

縦方向計算コード BLongD の GPU バックエンドのベンチマーク BENCHMARKING GPU BACKEND OF LONGITUDINAL SIMULATION CODE BLOND

足立恭介^{*,A)}, 田村文彦^{A)}, 野村昌弘^{A)}, 島田太平^{A)}, 宮越亮輔^{A)}, 沖田英史^{A)},
吉井正人^{A)}, 大森千広^{A)}, 清矢紀世美^{A)}, 原圭吾^{A)}, 長谷川豪志^{A)}, 杉山泰之^{A)}
Kyosuke Adachi^{*,A)}, Fumihiko Tamura^{A)}, Masahiro Nomura^{A)}, Taihei Shimada^{A)}, Ryosuke Miyakoshi^{A)},
Hidefumi Okita^{A)}, Masahito Yoshii^{A)}, Chihiro Ohmori^{A)}, Kiyomi Seiya^{A)}, Keigo Hara^{A)}, Katsushi Hasegawa^{A)},
Yasuyuki Sugiyama^{A)}
^{A)} J-PARC Center

Abstract

The longitudinal simulation code BLongD (Beam Longitudinal Dynamics), which is being developed by CERN, has accurate compute capability and excellent expandability. Recently, BLongD has been used for longitudinal simulations of the J-PARC 3GeV Synchrotron (RCS). We were able to construct a model that reproduces well the behavior of the beam in the RCS using BLongD. A long computation time is a problem, for simulations including collective effects. The latest version of BLongD became capable of fast simulations using a GPU backend. In this article, we report benchmark results of the BLongD GPU backend, focusing on longitudinal simulations of the RCS.

1. はじめに

J-PARC は 400 MeV のリニアック、3 GeV シンクロトロン (RCS)、及びメインリング (MR) で構成された大強度陽子加速器施設である。MR は、ビーム強度 2×10^{14} ppp という世界最大級の強度を誇る加速器であり、さらなるビーム大強度化を目指した計画が進められている。RCS においても、設計ビーム強度 8×10^{13} ppp の大強度ビームを極めて少ないビームロスで安定に加速することに成功しており、最大 1MW 相当のビーム供給を可能としている [1]。現在は、1MW を超える新たな大強度ビームの実現に向けた研究開発が進められている。

大強度ビームでは、ウェイクや空間電荷効果などの Collective Effect が縦方向ビーム挙動に影響する。Collective Effect を考慮可能な縦方向シミュレーションコードの一つに、CERN により開発が続けられている BLongD (Beam Longitudinal Dynamics) がある [2]。BLongD は正確な計算能力と優れた拡張性を有しており、RCS においてもビームの挙動をよく再現するモデルを構築することができた [3]。一方で、粒子間の相互作用を考慮したビームの挙動を正確に再現するために扱う粒子数を非常に多くする必要がある点から、特に空間電荷効果を含めたシミュレーションでは計算時間が長くなるのが課題となっていた。

最新の BLongD では GPU バックエンドが導入された。GPU は CPU と比較して処理装置であるコア数が非常に多く、高い並列処理能力を有している。そのため、非常に多い粒子を扱うシミュレーションにおける有用性が期待される。本研究では、RCS の空間電荷効果を含めた BLongD シミュレーションで GPU バックエンドのベンチマークを行った。

2. RCS の概要

RCS 及び RF システムの主なパラメータを Table 1 に示す。ビームの運動量は 25 Hz の正弦波形状の磁場パターンに従い、磁場を立ち上げる 20 ms の間に 0.4 GeV から 3 GeV まで加速される。RCS への入射は荷電変換入射およびペイント入射を採用したマルチターン入射によって行われる。縦方向についてもペイント入射が行われる。これら入射方法をとることで空間電荷効果を緩和し、大強度ビームの安定した運転を実現している。

Table 1: Parameters of J-PARC RCS

Energy	0.400 - 3 GeV
Beam intensity	8.33×10^3 ppp
Harmonic number	2
Repetition rate	25 Hz
Acceleration period	20 ms
Circumference	348.333 m
Accelerating frequency	1.227 - 1.671 MHz
Max. Acc. Voltage	440 kV
Number of cavities	12

