

jh190016-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)

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の重要問題に適用することである。今年度は、シミュレータの電磁界ソルバー部に前年度までにテストを完了している陰解法を導入し、より長時間の計算対象に適用可能なモデルとする。また磁気圏マクロスケールと人工衛星近傍ミクロスケールなど、異なる計算モデル間で情報をやり取りしつつ同時並行で計算を進める「連成計算フレームワーク」の開発を開始する。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

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、京都大学および北海道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

三宅洋平 (神戸大学)	研究統括、全粒子モデルコード開発と応用
中島浩 (京都大学)	メニーコア向け PIC 高効率計算手法の検討
加藤雄人 (東北大学)	粒子-流体ハイブリッドモデルコードの開発と応用
小路真史 (名古屋大学)	非線形イオンプラズマ波動励起シミュレーション
臼井英之 (神戸大学)	月磁気異常・太陽風相互作用のシミュレーション解析
大村善治 (京都大学)	非線形波動粒子相互作用の理論的アプローチ
岩下武史 (北海道大学)	EMSES におけるポアソン方程式並列求解手法の検討
深沢圭一郎 (京都大学)	流体モデルコードの開発と応用
佐伯拓哉 (神戸大学)	メニーコア向け PIC 高効率実装

表 1: 研究の役割分担

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の重要問題に適用することである。特に、メニーコアアーキテクチャ向けの高効率プラズマ粒子計算実装に取り組んでいる。PIC 法は、粒子と格子点上電磁場という、異なるデータ構造間の相互作用計算が負荷の大部分を占める。当問題に取り組むことは、階層化されたメモリアーキテクチャに対するアクセスパターン最適化など、近年の大規模計算システムに共通して必要とされる、高度な実装技術の集積に貢献できる。課題申請時に記載した本年度の実施計画を以下に示す。

①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。

②「全粒子」や「粒子-流体ハイブリッド」など、対象とする時空間スケールの異なる複数のプラズマシミュレーションモデル間で必要な情報をやり取りしながら、同時並行的に計算を進めていくマルチスケール連成計算フレームワークの開発を行う。

3. 当拠点公募型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。

学理的応用としては、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

科学衛星や観測ロケットで幅広く用いられるダブルプローブ電場計測では、飛翔体から進展した、対を成すプローブ電位の差をとることで飛翔体自体の帯電の影響を除去している。しかし、何らかの理由により、衛星周辺に非対称な電位構造が形成されると、その影響は差動計測では除去されず、不要電場として観測データに混入する。このような非対称電位構造を作る原因として、衛星ウェイクや光電子放出の影響が盛んに議論されてきた。これらの原因に加え、負に帯電した衛星で反射された背景電子が、磁力線方向にガイドされることで、非対称電位構造ひいては不要電場が発生することを示唆する数値結果を得た [Miyake et al., 2020]。本研究は、特徴サイズが電子ジャイロ半径より十分に大きい物体周囲に生じるプラズマじょう乱の一端を明らかにするものである。

3次元 Particle-in-Cell シミュレーション手法に、科学衛星などの非プラズマ境界の数値的取り扱いを追加した EMSES シミュレーションコード [Miyake and Usui, 2009] を用いる。本計算では、オーロラ粒子加速領域の観測を集中的に実施した Freja 衛星 (スウェーデン宇宙公社) [Lundin et al., 1998] と、極域電離圏プラズマの相互作用をシミュレートし、衛星周辺の静電環境構築を行った。衛星はプラズマ中を超音速で移動しているものと仮定した。当該環境では、衛星の特徴サイ

