

jh180018-NAJ

超並列宇宙プラズマ粒子シミュレーションの研究

三宅洋平（神戸大学・課題代表者）、中島浩（京都大学）、加藤雄人（東北大学）
小路真史（名古屋大学）、臼井英之（神戸大学）、大村善治（京都大学）、岩下武史（北海道大学）
深沢圭一郎（京都大学）、佐伯拓哉（神戸大学）

概要 本研究の目的は、Particle-in-Cell 方式に基づく宇宙プラズマ粒子シミュレーションを最新の大規模並列計算機アーキテクチャへ効率的に実装し、宇宙プラズマ理工学的重要問題に適用することである。今年度は、メニーコア向け高効率プラズマ粒子計算に関して、集団通信アルゴリズムの再検討を通して、プロセス間通信の最適化を実施する。また計算解法自体も陰解法の導入により、より大規模な計算対象に適用可能なモデルとする。これに加え、月や小惑星などの周辺で予想されるプラズマ電磁じょう乱現象、電子ハイブリッドシミュレーションによる、地球放射線帯の相対論的高エネルギー電子加速現象、の物理機構を大規模粒子シミュレーション解析により解明する。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

本課題は、神戸大学・京都大学・東北大学・名古屋大学・北海道大学の複数の研究者が参加する共同研究であり、京都大学の大規模計算資源を利用する。

(2) 共同研究分野：超大規模数値計算系応用分野

(3) 参加研究者の役割分担

参加研究者の役割分担は過年度の体制に、大学院生を加えた構成である。詳細は H26 年度最終報告書の表 1 を参照願いたい。宇宙プラズマ理工学分野の中でも粒子モデルシミュレーションの専門家と流体計算の専門家、そして計算機科学分野研究者・技術者が有機的に協力して行う共同研究体制となっている。

2. 研究の目的と意義

本研究の目的は、Particle-in-Cell (PIC) 方式に基づく宇宙プラズマシミュレーションを対象に、近年主流となりつつあるメニーコア型並列計算システムへの高効率実装を実現することにある。この目標に向け、不均一な粒子分布に起因する**負荷不均衡**、粒子が所属するセルに依存して参照先が決定されることによる、格子点配列への**不規則アクセス**、の問題を解決する必要がある。

負荷不均衡について、PIC シミュレーションは、膨大な数のプラズマ代表粒子と空間格子点上の電磁場の相互作用計算がシミュレーションの大部分を占める。このとき、分割された小領域間で粒子の粗密が生じると、負荷不均衡が発生し、並列効率を著しく損なう。分散メモリ並列レベルでは、我々が独自に開発した動的負荷分散技法 OhHelp により、この問題に対処している。

不規則アクセスに関しては、格子点配列へのアクセスパターンが粒子位置に依存して決まる、いわゆる間接アクセスを有したままだと、メニーコアプロセッサが有する SIMD 演算機構を有効活用することができない。この問題に関して、我々は所属セルに応じた厳密な粒子ビンングを行うことで、複数粒子間で間接アクセスを排することを提案した。

上記 2 点の個別要素技術に加え、それらを組み合わせてハイブリッド並列実装を実現する上で問題となる、粒子ビンのオーバーフローなどの例外的なイベントへの対策も検討した。これらの検討を通して開発したプロトタイプ版プラズマ粒子シミュレータによる Xeon Phi KNL 上での性能評価では、粒子均一なケースにおいて良好なスケーラビリティと、Xeon Phi と通常の Xeon プロセッサの理

論的な性能差に見合った性能向上が得られた。一方で、粒子分布が極端な不均一なケースでは、プロセス間の通信性能が原因とみられる性能劣化が顕著となった。ポスト「京」など次世代のスーパーコンピュータシステムでは通信コストが現在以上に切実なオーバーヘッド要因になると考えられ、上述の問題に正面から取り組む必要がある。

実問題への応用に関しては、OhHelp 適用済の全粒子シミュレーションコード EMSES により、月惑星プラズマ／ダスト環境の大規模 3 次元解析を推進している。数 1000 コアオーダーの大規模演算により、プラズマ荷電粒子による天体表面の帯電と、静電気力によって天体上空を浮遊するダスト微粒子のダイナミクスを解き明かす。

上述の課題を遂行することは OhHelp 法の有効性の実証という数値アルゴリズム的観点、および超大規模モデルによる宇宙プラズマ粒子シミュレーションの実現と最先端研究成果の創出という宇宙科学的観点の双方において大きな意義がある。