RCS では、基本波 ($h = 2$) と 2 倍高調波 ($h = 4$) を用いたデュアルハーモニック運転を行っている。デュアルハーモニック運転による陽子バンチ形状の操作はバンチングファクターを増大させ、大強度の陽子ビームによる空間電荷効果を抑制する。加速空洞の Q 値は約 2 に調整されており [4]、空洞の周波数帯域が広いために 1 台の空洞で基本はと 2 倍高調波の両方の電圧を出力する。

また、RCS では 4 倍高調波 ($h = 8$) までのビームローディング補償が可能なシステムが構築されている [5]。実際のビーム運転では、 $h = 5$ までほぼ完全に補償されており、 $h = 6$ 以上に関しては電源の制約により、12

* pasj-desk@conf.bunken.co.jp

台の空洞の一部で補償されている。

3. BLOND の概要

BLOND は CERN が開発を進めている縦方向ビームシミュレーションコードであり、ウェイク電圧やマルチハーモニック加速といった様々な状況を想定した計算が可能である。加えて、BLOND は主な部分が Python で記述されており、コードの中身の可読性や汎用性が高いという利点がある。BLOND (Version 2.1.11) の縦方向ビームシミュレーションのアルゴリズムの詳細は BLOND の User's Guide [6] に記載されている。

3.1 GPU バックエンド

BLOND の GPU バックエンドは、CUDA (Compute Unified Device Architecture) と CuPy を導入することで利用可能となる。CUDA は NVIDIA が開発・提供する GPU 向けの統合開発環境であり、GPU の複数の演算器を利用した並列演算処理を可能とする [7]。CuPy は Python 向けの GPU に対応した汎用配列計算ライブラリである。Python と CUDA との橋渡しを行い、NVIDIA が提供する CUDA ライブラリを組み合わせた Numpy と SciPy の計算を高速化する [8]。

GPU バックエンドの計算では、Python で書かれたホストコードから CUDA C で書かれたデバイスコード (カーネル関数) を呼び出すことで GPU での並列計算を行う。BLOND においては、加速電圧によるエネルギーの増加や同期粒子との時間差の計算、ヒストグラムの生成といった多様なカーネル関数が用意されている。

3.2 空間電荷効果の計算

電荷を持った粒子が $\lambda(\tau)$ で分布している時、空間電荷効果によって発生する電場は Eq.(1) で表される。ここで、 τ は時間、 Z_0 は真空のインピーダンスを表す。 g_0 は Geometryc factor であり、Eq.(2) で表される。ただし、Eq.(2) はビームと真空チャンバー形状を円筒形とした場合の Geometryc factor であり、 a はビーム分布半径を、 b は真空チャンバー半径である。空間電荷による電圧は、電場を周長で積分することで求められる。Eq.(1) からわかるように、電場は $\lambda(\tau)$ の傾きに比例し、一様分布に近いほど空間電荷効果は小さくなる。

$$E_{\text{spc}} = -\frac{e}{2\pi\beta c} \left| \frac{Z_0}{n} \right|_{\text{spc}} \frac{d\lambda(\tau)}{d\tau} \quad (1)$$

ただし、

$$\frac{Z_0}{n} = j \frac{Z_0 g_0}{2\gamma^2 \beta} \quad (1)$$

$$g_0 = 1 + 2 \ln \frac{b}{a} \quad (2)$$

BLOND では、縦方向シミュレーションにマクロ粒子が使用されている。マクロ粒子とは集団として運動する粒子を一つの粒子として扱った粒子であり、本来膨大な数となる全粒子の運動を効率的に解析するために用いられる。空間電荷の算出において、粒子の分布 $\lambda(\tau)$

は各マクロ粒子の同期粒子との時間差をデータとしたヒストグラムで扱われる。

正確な空間電荷効果の計算にはマクロ粒子数と区間数を適切に選択する必要がある。BLOND によって計算される空間電荷効果の正確さと区間数、マクロ粒子数の関係を Fig. 1 に示す。Figure 1 (A) は区間数 100、マクロ粒子数を $1e5$ とした場合を、Fig. 1 (B) は区間数 100、マクロ粒子数を $1e7$ とした場合の結果を示している。入射ビームは、Eq.(3) で与えられるパラボラ分布を確率密度分布として作成した。ここで、 N_b はビームの強度、 τ はパラボラ分布幅の半分の時間を表す。 τ は RCS の運転条件に合わせて 220ns とした。空間電荷効果を計算する時間幅はパラボラ分布より広い 800ns とした。そのため、区間幅は 8 ns/bin である。また、Fig. 1 (C) は Eq.(1) と Eq.(3) で与えられる理想的なパラボラ分布と空間電荷効果による電圧分布である。