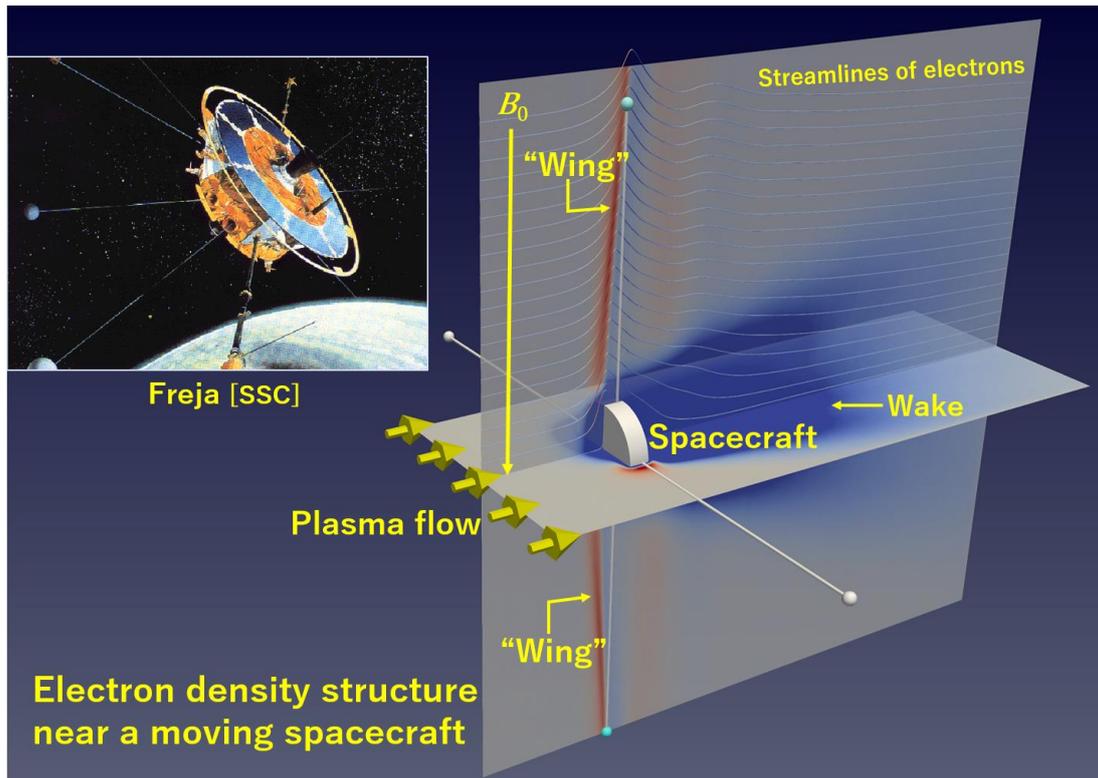


図 1 衛星周辺の電子密度構造. 今回の計算では衛星下流側のウェイクの他に、沿磁力線方向に Wing 構造が認められた [Miyake et al., 2020; Zastrow, 2020].

ズである 2 m に対して、電子とイオンの旋回半径がそれぞれ 4 cm と 1.5 m となっており、衛星周辺空間スケールにおいて電子は十分に磁化されている。ノルウェー・オスロ大学との共同研究を背景に、Freja 衛星のダブルプローブ観測データを入手し、そこに含まれる特徴的な電場波形が衛星プラズマ相互作用によって説明できるか否かを検証した。

衛星と超音速プラズマ流の相互作用により、衛星表面の負電位（およそ -0.53 V）の発達とともに、衛星周囲に特徴的なプラズマ密度構造が生じた。その概要を電子密度分布として図 1 に示す。衛星の存在によりプラズマ流が阻害されることにより、衛星の下流側にはウェイクと呼ばれる低密度領域が形成される。ウェイク領域では熱速度の小さいイオン粒子の侵入は著しく制限される一方で、熱速度の大きい電子は比較的侵入しやすいために、負電位が発達する。このような衛星後方のウェイク形成については、過去に多くの検討がな

されており [e.g., Al’pert et al., 1966]、近年では磁化プラズマ中の非対称を持つウェイク構造についても議論が行われた [Usui et al., 2019]。

本シミュレーションにおいては、衛星前面からほぼ沿磁力線方向に伸展する電子の粗密構造が確認された。この非常に細く、指向性の高い密度じょう乱は、最前方に電子密度の増加が認められ、その後方には低密度領域が続く構造となっている。当該密度構造の進展方向は、わずかに磁力線の方向から傾いている。これは次のように説明される。衛星位置で形成された密度変動が磁力線に沿って遠方に伝搬するとともに、媒質としてのプラズマ自体が後方に移流する。したがって、衛星静止系における密度分布としては、磁力線からプラズマの移流方向にわずかに傾いた構造を形成する。このことは、磁力線と密度じょう乱伸展方向の間の角度から、密度変動の伝搬速度を算出できることを示している。実際に、

