

jh190006- NAJ

電磁流体力学乱流の高精度・高並列 LES シミュレーションコード開発研究

三浦 英昭 (核融合科学研究所)

電磁流体力学乱流の LES シミュレーションコード開発について、拡張電磁流体力学 (XMHD) モデルによる乱流直接数値シミュレーション (DNS) と、これをもとにした SGS モデルの開発を行った。これにより、高い磁気プラントル数の Ha11 MHD 乱流のべき則について新たな知見を得た。シミュレーションコードの最適化の観点から、LES コードにおける 3 次元 FFT 部分の整理を進めた。LES コードに可視化手法「4 次元ストリートビュー」の導入を進めた。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

東京大学情報基盤センター

(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

三浦英昭 (核融合研) : 研究代表者・シミュレーションコード開発、拡張 MHD (XMHD) SGS モデル開発

宇佐見俊介 (核融合研, 研究副代表)、大谷寛明 (核融合研) : SGS モデル開発のための粒子 (運動論) 効果研究

半場藤弘 (東京大) : Ha11 MHD、XMHD の SGS モデル開発

片桐孝洋 (名古屋大)、中島研吾 (東京大)、高橋大介 (筑波大) : Oakforest-PACS 上のシミュレーションコード最適化

陰山聡 (神戸大、研究副代表)、坂本尚久 (神戸大) : 4 次元ストリートビュー開発

2. 研究の目的と意義

太陽風などに現れる低衝突頻度乱流の性質を解明すること、そして実現象の解明・予測・制御等に应用することは、プラズマ科学における重要課題である。しかし、流体的にふるまう巨視的スケールと、乱流のエネルギーが散逸する微視的スケールの間には 10 桁以上

とされる乖離が存在し、微視的スケールから巨視的スケールまでの一貫したシミュレーション研究を困難にしている。巨視的スケールについては電磁流体力学 (MHD) 方程式が良い近似を与えるが、微視的な散逸スケールにおいては MHD モデルが破綻する。他方、微視的スケールの運動が巨視的な流体運動に重要な影響を及ぼす可能性は頻りに指摘されるところであり、近年運動論的シミュレーションが盛んにおこなわれる理由となっている。しかし、運動論的シミュレーションが巨視的スケールまでカバーすることもまた、困難である。

この問題を解決するために、巨視的スケールからのアプローチとしては MHD 方程式に微視的効果の一部を取り入れた拡張 MHD (XMHD) 方程式によるシミュレーションが、微視的スケールからのアプローチとしては粒子シミュレーションや運動論的シミュレーションを巨大化する方向で研究が行われている。しかし、それぞれに長所と短所があるため、乱流構造の解明は容易ではない。

本研究の目的は、XMHD 方程式を基礎に、乱流の構造の理解と実現象の解明・予測を可能にするシミュレーションコードを開発することである。XMHD モデルでは、微視的効果のために生じる分散性波動 (ホイッスラー波) の影響で時間刻みが空間離散化幅の二乗に比例して小さくなるなど、数値シミュレーシ

ョンを行ううえで極めて不都合な難点がある。また、MHD、XMHD を問わず、流体モデルの導出過程において、分布関数の方程式のモーメントをとって流体モデルとして完結する際に、何らかの形で局所平衡仮説などに基づく近似を行う必要がある。この近似が微視的効果の不完全さとして現れることも大きな問題点として知られている。

我々はこの問題を解決するために、巨視的なスケールについては XMHD モデルを解きつつ、広範な微視的効果については現象論的モデル（サブグリッドスケールモデル、SGS モデル）で代替する、ラージ・エディ・シミュレーション (LES) 手法を採用する。微視的効果の不完全さは、SGS モデルを構築する際に、粒子シミュレーションなど微視的手法による結果と照合し、補完することを想定している。この手法を用いた大規模シミュレーションにより、巨視的・微視的スケールの両者を広範に含むシミュレーションを実現する。