課題申請時に記載した本年度の技術開発計画を以下に再掲する。

①現状のコード開発において主な性能劣化要因として特定されている、プラズマ電流縮約通信の実装最適化を行う。

②計算時間削減のための、計算アルゴリズム上の改良を行う。具体的には電磁界ソルバーに陰解法を導入する。

これらの点についての達成状況を 6 節に報告する。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

本研究は、アルゴリズム開発、コード開発、大規模シミュレーション実行の全ての段階で、複数の大学の計算科学者と同センターの計算機科学者との緊密な連携によって実施されている。このような研究体制により、動的負荷分散技法 OhHelp や粒子ビニング法などの高

度な並列処理関連技術を開発するに至った。

実際に OhHelp では、木構造を用いた負荷均衡状況の再帰的なチェックなど、非数値的な発想を随所に活用しており、計算機科学から計算科学への貢献の代表例となっている。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

領域分割方式の超並列計算が困難とされてきたプラズマ粒子 PIC シミュレーションに動的負荷分散技法 OhHelp を適用した結果、マルチコア CPU 上では粒子局在化による性能劣化を大幅に低減することに成功した。また所属セルに応じた厳密な粒子ビニング法を提案し、その結果として従来の PIC コードで問題となっていたコンパイラによる SIMD 命令発行の阻害要因を排することに成功した。これらの要素技術を実装して開発されたプロトタイプシミュレータは、近年普及が進むメニーコア型のクラスタシステムにおいて、粒子分布が均一の場合に良好なスケーラビリティを有することが確認された。一方で、粒子が著しく局在している状況においては、事前の予想を上回る性能劣化が確認された。この性能劣化は、動的負荷分散に伴って必要となるプラズマ電流データの All-reduce 処理に起因することが判明した。現在適切な All-reduce 通信アルゴリズムの選択により、この性能劣化を低減する方法を模索している。

応用分野における成果としては、本共同研究プロジェクトで開発を推進してきた高性能計算技法により、時間変動する宇宙プラズマ環境下での衛星帯電現象の数値モデリングを開始した。この取組みにより、より広範な宇宙天気現象に対する衛星電位応答の理解が可能になると強く期待される。

理学的応用としては、地球放射線帯での相対論的電子生成機構において重要な役割を果たすと考えられているプラズマ波動・コーラス放射の発生過程を再現する計算機実験を実施し、その波動特性が背景磁場強度の空間構

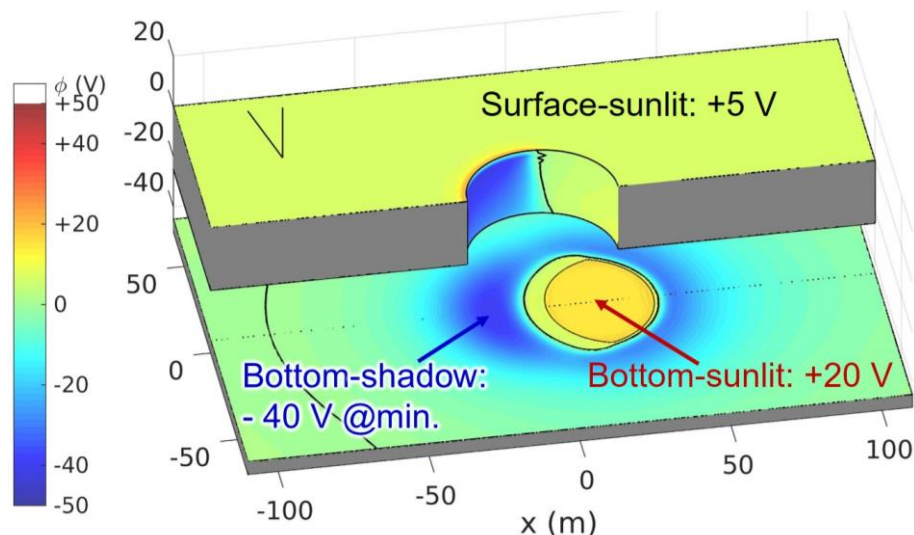


図 1 粒子シミュレーションによって得られた月縦孔・地下空洞の表面電位分布。

造の変化に応じて大きく変化することを明らかにした。

5. 今年度の研究成果の詳細

近年、月に複数発見されている縦孔地形に近年注目が集まっている。2017 年には、月探査機「かぐや」の観測により、それらの一つが溶岩チューブにつながっていることが裏付けられた。縦孔や地下空洞は、電磁気環境、およびその影響を受けるダスト環境において特異な様相を示す。本研究では、プラズマ物理分野や人工衛星帯電解析に用いられてきた粒子シミュレーション技術を、月縦孔・地下空洞周辺の電磁気・ダスト環境の解析に応用し、縦孔周辺の帯電微粒子環境が縦孔探査に及ぼす影響を評価する。