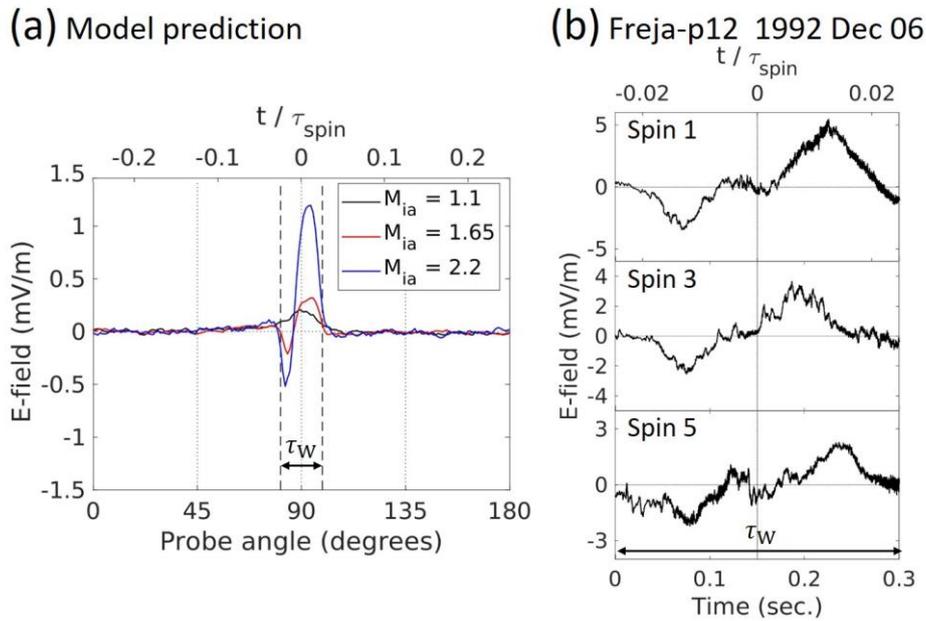


図2 電子 Wing 構造に起因するプローブ電場波形. (a) 計算機シミュレーション、および(b) Freja 衛星観測、で得られた電場波形.

伝搬速度を計算した結果、波長が数 m の Langmuir 波の群速度と良い一致を示すことが判明した。このような波の伝搬と媒質の移流の複合構造は、Alfvén 波や whistler 波などの他の波動モードに関連して観測される Alfvén wing [e.g., Drell et al., 1965] や whistler wing [e.g., Stenzel and Urrutia, 1989] などにも見られ、その類似性から本計算で得られた密度構造を「electron wing」もしくは「Langmuir wing」と名付けることとした。

電子 Wing 構造において、最前面の高密度帯とその下流に形成される低密度帯は、プラズマ電子が負に帯電した衛星から受ける作用と密接に関わっている。まず衛星の前面のシース領域では、衛星の負電位によって電子が圧縮され、ついで衛星通過領域から外側に排斥される。高密度帯はこうして形成された電子の集団が沿磁力線かつ衛星から遠ざかる方向に伝搬する凝縮波である。したがって高密度帯では、外向きの電子流が観測される。次いで磁力線が後方に移流し、衛星本体に接続されると磁力線上の電子は衛星表面との接触

により急速に失われる。磁力線平行方向の速度分布関数上では、衛星から到来する速度成分が選択的に損失する。このため、当該磁力線上では、電子の密度は減少し、内向きの電子流が観測される。

電子 Wing 構造の伝搬可能距離は Langmuir 波の減衰率から見積もることが可能である。極域電離圏の物理パラメータに基づきこれを計算したところ、衛星から数 10 m、もしくは数 100 デバイ長に相当する距離を伝播可能であることが導かれる。このことから、電子 Wing 構造は衛星から 10 m 以上の距離に配置されたプローブの電位を変化させ、ダブルプローブ電場に影響を及ぼす可能性がある。実際、シミュレーション計算によって予測したプローブ計測電場変動と、実際に Freja 衛星観測データから発見された不要電場の波形パターンとパルス幅を比較したところ、図 2 に示すように両者は良い一致を示すことがわかった。

