence restriction, we have invented a method which enables us to use a massively parallel processor efficiently. A wave front of PUs on which radiative intensities with same direction and frequency are calculated concurrently is formed in a PU-space. And multiple wave fronts with different directions or frequencies cover the entire PU-space. We have implemented the method onto a massively parallel processors, the CP-PACS, and confirmed the method attained high parallelization efficiency.

1. はじめに

輻射とは，電波，赤外線，可視光，紫外線などの電磁波である．宇宙物理学において輻射は，次のような役割を持っている．（１）物質に輻射力を及ぼす：物質の運動状態に直接影響する．（２）エネルギー輸送に寄与する：天体の熱的状態を左右する．また，圧力を通して物質の運動状態に影響を及ぼすこともある．（３）観測手段を提供する：宇宙物理学におけるほとんどすべての情報は，輻射の観測から得られる．ごく少数の例外は，ニュートリノ，隕石，惑星探査機などから得られる情報である．以上のように宇宙物理学において輻射は，非常に基本的で重要な役割を担っている．したがって，輻射輸送を正しく理解することは重要な課題となっている．

ところが一般に，２次元や３次元などの多次元空間内で輻射輸送を正確に解くことは難しい．計算量が膨大となるためである．しかし計算量の問題は，大型計算機を利用することで克服できる．ただし，問題の特性をうまく利用し，計算機の特徴に応じて効率よく計算するための工夫をする必要が

ある．輻射輸送計算の場合には本質的に並列性を内在しているものの，空間内での計算順序に制約がつく．このような特性を持つ問題を，分散メモリを持つ超並列計算機を利用して効率的に計算するためには，(a) 計算順序をどうやって守るか，(b) 計算順序を守りつつ並列化率を如何に上げるか，といった点が問題となる．そのために私達が考案したものが，Multiple Wave Front 法と名付けた方法である．

以下本稿では，輻射輸送方程式の基礎，その基本的解法，多次元空間問題での解法を紹介したのち，それらを超並列計算機に効率よく実装するための工夫としての Multiple Wave Front(MWF)法を紹介する．最後にこのMWF法の効率について考察し実測結果を示す．

2. 輻射輸送方程式とは

以下では輻射を巨視的にとらえる．この場合，輻射を特徴づける物理量は輻射強度 $\boldsymbol{I}$ と呼ばれる量である．輻射強度 $\boldsymbol{I}$ は，空間の位置 (x,y,z) と輻射の伝播の方向 (ϑ,φ) および振動数 ν の6つの独立変数に依存する．すなわち，輻射輸送問題は6次元位相空間上の関数 $\boldsymbol{I}$ を求める問題である．

輻射が伝播するにつれて増幅・減少する状況を記述する方程式は，輻射輸送方程式と呼ばれる．実際の問題では定常解を求めることが必要とされる場合がほとんどであるが，その場合には解くべき方程式は次のように表せる．

$$\frac{dI}{dx} = -\chi(I-S)\ . \tag{1}$$

ここで，x は光線に沿った1次元の座標，χ は吸収係数，S は光源関数である．定常輻射輸送方程式には，次の3つの特徴がある：光線の伝播方向1次元の常微分方程式である，方向と振動数毎に(見かけ上)独立な方程式群である，形式解(積分形)がある．数値計算を行う際には，これらの物理的特徴を踏まえた計算手法を用いることが効率を上げるうえで重要となる．

光子同士は直接相互作用しない．したがって，異なる方向・振動数を持つ輻射強度の計算は独立に実行できる．すなわち，輻射輸送方程式は並列計算可能性を内在している．

3. 基本的な解法

数値計算には標準的な差分法を用いる．式(1)を積分すると次のような形式解が得られる：

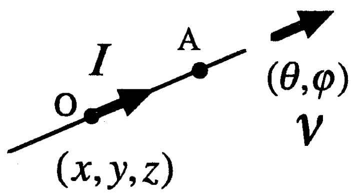

図1

$$I_A = I_O e^{-\tau} + \int_0^{\tau} S(t) e^{t-\tau} dt,\ \ \tau = \int_O^A \chi\, dl. \tag{2}$$