Figure 1 から分かるように、同じ区間数でもマクロ粒子数が少ないとパラボラ分布のヒストグラムにがたつきが現れる。その結果、空間電荷効果による電圧分布のばらつきが大きくなり正確さが損なわれる。

BLOND では、時間幅や区間数を必要に応じた任意の値に設定できる。バンチ形状の詳細な解析や高次の周波数解析を行う場合は区間数を多くとる必要があり、それに伴いマクロ粒子数を増やす必要があるため計算時間が長くなることが予想される。

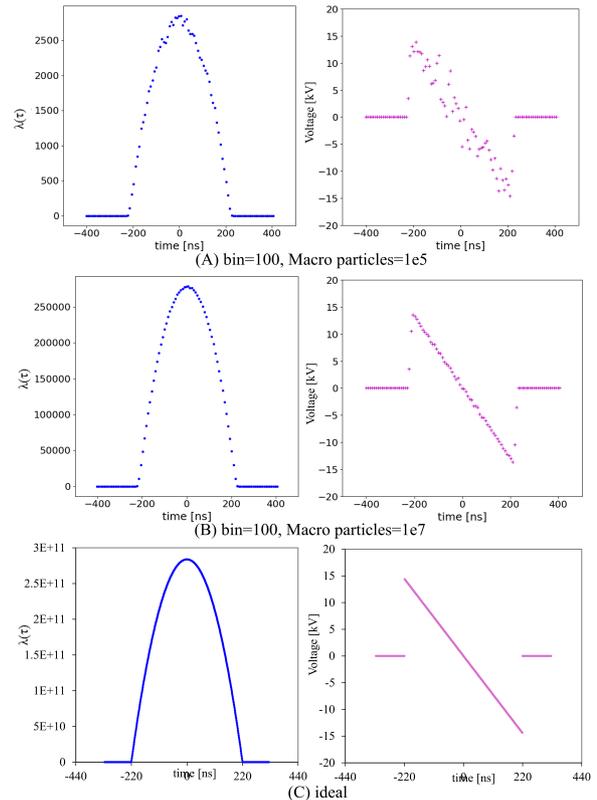


Figure 1: The macro-particle distributions and space charge effect when the number of bins are 100 with two different macro-particle numbers (top, middle). Parabolic distribution and space charge effect (bottom).

$$\lambda(\tau) = \frac{3N_b}{4\hat{\tau}} \left(1 - \frac{\tau^2}{\hat{\tau}^2}\right) \quad (3)$$

4. RCS を対象としたベンチマーク

4.1 計算条件

本シミュレーションにて使用した電圧パターンを Fig. 2 に示す。Figure 2 は 1 MW 運転時に RF 空洞の加速ギャップに発生した電圧の測定値である。Figure 2 から分かるように、実際の加速ギャップには $h = 2, 4$ の電圧の他に $h = 6, 8$ の電圧が発生している。これらは、電源の制約から $h = 6, 8$ の補償を一部の RF 空洞でオフにしているために発生するウェイク電圧等である。なお、奇数ハーモニックの電圧はフィードバックによりほぼ 0 に制御できているため省略している。 $h = 8$ よりも高い高調波成分については、その存在と影響が確認されているが [9]、今回は省いた。また、同じく測定された $h = 8$ までのハーモニックの位相を Fig. 3 に示す。

入射ビームは実際の RCS と同様にマルチターン入射とした。実測値より、入射ビームの運動量方向は $\sigma = 0.17\%$ のガウス分布、時間方向は幅 $440 \mu\text{s}$ の一様分布とした。空間電荷を考慮した計算を行うにあたり、区間数は 100 とした。CPU との計算速度を比較するため、マクロ粒子数は $1e3 \sim 1e7$ とした。0.4 GeV の入射から 3 GeV の取り出しエネルギーまで加速される範囲を計測時間とした。

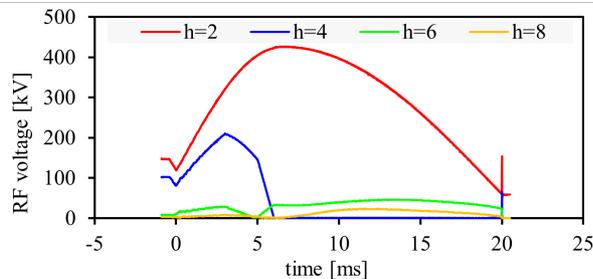


Figure 2: The time variation of the RF voltage for the each harmonic component. The solid lines shows the input RF pattern and the dashed lines shows the monitored RF voltage up to $h = 8$ measured at the 1MW beam operation.