衛星を起源とする周辺電位構造の変化や、プローブ電場計測干渉に関する先行研究では、光電子放出や衛星ウェイク形成にその焦点に

当てられてきた。本研究では、京都大学・先端電波科学計算機実験装置によって可能となった大規模粒子シミュレーションにより、新たに磁力線に沿った電子 Wing 構造の形成が科学衛星観測に影響を及ぼすことを示す研究成果を得た。当該現象は、電子ジャイロ半径が衛星の特徴サイズに比べて十分に小さい場合に顕著となり、具体的には電離圏プラズマ環境の衛星・サウンディングロケット観測において重要である。また、本計算では、電子 Wing の形成に伴い、不安定な電子速度分布関数や電流構造が確認されている。このことは衛星を起源とするプラズマ不安定性が、波動観測にも干渉する可能性を示唆しており、今後詳細な検討を実施する計画である。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

本節では、課題申請に挙げたの 2 つの技術開発要素に関する進捗状況を記述する。

①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

PIC 法を用いた長時間のプラズマ現象解析において従来から課題となっていた、時間刻み幅に対する数値安定の制約を緩和するため、陰解法に基づく電磁界ソルバーの開発と実装を進めた。昨年度中に実施した、電磁界ソルバー自体の開発と単体での動作検証に続き、プラズマ粒子シミュレーションへの実装と動作テストを行った。結果として、数万ステップまでの比較的短時間の計算においては、従来の 10 倍の時間刻み幅で正常なプラズマ粒子計算を実施することに成功した。結果として、当該計算では様々なプラズマ条件下で、平均して 9 倍以上のゲイン(実質上の高速化)が得られた。このうち、陰解法導入そのものによるオーバーヘッドは軽微であり、時間刻み幅の拡大に伴う粒子移送通信コストの微増が主なオーバーヘッド要因であった。

一方、年度中間報告時は、10 万ステップを超える長時間計算において計算の不安定化が

確認された。その後の調査により、各格子点上の磁界の時間変動 δB に関する連立一次方程式を、フーリエ空間上で求解する際の展開関数の選び方が原因である可能性が濃厚となった。通常の離散フーリエ変換を用いると、 δB に関して周期境界条件を課したものとなり、全空間格子点の δB の総和は 0 でなければならないが、アンテナ等で電磁エネルギーを注入する場合等はこの前提条件と整合しない。この考察に基づきフーリエ変換の代替として sine/cosine 変換を用いると安定性が改善することが確認された(ただしこの場合は計算空間の端で電磁波は反射する)。今後より詳細な数値特性の分析を行い、物理シミュレーションを安定に行うための準備を完了させたい。

②地球磁気圏連成プラズマシミュレーションフレームワークの開発

地球磁気圏の大規模現象と、電子のダイナミクスが重要となるミクروسケールの宇宙プラズマ現象は、これまで別個の計算モデルで研究が行われてきた。両者の間の関わりをより定量的に評価するには、これらの異なるモデルの計算を並行実行し、その途中結果を相互に参照しながら計算を進める「連成シミュレーションモデル」が必要となる。そこで、次世代スーパーコンピュータへの相互結合シミュレーションの高効率実装を目指した連成フレームワークの開発と実用化に着手した。

今年度の取り組みとして、各シミュレーションモデルの独立性を維持しつつ、モデル間の情報伝達を高効率なプロセス間通信で実装するために、下記のモジュールの開発を、九州大学の南里豪志教授の協力によって進めた。

1. MPMD (Multiple Program Multiple Data)連成のための Coupler プログラム：割り当てられた計算資源の各モデルへの振り分けや、一方のモデルの計算条件に応じて、他方のモデル計算開始を動的にトリガーする役割を担う中間プログラムを作成した。当該プログラムは連結対象の各モデルコードに対す