3. 当拠点公募型研究として実施した意義

本研究課題では、大規模シミュレーションによる高レイノルズ数乱流を目指す観点から、1 ノードあたりの主記憶容量が大きく、且つ、高速メモリが搭載されていることを特に重視している。これは、擬スペクトル法によるシミュレーションコードが、主にメモリアクセスとノード間通信によって律速される性質をもっているためである。東京大学情報基盤センターの Oakforest-PACS スーパーコンピュータは、主記憶 96GB と高速メモリ (MCDRAM) 16GB を擁していることから、本研究の目的に最適である。さらに、拠点研究機関には、Knights Landing のための最適化について先導的な研究者が在籍する。また、本課題の共同研究者には、先端計算機環境でのコード最適化の研究を行う計算機科学の研究者や、重要なアルゴリズムである FFT についての専門家、可視化をテーマとする計算科学

の研究者が含まれるため、Knights Landing を使用する環境下で学際研究を推進する体制が整っている。このような理由から、本研究課題を東京大学情報基盤センターで実施する必要がある。

乱流シミュレーション研究では、その時々「最新・最大規模」の数値シミュレーション結果が実現現象に対して正しい数値予測を与えず、数年後には大規模なシミュレーションによって結果が覆されることもあり得る。本研究課題はこの問題の克服を目指すものである。応用上重要な巨視的スケールについて定性的に正しい結果を与えるシミュレーションを実現することは、物理としての乱流の普遍性を解明する研究のみならず、乱流の予測と制御に関わるシミュレーションの信頼性向上に大きく貢献できる。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

前年度までの研究では、非圧縮性 Hall MHD/XMHD 用擬スペクトルコードの開発を行い、LES のための基礎データ取得を目的とした研究成果を得てきた。また、シミュレーションコードの高度化・最適化の作業を通じて、より高効率なシミュレーションの実行を実現するとともに、シミュレーション結果の同時可視化を目指したライブラリ「4次元ストリートビュー」(4DSV)の開発をおこなった。

LES のための基礎データに関する研究では、磁場閉じ込め核融合の周辺プラズマ近傍で発生する、Current Interchange Tearing Mode (CITM) 不安定性とその後の乱流遷移について、課題代表者がこれまでの研究で開発した Sub-grid-scale (SGS) モデル (Miura, Araki, and Hamba 2016) を用いたシミュレーションを行った。CITM は磁場閉じ込め核融合のエッジプラズマ研究で提唱された不安定性で、初期には大きな圧力勾配に起因する交換型不安定性として振る舞うが、途中からはテアリング不安定性への遷移を生じること

が特徴である。このモデルは、トカマク型核融合実験装置で報告されている間欠的な電流放出を説明する機構の一つとして提案されている。我々のシミュレーションにより、この CITM が、理論モデルが想定通りに成長することを確認できた。さらに、CITM の成長段階で反磁性ドリフト流が発生する場合に、不安定モードとドリフト流の相互作用による乱流遷移が発生することを確認した。これらの成果は国際会議 (APS-DPP) で報告された。

この研究の過程で、SGS の Hall 項に関わる性質を改良した新しい SGS モデルを開発した。この新しい SGS モデルには、Hall 項に起因するホイッスラー波の高周波成分を強く抑制することで、シミュレーションを安定化させる効果がある。LES と直接数値計算 (DNS) の結果を比較した。これにより、新しい SGS モデルを用いた LES が期待通りの精度で DNS の諸物理量を再現することを確認した。

さらに、Braginskii モデルや、その派生型の XMHD モデルでは適切に表現できない運動論的効果を解析し、SGS モデルの一部として組み込むことを目的に、PIC コードによる磁気リコネクションシミュレーションを実施した。イオンの実空間軌道や速度空間での分布などの解析から、イオンが駆動型リコネクション現象の過程に於いて実効的な加熱を受ける機構の一端を明らかにした。これらの成果は、国際会議および国内会議で発表された。

シミュレーションコードの最適化、高度化の観点からは、3 次元 FFT ライブラリを p3dfft (<http://www.p3dfft.net>) から、本研究課題の共同研究者 (高橋) が開発した ffte (<http://www.ffte.jp>) に換装し、ノード間通信に隠ぺいなどの改良を施した。この結果、3 次元 FFT ライブラリの換装前に比べて、計算時間が 15-35%短縮された。格子点数 2048³、ノード数 2048 の場合、演算速度のピーク性能比は、富士通製 FX100 で 1.8%、Oakforest-