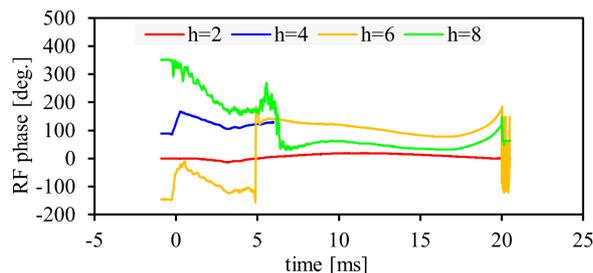


Figure 3: The time variation of the monitored RF phase up to $h = 8$ at the 1MW beam operation.

4.2 GPU バックエンドへの切り替え

GPU バックエンドを用いた計算の妥当性を検証するため、CPU のみを使用した場合のシミュレーション結果と比較した。計算に使用した CPU、GPU のスペックおよびドライバーのバージョンを Table 2 に示す。並列計算におけるグリッドサイズは 96、ブロックサイズは 1024 とした。

Table 2: Machine Specification

OS	Ubuntu 20.04.6 LTS
CPU	Intel(R) Core i9-9900K
core, threads	8, 16
GPU	Quadro RTX 5000
memory	16 GB GDDR6
CUDA core	3,072
NVIDIA driver version	550.54.14
CUDA version	12.4
CuPy version	13.2.0
BLonD version	2.1.11

比較には 1 バンチ当たりのピーク電流値と平均電流値の比であるバンチングファクターを用いた。マクロ粒子数は $1e6$ とし、空間電荷を考慮した計算を行った。得られたバンチングファクターを Fig. 4 に示す。計算結果の妥当性を確認するため実測値とも比較した。実測値はウォールカレントモニタ (WCM) を用いて取得したバンチ波形を解析したものである。Figure 4 が示すように、GPU バックエンドを使用した場合でも CPU と同じ結果が得られ、バンチングファクターは測定値をよく再現する。

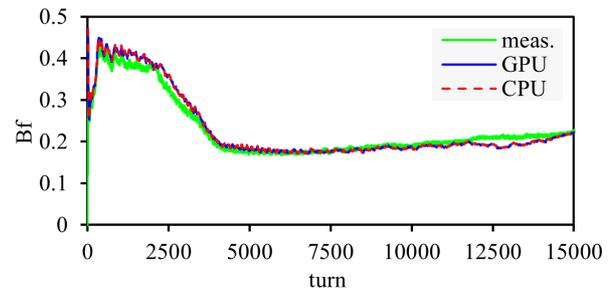


Figure 4: The comparison of the bunching factor. The red dotted line shows the result of using CPU only and blue line shows the result of using GPU backend. The green line shows the experimental result.

4.3 計算結果

CPU のみを使用した場合と GPU バックエンドを使用した場合の計算時間の比較と計算時間の比を Fig. 5 に示す。マクロ粒子数が多くなることによる計算時間の増加量は CPU のみの方が多くなり、マクロ粒子数が $1e6$ 以上のオーダーでは約 6 倍程度 GPU バックエンドを使用した場合の方が速いことがわかる。また、計算

時間の比はある程度の値でほぼ頭打ちになることが予想される結果となった。

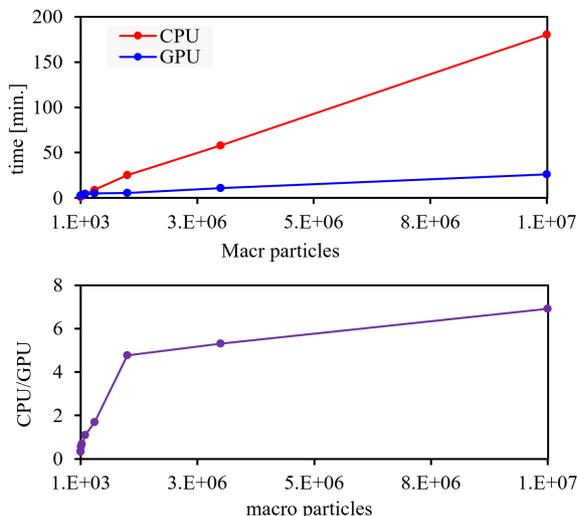


Figure 5: Comparison of computation time. Red line shows results using CPU only. The blue line shows the results using the GPU backend (top). The purple line shows the ratio of time (bottom).