ここで τ は光学的厚さと呼ばれる量であり，2点間OAの長さを光子の平均自由行程を単位にして測った無次元量である．この形式解(2)をもとに空間の離散化を行う．こうすることにより，任意の光学的厚さの状況(透明な場合，不透明な場合，それらが混在している場合など)に対して適用できる差分式が得られる．いくつかの差分化の可能性はあるが，最も単純なものの一つは次のようなものである：

$$\tau = \frac{\chi_O + \chi_A}{2} L,\ \ I_A = I_O\, e^{-\tau} + \frac{1-\tau e^{-\tau} - e^{-\tau}}{\tau} S_O + \frac{\tau - 1 + e^{-\tau}}{\tau} S_A. \tag{3}$$

式(3)は，方向と振動数を固定して得られた空間方向の差分式である．方向と振動数については単純に，計算領域を等分するなどの離散化を用いる．

このようにして得られた差分式は，(1)任意の光学的厚さに対して適用可能な差分式である，(2)

上流から下流に向かって解く必要があるので計算順序に制約がつく，(3)方向と振動数については独立である，という特徴を持っている．このうち(2)と(3)は，数値計算を効率的に行う上で考慮すべき重要な性質である．

4. 三次元問題での解法

3次元空間内の輻射輸送は6次元位相空間内の未知関数を求める問題である．したがって差分法を用いた場合，利用する格子数は(全格子数)＝(空間格子数)×(方向格子数)×(振動数格子数)＝ $N_x N_y N_z N_\vartheta N_\varphi N_\nu$ と大きなものになり，その結果計算量も膨大となる．しかし差分式(3)に見るように計算すべき式は比較的単純であるから，問題は大量の計算を如何に扱うかという点に絞られる．

4.1 空間積分の方法

膨大な計算量を押さえるために，一本の光線上の輻射輸送を次のように近似して計算する．ここでは，２次元平面を例にとって説明するが，実際には以下の考え方を３次元に適用したものを用いる．

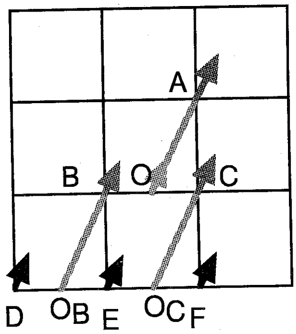

図２

上図２のように，右上方向に伝播する輻射強度Iを求める場合を考える．点Aにおける輻射強度I_Aは，差分式(3)から求められるが，その時の出発点Oは図２のように線分BC上にとり，それより上流側の光線は切り捨てる．出発値I_oについては，近傍の格子点上の値I_B，I_Cから補完して与える．同様にI_B，I_Cは，線分O_BB，O_CC上での差分式(3)から求める．同様の手順を繰り返して，与えられた方向・振動数に対する全格子点上での輻射強度を求める．これは，Short Characteristics 法と呼ばれている方法である．

4.2 計算順序条件について

この方法では，計算順序に気を付ける必要がある．すなわち，I_Aを求める前にI_BとI_Cを求めておかなければならない．他の格子点についても同様である．つまり，右上方向に伝播する輻射を計算する際には，左下の格子点から順に，左上方向に伝播する輻射を計算する際には，右下の格子点から順に，それぞれ求めていく必要があるのである．

5. 並列計算機への実装

5.1 計算領域分割

輻射輸送計算問題の計算領域は，配位空間と方向・振動数空間にまたがる６次元空間である．この領域の分割法に，主に次の２種類が考えられる：（１）方向・振動数分割，（２）空間分割．

（１）方向・振動数分割

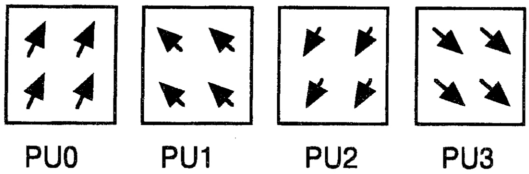

図3

各PUには方向・振動数を分割して割り当てる．配位空間については，全てのPUが全配位空間を保持する．この方法は実装が比較的容易である．しかし全配位空間を保持するために，大きなメモリサイズが必要となる．