PACS では 0.6%である。

同時可視化ライブラリ 4DSV については、シミュレーション中に全方位可視化を多数実行するための可視化ライブラリ (多視点・全方位・同時可視化ライブラリ) と、このライブラリを使用して生成された多数の全方位動画群から対話的に動画像列を抽出・表示する動画データブラウザの 2 つの基盤的なソフトウェアの開発を進めてきた。多視点・全方位・同時可視化ライブラリは、MPMD (Multiple Program Multiple Data) 型の並列計算ライブラリとして実現した。可視化にはオープンソースの汎用可視化クラスライブラリ KVS を利用している。可視化プログラム側に問題が生じてシミュレーションが影響を受けることがないように、シミュレーション側と可視化側のプログラムを独立させ、情報がシミュレーション側から可視化側にのみ流れるように工夫されている。Oakforest-PACS で性能を測定した結果、シミュレーションと同程度の時間で複数の同時可視化ができることを確認できた。

動画データブラウザの開発においては、複数の全方位動画像を読み込み、ユーザからの指示に応じて対話的にカメラ位置や視線方法を変更するという最も基本的な機能が実現可能したうえで、KVS を利用したリファクタリングにより高速処理を可能にした。

5. 今年度の研究成果の詳細

平成 31 年度 (令和元年度) も、この課題の主要な要素として【A】XMHD モデルによる乱流シミュレーション研究と、これをもとにした SGS モデルの開発、【B】XMHD 乱流の大規模 LES コードの最適化 (主に 3 次元 FFT 部分の高速化)、【C】大規模並列シミュレーションデータを解析する可視化手法「4 次元ストリートビュー」の導入の 3 つを掲げ、研究を進めた。以下では、各項ごとに今年度の研究成果を述べる。

【A】Hall MHD モデル(XMHD モデルの一つ)において、粘性に対する磁気拡散（電気抵抗）率の比（磁気プラントル数）が高い場合について、一様等方乱流の数値シミュレーションを実施した。高磁気プラントル数の場合、速度場のエネルギースペクトル $E_k(k)$ に対する運動方程式の非線形項の寄与が小さいため、ローレンツ力と粘性のバランスで形成される新しい冪則 $E_k(k) \sim k^{-5/2}$ の領域が発生し得ることがわかった。

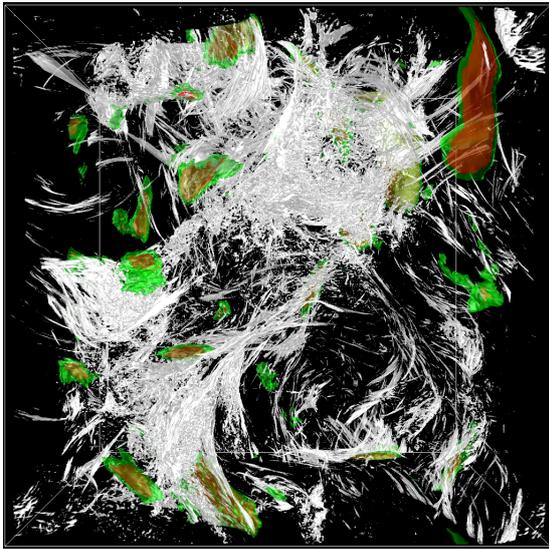


図1:磁気プラントル数100のHall MHDシミュレーションの可視化結果。灰色、緑色および赤色は電流密度、エンストロフィー密度（中程度）、エンストロフィー密度（高）を表す。

他方で、磁場のエネルギースペクトルは、これまでの研究でよく知られている冪則 $E_k(k) \sim k^{-7/3}$ から、少しずれが生じる傾向がみられた。また、この冪則を発生する現象論的モデルを開発した。これらの冪則に対応して、実空間ではリボン状の電流の塊が頻繁に放出されることが可視化によって確認され、ホイッスラー波との関係も伺える（図1）。これらの成果は、the 17th European Turbulence Conference (ETC17, 2019年9月3日-6日、トリノ、イタリア)において口頭発表した後、追加シミュレーション結果を加えて査読付き