本計算では、Marius の丘に発見されている縦孔のデータを参考に、そのサイズを直径 50 m、深さ 45 m とする。また縦孔の下部が、天井までの高さが 20 m の地下空洞につながっている状況を想定し解析を実施した。月面での荷電粒子の吸収・放出過程は、月レゴリス層に蓄積される電荷の符号と大きさを規定し、表面電位を決定づける。一般に固体表面におけるプラズマ電流は、物体の表面電位の関数として表される。これは月面においても同様

であり、月面電位の平衡状態は、荷電粒子種間の電流平衡が満たされるように決定される。

図 1 は、粒子シミュレーションで求めた、月昼側に位置する縦孔・地下空洞周辺の表面電位分布を、カラーマップで表示したものである。太陽天頂角は 30° である。まず縦孔外の月面電位は +5 V と光電子温度 2.2 eV の数倍の正電位となっており、一般に知られている月昼側電位に一致している。縦孔・地下空洞内部では、部分的に太陽光が遮断され、日陰の領域が生じる。日向と日陰でそれぞれ正と負の帯電が生じており、日向ではおよそ +20 V、日陰では -40 V 程度の電位が形成される。特に日向の縦孔底面からは、縦孔外部と同様の条件で光電子が放出されるが、最終的な電位は縦孔内部の方が大きい結果となっている。

上述のようなプロセスにより月表面のレゴリス層が帯電し、その一部はレゴリス層直上の特異な電場環境のもとで浮遊し、特徴的なダイナミクスを示す。これらの浮遊ダストが月面探査機に付着することにより、機体表面の摩耗や異常帯電、熱特性の予期しない変化が引き起こされる恐れがある。そこでダストの挙動を明らかにすることを念頭に、テスト粒子解析を実施した。今回は、静電気力が月面重力に打ち勝ち、浮遊する条件を満たすダ

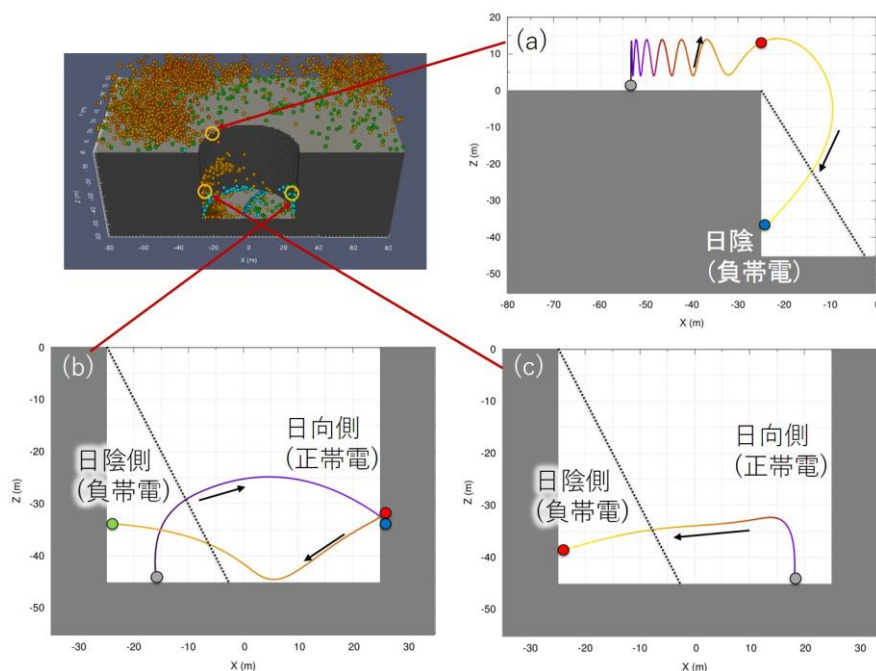


図2 月縦孔・地下空洞周辺の代表的なダストの軌跡。それぞれ初期に (a) 縦孔外、(b) 縦孔内日向領域、(c) 縦孔内日陰領域、に配置されたダストの運動を示す。