次に、Fig. 5 上を両対数に変更したグラフを Fig. 6 に示す。マクロ粒子数 $1e5$ 付近を境として計算時間が逆転しており、マクロ粒子数が少ない場合は GPU バックエンドを使用しない場合の方が計算速度が速いことが分かる。これは、一つ一つの処理能力に関しては CPU が GPU よりも優れており、マクロ粒子数が少ないと GPU による並列計算処理能力の利点が生かされないためと考えられる。

Figure 1 から分かるように、RCS における空間電荷効果の計算には $1e5$ よりも多いマクロ粒子数が必要である。そのため、空間電荷を考慮した RCS の縦方向シミュレーションにおいては GPU バックエンドが有利であることが分かった。

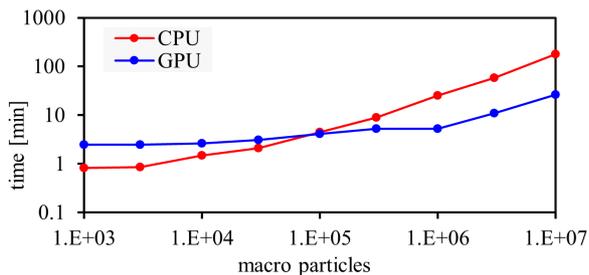


Figure 6: Comparison of computation times with the vertical axis on a logarithmic scale.

5. まとめと今後

J-PARC RCS 縦方向シミュレーションツールとして BLongD が導入されている。最新の BLongD は GPU バックエンドによるシミュレーションの高速化が可能となった。本研究では、RCS の縦方向シミュレーションを題材として、BLongD GPU バックエンドの評価を行った。

バンチングファクターを計算して実測値と比較したところよい一致を示す結果が得られ、GPU バックエンドでも RCS 1 MW ビームを精度よくシミュレーションできることを確認した。シミュレーションにて扱う粒子数が少ない場合に GPU バックエンドを使用すると計算速度が低下するが、扱う粒子数を多くした場合では計算速度が向上することが分かった。RCS における空間電荷効果を正確に計算できる条件において、GPU バックエンドは有効であることを示した。

今後の BLongD を用いた計算において、複雑なバンチ形状の取り扱う場合や高次の周波数成分を解析するといったマクロ粒子数を非常に多くする必要がある場面にて GPU バックエンドを用いた検討を進める。また、RCS に比べて計算量の多い MR を題材とした GPU バックエンドの評価を行う。

参考文献

- [1] P.K. Saha *et al.*, “Achievement of low beam high-intensity operation of J-PARC 3 GeV RCS”, Proc. PASJ2022, Kitakyushu (Online meeting), Japan, Oct. 2022, pp. 1-5.
- [2] H. Timko *et al.*, “Beam longitudinal dynamics simulation studies”, Phys. Rev. Accel. Beams 26, 114602 (2023).
- [3] H. Okita *et al.*, “Benchmarking of longitudinal calculation code BLongD for application to J-PARC RCS”, Proc. PASJ2020, Matsuyama (Online meeting), Japan, Sep. 2020, pp. 674-678.
- [4] M. Yamamoto *et al.*, “Vacuum tube operation analysis under multi-harmonic driving and heavy beam loading effect in J-PARC RCS”, Nucl. Instr. Meth. A, 835, pp. 119-135 (2006).
- [5] F. Tamura *et al.*, “Multiharmonic vector rf voltage control for wideband cavities driven by vacuum tube amplifiers in a rapid cycling synchrotron”, Phy. Rev. Accel. Beams, 22, p. 092001 (2019).
- [6] CERN Beam Longitudinal Dynamics code BLongD version 2.1.11, <https://blond.web.cern.ch>
- [7] <https://developer.nvidia.com/>
- [8] <https://cupy.dev/>
- [9] H. Okita *et al.*, “Evaluation of higher harmonics generated in acceleration gaps during the high power beam acceleration at J-PARC RCS”, Proc. PASJ2022, Kitakyushu (Online meeting), Japan, Oct. 2022, pp. 262-266.