論文誌に投稿、出版された(Miura et al., Phys. Rev. E vol.100, 2019)。

上記の成果について、ETC17の参加者から、流体の圧縮性によってエネルギースペクトルの冪則の指数が変わるとの指摘がなされた。令和二年度の研究においては、この点の検証を進めるため、シミュレーションモデルを非圧縮性から圧縮性に変更する予定である。このため、当初の研究予定にあった、Particle-in-Cellシミュレーションとの連携やシミュレーションコードのハイブリッド化は、圧縮性効果の影響を検証した後に実施することにした。

他方、通常の粘性に代わってジャイロ粘性項が流体の運動を抑制する場合についての一様乱流シミュレーションを実施している。ジャイロ粘性項は、流体力学的不安定性の成長率を低下させる場合があることは既に知られているが、一様乱流のなかにおいてどのように振る舞うかは、明らかになっていない。我々はHall MHD乱流と拡張MHD乱流の比較対照を通して、ジャイロ粘性項の基本的な性質を明らかにする方針である。この一様乱流のシミュレーションについては、研究会において、ill-posed problemではないかとの指摘があった（京都大学数理解析研究所共同研究（公開型）「乱流の基礎的相似則の再検討」、2019年7月）ため、この指摘についての検討も合わせて進めている。

【B】前年度までの研究において、3次元FFTライブラリを、共同研究者(高橋)が開発したFFTEに換装した。他方、このシミュレーションコードを本課題の共同研究者以外に渡すこともあり得ること、【C】において4次元ストリートビューを組み込むベースとなるコードがP3DFFT用であること、問題によってはFFTEが想定していない格子点数でシミュレーションを行うことがあり得ることを考慮し、コン

パイル時にプリプロセッサの指定により、引き続き P3DFFT も使えるようにモジュール構造の整理を行った。

【C】これまで、4次元ストリートビューの可視化ドライバーとして、共同研究者(坂本)が開発した KVS を使用してきた。このライブラリは、本研究課題で使用する Oakforest-PCAS システムでは容易に稼働するものの、FX100 ではライブラリ構築が容易ではなかった。Oakforest-PACS 以外のシステムへのポータビリティを確保しつつ開発を継続するため、KVS に加えて、in-situ 可視化ライブラリ VISMO (Ohno and Ohtani, 2014) も可視化ドライバーとして利用できるように改良を加えた。この結果、Oakforest-PACS、FX100 の両方で容易に利用できるようになり、開発の効率が向上した。これらの成果のうち、VISMO のみを用いた可視化については、国内のシンポジウム、学会で発表した(新型コロナウイルス肺炎のため、学会は中止されたが予稿集は掲載され、発表扱いとなっている)。【A】の項で述べた国際会議(ETC17)および査読付き論文(Phys. Rev. E)でも VISMO の画像が使用されている。Phys. Rev. E の画像は、同誌が各号の図を紹介する Kaleidoscope の項で取り上げられた (<https://journals.aps.org/pre/kaleidoscope/pre/100/6/063207>)。また、4次元ストリートビューについての最新の成果については、現在査読付き雑誌に投稿中である。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

本研究課題では、2019 年度までと同様に、課題【A】 - 【C】の3グループに分かれて研究を進める。

【A】乱流素過程への微視的効果の解明と SGS モデル開発(担当者:三浦、半場、宇佐見、大谷):

令和二年度は、非圧縮性 XMHD シミュレーションコードを圧縮性 XMHD シミュレーションコードに変更する。(これについては【A】【B】共通。)これに伴い、圧縮性 Hall MHD モデルや圧縮性 XMHD モデルによる擬スペクトル法直接数値シミュレーションを行い、非圧縮性モデルとの比較を行う。

圧縮性モデルには、非圧縮性モデルには現れないパラメータ(たとえばベータ値、すなわち磁気エネルギーに対する熱エネルギーの比)が現れるため、これらのパラメータについてのパラメータサーベイが必要である。現状では、圧縮性 XMHD 直接数値シミュレーションが可能になりつつあるが、大規模数値シミュレーションに関しては最適化を待って実施する。