ストとして、数十 nm の微小ダストを計算の対象とする。

図2に縦孔周辺でのダスト挙動パターンを数例示す。まず図2(a)に示す縦孔外の正帯電ダストは月面上を浮遊し、最終的に縦孔日陰領域に到達していることが図から確認できる。ダストの持つ電荷は日向では正であるが、同時に日向の月面からは上向きの電場が発生しているため、ダストが浮かび上がる向きに静電気力が作用する。図1で見たように縦孔の日陰領域は負に帯電しているため、浮遊したまま縦孔直上に到達したダストは、当該領域に引き込まれる結果となる。また図2(b)および(c)に示すあらかじめ縦孔内部の日向と日陰に配置されたダストは、両者とも初め日向・日陰境界を交差するような運動を示す。この時点では、日向・日陰内ダストの挙動は対称的であるが、その後、経過は異なる。日陰から日向に移動したダスト(図2(b))は数10秒～数分の時間後に再び、日陰領域に帰っていく。しかし当初、日向から日陰に移動したダストについては、数10分の数値計算では、こうした帰還運動は見られなかった。このよう

な運動の非対称性は日向・日陰空間中の荷電粒子密度の違いに起因しているが判明した。

上記の結果に基づくと、数十 nm スケールの微小ダストは、縦孔や地下空洞の日陰領域に引き寄せられやすいことが、強く示唆される。今後、ダストサイズに対する依存性を調査し、日向・日陰を横切るダストフラックスの見積もりを実施する予定である。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

(1) 上半期の活動：プラズマ電流密度縮約処理にかかるプロセス間通信方式の検討

まず2節の最終段落で言及した①の課題に対する進捗を報告する。これまでに開発した要素技術を組み込んだプロトタイプシミュレータによる、京都大学 Cray XC40 の Intel Xeon Phi KNL 7250 上での性能評価では、粒子均一なケースで良好なスケーラビリティが得られたものの、粒子分布が不均一なケースでは性能劣化が顕著であった(前年度最終報告書を参照)。この性能劣化については、MPI 通信、特にプラズマ電流の All-reduce 処理に伴うオーバーヘッドが主要因であることが既

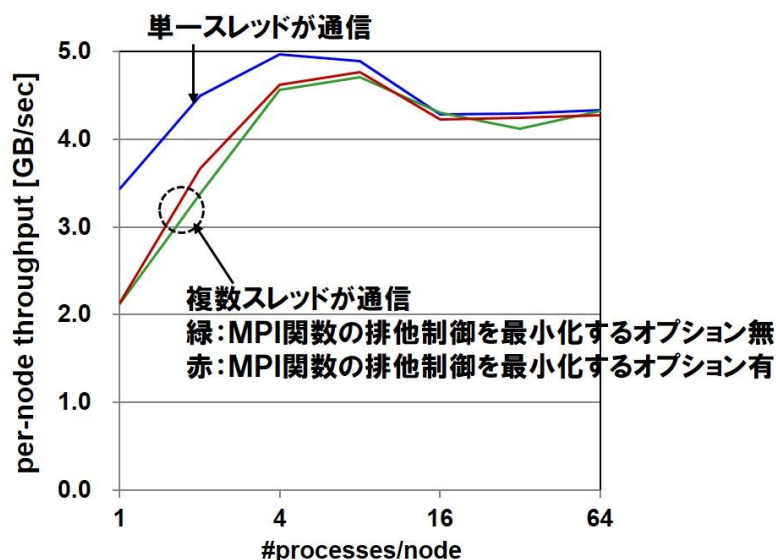


図3 リングシフト通信のマルチスレッド化の効果.