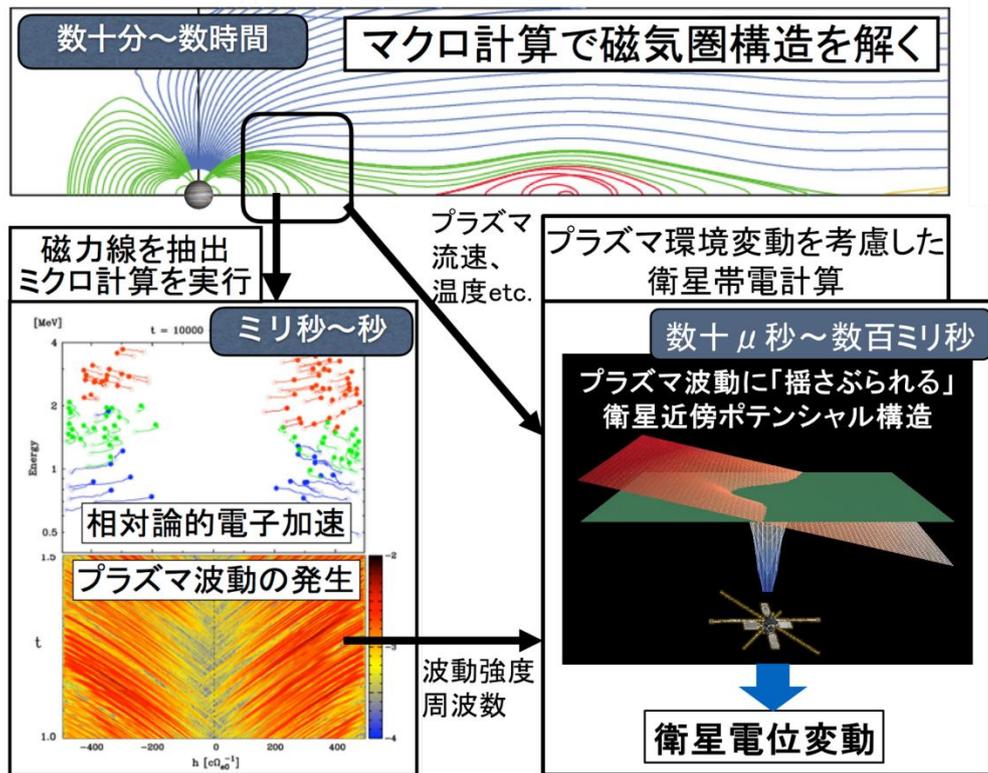


図3 宇宙プラズマ分野で興味あるターゲットとなる連成シミュレーションモデル。

るポーリングの処理を担っており。

2. 片方向通信モジュール：実行中の計算条件に応じて、通信パターンを動的に決定することを容易にするため、非同期の片方向通信を用いたデータ転送モジュールを作成した。

これにより、一方のモデル計算で発生した特定の事象に応じて、他方のモデルへの情報伝達を実行するなど、イベントドリブンな連成計算モデルを容易に構築できる。これらのモジュールプログラム群をライブラリ化し、CoToCoA と名付けて開発とリリースを実施する予定である。

当課題における連成シミュレーションのターゲットは、太陽面爆発に伴って生じるじょう乱が、地球磁気圏構造と高エネルギー粒子環境、ひいては人工衛星周辺環境の如何なるじょう乱につながるかを、定量的に評価することである。このため、

1. 地球磁気圏グローバル MHD シミュレーション
2. 地球磁気圏高エネルギー粒子環境のミク

ロ物理プロセス PIC シミュレーション

3. 人工衛星近傍電磁気環境じょう乱の PIC シミュレーション

を組み合わせた「MHD・PIC 連成シミュレーションモデル」(図3)を構築することが最終目標となる。

上述のフレームワークを利用して MHD とハイブリッドPIC連成シミュレーションテストモデルを実装し、性能評価を行った。磁気圏 MHD シミュレーションの結果から磁力線を計算し、ハイブリッドPICシミュレーションに繋げるためにかかる通信部分の時間を評価した。並列数によって利用する総グリッドサイズが変化しない strong scaling では、 $400 \times 400 \times 400$ の 3 次元グリッドを利用し、並列プロセス数当たりの計算量が一定の weak scaling では $100 \times 100 \times 100$ / プロセスのグリッドを使い評価している。図4に性能測定結果を載せる。図中の sampling は計算時間であり、その他は CoToCoA の関数の実行時間となる。各関数の詳細は省くが、基本的には各