（2）空間分割

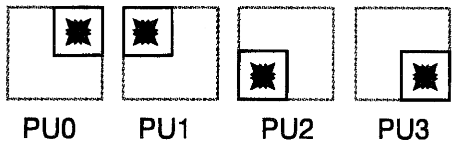

図4

各PUには，分割された配位空間を割り当てる．一方，各PUは全ての方向・振動数の計算を行う．一般には，全ての方向・振動数の情報を保持する必要はなく，それらの積分値のみが意味のある物理量として必要となることが多い．従ってこの分割法を用い，かつ方向・振動数を記憶することをしなければ，必要とされるメモリ量は小さくてすむ．このような長所がある反面，計算順序を守るために，PU間の計算順序に気を付ける必要が生じる．その実現はやや複雑になる．

分散メモリを持つ超並列計算機では，各PUが利用できるローカルメモリはそれほど大きくない．このような状況においては，（2）の空間分割を行わなければ大規模な計算は実行できない．逆に，空間分割を使うことが出来れば，問題規模に応じて利用するPU数を変化させるなど並列計算機を柔軟に利用することもできる．そこで我々は，超並列計算機に実装する計算法として，空間分割を利用したShort Characteristics法を採用することとした．

5.2 超並列計算機上への実装：Multiple Wave Front (MWF) 法

空間分割を利用したShort Characteristics法を超並列計算機に実装するためには，(a) PU間の計算順序を守ること，(b) 計算順序を守りつつ並列化率を上げること，という課題を克服する必要がある．その方法として我々は，Multiple Wave Front (MWF) 法という方法を考案した．以下，2次元平面内の輻射輸送計算を例にとってMWF法の考え方を説明する．3次元空間への拡張は容易である．

（1）全方向格子を4つ（3次元の場合には8つ）のグループに分類する．(下図の例では，「右上方面」のグループに4つの方向格子 {n1, n2, n3, n4} が含まれている.)

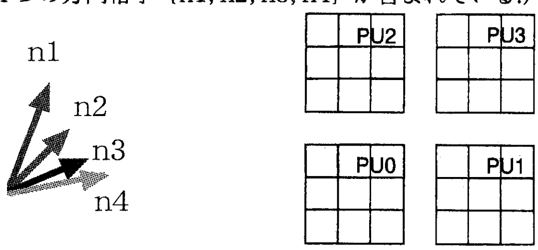

図5

（2）計算順序条件に従い，n1方向の計算をPU0から始める．PU0内での計算順序も，左下から右上へとする．この状態での稼働PU数は1．

（3）PU0内でのn1方向の計算が終了したら，その境界値をPU1, PU2に転送し，PU1, PU2でn1方向の計算を進める．このとき同時に，n2方向の計算をPU0において開始する．これは，n1方向の輻射強度とn2方向の輻射強度が独立に計算できるからである．輻射輸送の本質的並列性を利用していることになる．この段階での稼働PU数は3となる．（図6）

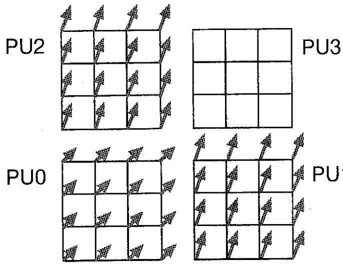

図6

（4）前段階での計算が終了したら，それぞれの境界値を隣のPUに転送し，隣のPUでは受け取った方向の計算を続行する．このとき同時に，n3方向の計算をPU0において始める．この段階での稼働PU数は4となる．この例の場合には，この段階で全てのPUが稼働する．

（5）以下，「右上方面」の方向格子が無くなるまで，同様の計算と転送を続ける．

（6）一つの方面(この例では「右上方面」)の計算が終了したら，別の方面(例えば「右下方面」)の計算を始める．その際，(2)(3)(4)と同じ操作を繰り返しながら稼働PU数を徐々に増やす．

（7）全ての方面の計算が終了したら，全ての空間格子点で全方向（及び全振動数）の計算が終了したことになる．

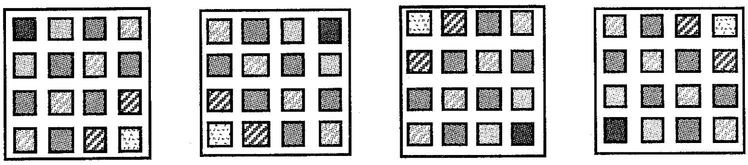
図7

3次元空間内の輻射輸送を解く場合（8つの方面がある），一つの方面当たりの並列化率は次のように見積もられる：

$$f = \frac{N_\vartheta N_\varphi N_\nu/8}{N_\vartheta N_\varphi N_\nu/8 + (P_x + P_y + P_z - 3)}, \tag{4}$$