に判明している。

上記の課題を踏まえ、前年度下半期より、当該 MPI 通信部分の最適化の取り組みを開始した。OhHelp 適用シミュレータで出現する、データ量：大、かつプロセス数：小の多数同時並行 All-Reduce 処理という特殊な通信パターンにおいては、Ring 方式による All-reduce 通信アルゴリズムが比較的有効であることを見出した。

また上述の性能分析においては、KNL プロセッサ内の全コアをスレッド並列に用いることが有効でないことも判明している。これは現状の実装では、各プロセス内で単一のスレッドのみが MPI 通信を担当していることと関係している。すなわち KNL プロセッサ内で 1 プロセスのみ起動し、前コアをスレッド並列に用いた場合、ノード間通信に関与するコアはノード内で 1 つと極端に少ないため、ノードが本来持つ通信バンド幅を充足していないと考えられる。そこで今年度からは電流 All-reduce 処理のマルチスレッド化も検討する。

実際のマルチスレッド化の対象としては、All-reduce に必要な通信自体と、通信されたデータの縮約計算の部分に分けられる。後者は、All-reduce 通信を自作の実装とすること

で、導入が可能であり、またプロセス内の演算のみが対象のため、マルチスレッド化の効用は比較的予測しやすい。一方で、前者については、先述した特殊な All-reduce 処理に適用する前段階として、比較的簡単なデータ通信モデルにマルチスレッド実行を適用することで、その効果を事前評価することが必要である。

今回は京都大学 XC40 を 16 ノード使用し、様々なノード内プロセス数 P とスレッド数 T ($P \times T = 64$ コア) の組み合わせに対して、リングシフトのデータ通信を行う実験を行った。これは All-reduce の通信アルゴリズムとして Ring 方式が有効であるという、先述の検討結果に基づく実験内容である。通信するデータサイズはスレッドあたり 80 KB とする。このときノード当たりではおよそ 5 MB 程度と計算され、実際のプラズマ粒子シミュレーションで用いるノード当たりの電流データ量に対応したサイズとなる。複数スレッドによる通信実装には MPI_Thread_Multiple を用いた。

図 3 にノード当たりのプロセス数（プロセス当たりのスレッド数）をパラメータとした、通信性能の測定結果を示す。図中の青線は従来どおり単スレッドのみが通信を実施する場合、緑および赤線は複数スレッドで通信を

実施した場合である（緑と赤の違いについては後述）。図からマルチスレッド化は通信性能の改善においては逆効果であることが判明した。特に、ノード内のプロセス数が少ない（＝1 プロセス内のスレッド数が多い）ケースにおいて、この傾向が顕著である。

複数スレッドによる通信が逆効果になった原因としては、以下が考えられる。

- ・単一スレッド通信の性能が最大化される 4~8 procs/node では、既にノード間のリンク性能がほぼ充たされているため、複数スレッド化による恩恵が少ない。

- ・1 procs/node (64 threads/proc) では、複数スレッド間の排他制御によるオーバーヘッドが大きくなり、性能劣化につながっている。

また XC40 では、複数スレッド間の排他制御を最小化するオプションが提供されており、図 3 の赤線はそれを有効にした場合の結果であるが、その効果は限定的であった。

(2) 下半期の活動：陰解法電磁界ソルバーの導入による時間更新刻み幅制約条件の緩和

次に 2 節最終段落の課題②の進捗を報告する。大規模 PIC シミュレーションの高速化を実現するためには、計算機アーキテクチャに合わせた最適化に加え、計算アルゴリズムそのものの高度化も必要である。特に改善が見込まれるのは、電磁界ソルバーの部分である。これまで用いていた陽解法では、時間刻み幅は光速に対するクーラン条件によって拘束される。一方でプラズマ荷電粒子の興味あるダイナミクスは、光が 1 セルを伝搬する時間よりはるかにゆっくりとしているため、上述の時間刻み幅は本来の目的に照らして過剰に小さく、計算時間が増大する結果となっている。

この問題を解決するため、今年度下半期では電磁界ソルバーに陰解法を導入した。これにより、時間刻み幅は上述のクーラン条件ではなく、興味ある現象を十分に解像できる値に設定することができ、大幅に計算時間を短

縮することが可能である。

本課題では、Hoshino [1986]により提案され、Matsumoto et al. [2012]等に採用されている定式化を適用することとした。詳細は省略するが本定式化を用いると各格子点上の磁界 B の時間発展を表現する連立一次方程式が得られる。Hoshino [1986]らの手法では、これを共役勾配法に基づく反復法を用いて解いている。しかし今回我々は上式を離散フーリエ空間に写像した上で、直説法により解く方法（スペクトル法）を採用した。

構築した電磁界ソルバーを用いた 2 次元電磁波伝搬のテスト計算結果を図 4 に示す。図中の(a)~(d)は 4 種類の異なる時間刻み幅を用いた計算結果のスナップショットを示しており、各ケースの時間刻み幅をクーラン数 $c\Delta t/\Delta r$ (c , Δt , Δr はそれぞれ光速、および時間と空間の刻み幅) によって表示している。