LES の観点からは、LES に必要な SGS モデルの再調整(Smagorinsky 係数など)もしくは新規開発が必要である。これは、圧縮性モデルの LES が、圧力加重フィルターと呼ばれるフィルタリング操作を行うのが一般的であり、非圧縮性モデルの変数と考え方が異なることに原因の一つがある。この点について共同研究者と検討を進め、モデルの平成二年度内の確定を目指す。従って、令和二年度には、圧縮性 XMHD シミュレーションコードを用いた直接数値シミュレーションの実施と、これをもとにした SGS モデル開発を優先し、LES の実施は努力目標とする。また、前年度から引き続き、非圧縮性シミュレーションによる研究も継続する。

また、Particle-In-Cell(PIC)法との連携による SGS モデルの改良を努力目標として想定する。これは、既に述べたように、平成 31 年度課題で実施の予定であったが、国際会議での指摘を受けて、圧縮性 XMHD モデルへのシミュレーションモデルの変更を優先することにした経緯がある。本件に関わる最初の目標は、圧縮性 XMHD コードによる磁気リコネクションシミュレーションを実施し、PIC によるシ

ミュレーションと結果との相違を確認したうえで、その違いを極力 SGS モデルで埋めることである。本件は圧縮性 XMHD シミュレーションコードの開発と最適化、SGS モデルの再調整あるいは開発に目途がついた段階で着手するため、必ずしも令和二年度中の実施には拘らない。

【B】XMHD 乱流の大規模 LES コードの最適化
(担当者:三浦英昭、片桐孝洋、中島研吾、高橋大介)

シミュレーションモデルを圧縮性 XMHD モデルに変更することに伴い、Oakforest-PACS でのシミュレーション実施のために、シミュレーションコードの最適化を再度見直す。

物理モデルの非圧縮性から圧縮性への変更に伴い、プラズマの運動を記述する場の量が増える。さらに、運動方程式の非線形性が 2 次の非線形性から 3 次の非線形性になる。このため、aliasing 誤差を取り除くために、実効的な波数空間での解像度を、これまでに比べて狭くする必要がある。このような変更は、シミュレーションコードの各所において様々な記述の変更を要求するため、最適化の観点からもシミュレーションコードを見直す必要がある。最終的には、非圧縮性拡張 MHD モデルと同程度の実行効率を得られるように、最適化を行う。なお、これまでは、FX100 と Oakforest-PACS を念頭に開発・最適化を行ってきたが、今後は Oakforest-PACS と NEC SX-Aurora TSUBASA を念頭に最適化を行う。

さらに、4 次元ストリートビュー (VISMO 版) の実装に合わせて、1 ノード内のコアグループをシミュレーション用と可視化用に分けるなど、これまで行ってこなかった工夫を試みる予定である。(これは、努力目標とする。)

【C】大規模並列シミュレーションデータを解析する可視化手法「4次元ストリートビュー」の導入 (担当:陰山聡、坂本尚久、山本孟正):

2019 年度に開発した VISMO ベースの in-situ 可視化では、一つの視点から全方位の可視化をするために VISMO のレンダリング関数を (上下前後左右の 6 方向に対応して) 6 回呼び出す方法を採用していた。従って一視点あたり 6 枚の可視化画像が出力され、その 6 枚の画像を融合して 1 枚の全方位画像にする処理は別途行う必要があった。2020 年度は、これを改良し、一回の関数呼び出しで全方位画像が生成されるような VISMO の機能を実装する。この改良により 4 次元ストリートビューにより解析効率が大幅に向上することが期待できる。

また、全方位動画群を対話的に解析するための PC 用のアプリケーション「動画データブラウザ」の改良も行う。このアプリケーションの中心的な機能は既に完成しているが、実際のシミュレーションの解析に本格的に活用し始めた結果、ユーザーインターフェース部分には改善すべき点がいくつか見つかった。そこで、2020 年度は動画データブラウザのユーザーインターフェース部分を汎用のアプリケーションフレームワーク Qt 使って大幅に書き直す。

7. 研究業績一覧 (発表予定も含む)

(1) 学術論文 (査読あり)

- [H. Miura](#), J. Yang, and T. Gotoh, “Hall magnetohydro-dynamic turbulence with a magnetic Prandtl number larger than unity”, *Phys. Rev. E* 063207, vol. **100** (2020).
- K. Uemori, N. Sakamoto, N. Ohno, and [A. Kageyama](#), “YYZVis: An Efficient Visualization Toolkit for Yin-Yang-Zhong Grid Dataset”, *J. ADV. SIMULAT. SCI. ENG.*, vol. **7**, pp.15-33 (2020).