ここで，$N_\vartheta N_\varphi N_\nu$は方向・振動数格子の格子数，$P_x, P_y, P_z$はそれぞれPU空間内の x, y, z 方向のPU数である．全方向・振動数を計算するためには，8つの方面で同様の計算を繰り返すので，全体の並列化効率も上式と同じになる．私達のこれまでの実用計算は，$N_x = N_y = N_z = 64$ or 128，$N_\vartheta = N_\varphi = 64$ or 128，$N_\nu = 1$〜6 といった規模の計算であった．超並列計算機として筑波大学のCP-PACS(SR-2201相当；PU総数2,048個)を想定すると，$P_x = P_y = P_z = 8$ or 16 となる．これらの数値の組み合わせの中で最も効率の悪い場合($N_x = N_y = N_z = 64, N_\vartheta = N_\varphi = 64, N_\nu = 1, P_x = P_y = 16, P_z = 8$)でも f=0.933 となり，他の場合はもっと高い値となる．ただし，ここでの並列化効率の見積もりにおいては実装において生じる様々な減速要因を考慮していない．このfは理想的な並列化効率である．

5.3 MWF法の並列化効率の実測

Multiple Wave Front 法の効率を実測するために，CP-PACSを用いて3次元空間内の全格子点で全方向の輻射強度を一回求めるのに要した計算時間を測定した．振動数は1で固定する．問題規模と使用するPU数を変化させた．結果を図8にまとめる．

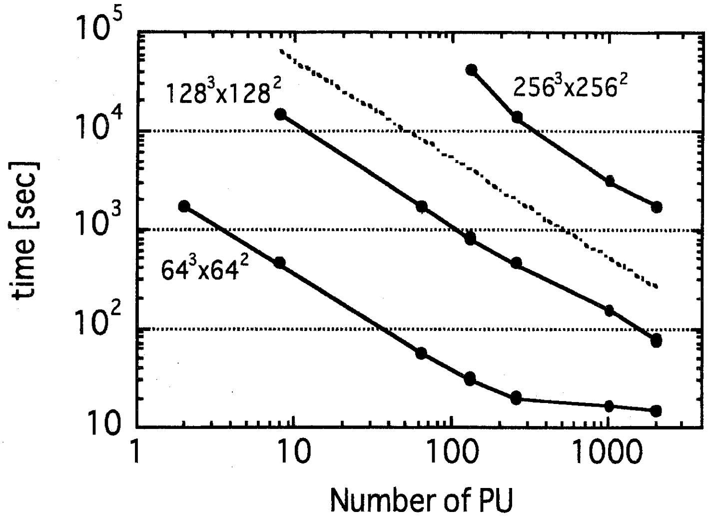

図８

図８には，計算規模が(空間格子数)×(方向格子数)＝$64^3\times64^2$，$128^3\times128^2$，$256^3\times256^2$ の場合に対し，PU数を 2から2048 まで変えて計算した結果が示されている．点線は，PU数に反比例する傾きをもつ線である．この図から，問題規模が大きい場合には計算時間はほぼPU数に反比例して減少していることが分かる．したがって，MWF法は有効に働いているということが出来るだろう．一方，問題規模の割にPU数が多い場合には，実効速度がPU数に比例して速くなることはなくなる．この原因としては，通信負荷の相対的な増加，バリア同期負荷，などが予想される．

6. まとめ

多次元(２次元・３次元)空間内の輻射輸送方程式を数値的に解く
- 輻射強度＝６次元位相空間上の関数
- 方向・振動数について独立
- 計算順序に制約がある

並列計算のための領域分割
- 方向・振動数分割　：　容易だが，計算規模がローカルメモリのサイズで制約される．
- 空間分割　　　　　：　MWF法を用いれば，大規模計算可能．

Multiple Wave Front 法
- 特定の方向・振動数の輻射強度を計算しているPUが，PU空間内で平面をなす
- PU平面(WaveFront)がPU空間内を伝播することにより，計算が進行する
- 複数のPU平面がPU空間を被覆することにより，並列化率が上がる

超並列計算機への実装
- 空間分割
- 計算順序条件を満たすためにMWF法を採用
- 十分な並列効率を達成