陽解法を用いた従来コードでは、クーラン数が $1/\sqrt{N_d}$ (N_d は空間次元数、テスト計算では $N_d = 2$) を超えると計算が不安定化し、数値発散が生じる。陰解法の適用により、クーラン数に対する制約が取り払われ、全てのケースにおいて安定的に電磁波伝搬が再現されていることがわかる。この場合、解くべき振動数（周波数）を十分に解像できる時間刻み幅で計算を進めることができるため、従来に比べ各段な計算時間短縮が可能となった。

現在、開発された陰解法電磁界ソルバーを利用したプラズマ粒子シミュレーションの動作テストを実施しており、2019 年度中には実用化できる見込みである。なお上述のスペクトル法を用いた陰解法には、3 次元のフーリエ変換が必要である。フーリエ空間の並列化においては、All-to-all 処理によるデータ転置に基づく標準的な実装を用いている。この All-to-all 通信のため、電磁界ソルバー単体では、大規模並列計算時のスケーラビリティが劣化するものの、プラズマ粒子計算部分に比べて演算時間が小さいため、PIC シミュレー

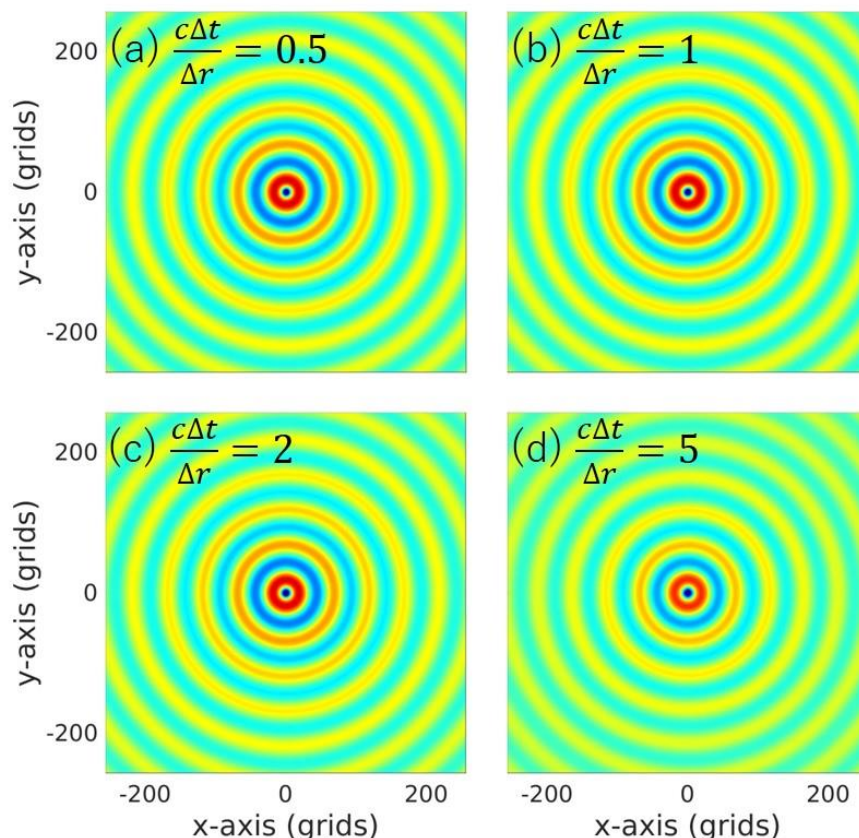


図 4 陰解法適用後の電波伝搬テスト結果. (b)~(d)は陽解法における不安定領域に対応する.

ション全体のパフォーマンスに与える影響は軽微であると予想される。

(3) 課題遂行の総括と今後の展望

本年度は、大規模並列計算システムに適合した PIC シミュレーションのプロセス間通信高効率化の検討と、時間刻み幅に対する拘束条件の緩和を目指した改良計算アルゴリズムの実装に取り組んだ。

開発中のメニーコア向け PIC コードにおける性能劣化要因は既に特定されており、該当するプラズマ電流縮約通信について検討を実施した。結果として、当該 MPI 通信そのもののマルチスレッド化は通信性能の向上には有効ではなく、All-reduce 処理全体の性能を向上する上では、縮約の演算に限ったマルチスレッド化が有効であることが強く示唆された。