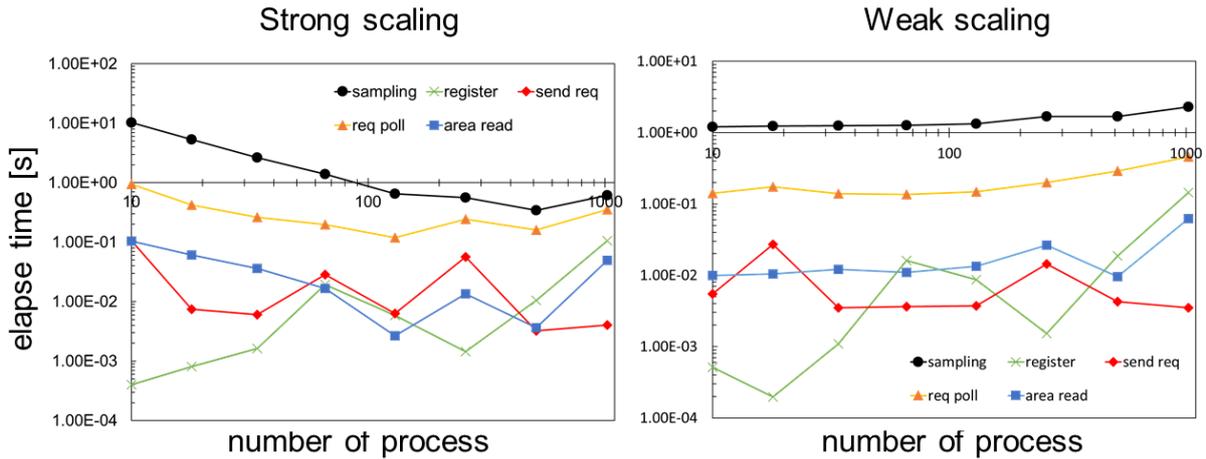


図4 MHD-ハイブリッドPIC 連成計算の性能評価。

関数は 0.1 秒以下 (req poll のみ 1 秒以下) の実行時間であり、プロダクトランでは sampling 時間が 100 倍以上になることを考えると、元の計算に 1% の影響を与えない程度であり、利用することによる計算性能低下は防いでいる。また、register はプロセス数が増えるほど登録する数が増えるため時間がかかっていく関数だが、1000 並列程度では 0.1 秒以下であり、エクサスケールでも大きな値にならないと想定される。また、weak scaling ではその他の CoToCoA 関数はスケーリングしており、並列性は悪くないと評価できる。

さらに、人工衛星近傍電磁気環境じょう乱の PIC シミュレーションについては、MHD・PIC 連成シミュレーションモデルとの結合計算に向けて、PIC シミュレーションコードとポスト処理プログラムの結合を CoToCoA 実装のインスタンスとして実装し、独立に開発されたプログラム間で任意のタイミングで所望のデータ転送が可能であることを確認した。具体的には、テスト粒子計算に基づく速度分布関数ソルバーを、上述の全粒子コードと連成させることにより、衛星周辺に生起するプラズマじょう乱現象の各時刻における準定常速度分布関数を取得することが可能となった。128³ 立方格子を用いた 3 次元計算において、「全粒子モデル 1 ステップあたりの計算時

間」、「テスト粒子計算が完了するまでの時間」、「1 回の CoToCoA 通信にかかる時間」の比を測定したところ、1:370:0.92 であった。この測定結果から、テスト粒子計算の頻度を、全粒子モデル計算における 400 ステップに一回以下とした場合 (このときの処理時間の比は 400:370:0.92 となる) には、テスト粒子モデルによる速度分布計算時間は衛星プラズマ環境計算時間に隠蔽され、全体の計算を律速しないことがわかる。またその際に CoToCoA 通信コストは無視できるほど小さいことがわかった。この基礎データを元に、利用可能な計算資源を結合対象の各プログラムに適切に分配することにより、計算能力の有効活用が可能になると考えられる。