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)

・K. Yamamoto and A. Kageyama, "In-Situ Visualization with Membrane Layer for Movie-Based Visualization", Lecture Notes in Computer Science (proc. ICCS 2019), vol. 11540, pp. 588-594 (2019).

(3) 国際会議発表 (査読なし)

・H. Miura, J. Yang, and T. Gotoh, "High Magnetic Prandtl Number Magneto hydro-dynamic Turbulence under Hall Effect", the 17th European Turbulence Conference (Sep. 3-6, 2019, Torino, Italy).

・H. Miura, and F. Hamba, "DNS and LES of homogeneous MHD turbulence under Hall and FLR effects", the 61st Annual Meeting of American Physical Society Division of Plasma Physics (Oct. 21-25, 2019, Fort Lauderdale Florida, U.S.A.).

・W. Horton, H. Miura, and L. Zheng, "Nonlinear Extended MHD Simulations of turbulent CITM for a study of transport at edge-plasma SOL", the 61st Annual Meeting of American Physical Society Division of Plasma Physics (Oct. 21-25, 2019, Fort Lauderdale Florida, U.S.A.).

・H. Miura, and F. Hamba, Large eddy simulations of magnetized plasmas described by extended MHD model, the 28th International Toki Conference (Nov. 5-8, 2019, Toki, Japan).

・K. Araki and H. Miura, Nonlinear energy transfer between parity reversal invariant subspaces in incompressible Hall magnetohydro-

dynamic turbulence, the 28th International Toki Conference (Nov. 5-8, 2019, Toki, Japan).

・A. Kageyama, "4-D Street View: Movie-based visualization method for HPC", AAPPS-DPP 2019, Invited Talk (Nov. 6, 2019, Hefei, China).

(4) 国内会議発表 (査読なし)

・三浦英昭, 拡張 MHD 乱流の空間構造, 京大 数理解析研究所 RIMS 共同研究(公開型)「乱流基礎相似則の再検討」(2019 年 7 月 24 日-26 日).

・三浦英昭, 大野暢亮, 大谷寛明, "In-situ 可視化ライブラリ vismo を用いた一様等方性乱流の構造解析", 第 33 回数値流体力学シンポジウム(2019 年 11 月 27-29 日, 北海道大学).

・三浦英昭, 大野暢亮, 大谷寛明, "In-situ 可視化ライブラリ vismo による乱流管状渦構造形成可視化解析", 日本物理学会春季大会(2020 年 3 月 16-20 日, 名古屋大学)(新型コロナウイルス肺炎流行に伴い中止、予稿のみウェブ掲載).

・陰山聡, "4次元ストリートビュー: 計算機シミュレーションの新しい可視化手法", 第 36 回 プラズマ・核融合学会年会, (2019 年 11 月 30 日, 中部大学), 招待講演.

・陰山聡, "動画ベースの可視化手法 4次元ストリートビュー", CFD シンポジウム (2019 年 11 月 29 日, 北海道大学)

・陰山聡, "可視化手法の新技术 4次元ストリートビュー", STE シミュレーション研究会 計算プラズマ物理の新潮流 (2019 年 09 月 25 日, 広島大学東千田キャンパス)

・陰山聡, "全方位動画に基づく新しい可視化手法", プラズマシミュレータシ

ンポジウム(2019年09月20日, 核融合
科学研究所)

・陰山聡, “球内部のMHDシミュレーション手法と可視化ツール”, JpGU(日本地球惑星科学連合大会)(2019年05月30日, 幕張メッセ)

(5) その他(特許, プレスリリース, 著書等)