PIC シミュレーションに含まれる電磁界ソルバーに陰解法を導入することで、従来に比

べて大きな時間刻み幅を使用することが可能である。本年度中に電磁界ソルバー単体の実装作業が完了し、今後 PIC 計算に組み込んでテスト計算と性能評価を実施する予定である。

課題申請時の研究計画に準拠した工程を推進し、一部期待した成果が得られなかった部分はあるものの、着実に研究は進展している。なお、上述したように、特定の通信処理のコストが全体の計算時間の中で大きな割合を占めるようになってきているが、これは数年にわたるコード最適化検討で他の部分の計算コストを大幅に削減してきた結果でもある。このような状況でさらなる高効率化を進めるには、アルゴリズムそのものの改良など、多方面からの検討が必要になると考えられる。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

1. Paulsson, J.J.P., Y. Miyake, W. J. Miloch,

- and H. Usui, Effects of Booms of Sounding Rockets in Flowing Plasmas, *Phys. Plasmas*, 26, 32902, doi:10.1063/1.5051414, 2019.
 2. Ahmad, N., D. Herdiwijaya, T. Djameluddin, H. Usui, and Y. Miyake, Diagnosing Low Earth Orbit Satellite Anomalies using NOAA-15 Electron Data Associated with Geomagnetic Perturbations", *Earth, Planets, and Space*, 70, doi:10.1186/s40623-018-0852-2, 2018.
 3. Kato, Y., Y. Omura, Y. Miyake, H. Usui, and H. Nakashima, Dependence of Generation of Whistler Mode Chorus Emissions on the Temperature Anisotropy and Density of Energetic Electrons in the Earth's Inner Magnetosphere. *J. Geophys. Res.*, 123, 1165–1177, 2018.
- (2) 国際会議プロシーディングス
4. Miyake, Y., Y. Funaki, M.N. Nishino, and H. Usui, Particle Simulations of Electric and Dust Environment near the Lunar Vertical Hole, *Proc. 8th International Conference on the Physics of Dusty Plasmas*, 1925, 020001, 2018.
- (3) 国際会議発表
5. Kato, Y., Rapid Acceleration of Relativistic Electrons through Wave-Particle Interactions in Planetary Magnetospheres, *International Symposium on "Physics at the Cosmic Frontier"*, Toyama, 2019.
 6. Nakashima, H., An Implementation of PIC Method with OhHelp Load Balancing Library for Manycore Processors, 24th Numerical EXperiment of Tokamak (NEXT) Workshop, Rokkasho, 2018.
 7. Miyake, Y., Numerical Simulations of Dust Plasma Environment near Lunar Surface, 13th International Symposium of Space Simulations (ISSS), Los Angeles, 2018.
 8. Kato, Y., Electron Hybrid Simulations of the Nonlinear Processes of Whistler-Mode Chorus Generation in the Earth's Inner Magnetosphere, 13th ISSS, Los Angeles, 2018.
 9. Miyake, Y., T. Kiriyaama, Y. Kato, and H. Usui, Numerical Simulation of Spacecraft Charging Processes in Time-varying Plasma Environment, 15th Spacecraft Charging Technology Conference, Kobe, 2018.
 10. Miyake, Y., T. Kiriyaama, Y. Kato, and H. Usui, Numerical Simulation of Spacecraft Charging Processes in Time-varying Plasma Environment, 2nd URSI AT-RASC, Gran Canaria, 2018.
- (4) 国内会議発表
11. 三宅洋平, 西野真木, 月面近傍プラズマ・ダスト環境の粒子モデルシミュレーション, 第 144 回 SGEPPSS 総会および講演会, 名古屋, 2018.
 12. 三宅洋平, 粒子モデル プラズマ運動論シミュレーションの高効率計算技法, 第二回ポスト「京」時代の天体形成シミュレーション研究会, 神戸, 2018.
 13. 三宅洋平, 寸村良樹, 佐伯拓哉, 中島浩, メニコーコア型クラスター向け高効率プラズマ粒子シミュレータの開発, 日本地球惑星科学連合大会, 幕張, 2018.
 14. 三宅洋平, 月縦孔および地下空洞におけるプラズマ・ダスト輸送の数値シミュレーション, 日本地球惑星科学連合大会, 幕張, 2018.
 15. 三宅洋平, 粒子モデルプラズマ運動論シミュレーションの高効率計算技法, 第二回ポスト「京」時代の天体形成シミュレーション研究会, 神戸, 2018.
- (5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)
- 該当なし