○当初目標の達成状況と今後の展望

課題申請時に計画として挙げた①高速電磁界ソルバーの実用化、と②連成計算フレームワークの開発、の双方で進展が得られた。①については、年度途中において確認された安定性の課題を解決する手がかりを得ることができたことにより、(現時点では物理計算への適用は実現していないものの) その見通しは明るい。②については、異なる空間スケール、データ構造、並列化手法を有する複数のシミュレーションコードを相互に結合するためのモジュール群の開発・テストに着手し、これ

らをライブラリ化する目途が立った。これらの進捗よりおよそ 90%の達成状況と評価できる。またこれまでの研究活動による学術成果が、学術論文誌に掲載されるのみならず、週刊の地球科学雑誌上においても、注目研究成果として紹介されている（成果 11）。

上記の研究実績をさらに発展させるものとして、2020 年度は②の連成シミュレーションに焦点を当てたの JHPCN 課題が採択された。ポスト京時代のハイパフォーマンスコンピューティングに必要となるプログラミング技術開発をさらに加速させる計画である。

7. 研究業績一覧（発表予定も含む）

(1) 学術論文（査読あり）

1. 三宅洋平, 臼井英之, 桐山武士, 白川遼, 田川雅人, 宇宙機近傍プラズマ現象の数値シミュレーション, 混相流, 33(3), 258-266, 2019.
2. Miyake, Y., W.J. Miloch, S.H. Kjus, and H.L. Pecseli, Electron Wing-like Structures Formed at a Negatively Charged Spacecraft Moving in a Magnetized Plasma. Journal of Geophysical Research: Space Physics, 125, e2019JA027379. <https://doi.org/10.1029/2019JA027379>, 2020.
3. Usui, H., Y. Miyake, W. J. Miloch, and K. Ito, Numerical Study of Plasma Depletion Region in a Satellite Wake, IEEE Transaction of Plasma Science, 47, 3717-3723, 2019.
4. Ahmad, N., and H. Usui, Numerical Simulation of Spacecraft Charging Attributed to Ionospheric Plasma in Polar and Equatorial Environment, Indonesian Journal of Geography, 52(1), 98-104, 2020.

(2) 国際会議プロシーディングス（査読あり）

5. Fukazawa, K., Y. Katoh, T. Nanri, and Y. Miyake, Application of Cross-Reference Framework CoToCoA to Macro- and Micro-

Scale Simulations of Planetary Magnetospheres, 7th International Symposium on Computing and Networking Workshops (CANDARW), 121-124, doi: 10.1109/CANDARW.2019.00029, 2020.

(3) 国際会議発表（査読なし）

6. Fukazawa, K., Y. Katoh, T. Nanri, and Y. Miyake, Development of Coupling Framework For Macro And Micro Scale Simulations Of The Magnetosphere, CANDARW, Nagasaki, Japan, 2019.

7. Katoh, Y., K. Fukazawa, T. Nanri, and Y. Miyake, Cross-Reference Simulation by Code-To-Code Adapter (CoToCoA) Library for the Study of Planetary Magnetospheres, HPC Asia, Fukuoka, Japan, 2020.

(4) 国内会議発表（査読なし）

8. Miyake, Y., M.N. Nishino, Y. Harada, W.J. Miloch, and H. Usui, Recent Activities of Solid Body-Plasma Interaction Simulations, Symposium on Planetary Sciences, Sendai, Japan, 2020.

9. Katoh, Y., T. Kimura, H. Nakagawa (Tohoku Univ.), the Planet. & Space Phys. Group in Tohoku Univ., Coupled Planetary Environments: from Surface to Space, Thermal to Nonthermal, and Gyration to Evolution, Symposium on Planetary Sciences, Sendai, Japan, 2020.

10. Fukazawa, K., Y. Katoh, T. Nanri, and Y. Miyake, Application of Cross-Reference Framework CoToCoA to Global and Local Simulations of Planetary Magnetospheres, Sendai, Japan, 2020.

(5) その他（特許、プレスリリース、著書等）

11. Zastrow, M., “Electron Wings” Can Interfere with Spacecraft Measurements, EOS Research Spotlight, 101, <https://doi.org/10.1029/2020EO140428>, 2020（成果 2 の紹介記事）。