

jh200002-NAH

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)

概要

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 Hall MHD 乱流のべき則について新たな知見を得た。シミュレーションモデルを圧縮性 Hall MHD モデルから圧縮性拡張 MHD モデルに変更し、これに伴うコードの改良を行った。このコードを用いたシミュレーション結果の可視化のため、「4次元ストリートビュー」の導入・改良を進めた。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

#該当するものを残してください

東京大学

(2) 共同研究分野

#該当するものを残してください

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) : Hall 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)、大野暢亮 (兵庫県大)、山本孟正 (神戸大) : 4次元ストリートビュー開発

低衝突頻度乱流の普遍法則を解明すること、その理解を、実現象の解明・予測・制御等に応用することは、プラズマ科学における重要課題である。しかし、乱流が包含する巨大な自由度はそれを容易には許さない。流体的にふるまう巨視的スケールだけでも巨大な自由度をもつうえに、乱流のエネルギーが散逸する微視的スケールがさらに巨大な自由度を包含する。流体スケールと微視的スケールの間には巨大な乖離が存在し、微視的・巨視的スケールを無矛盾にシミュレーションするのは困難である。

この問題を解決するために、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行われている。しかし、XMHD 方程式は、微視的スケールに起因する数値不安定性が激しく、安定にシミュレーションを実行するには極めて小さい時間刻みや安定化手法が必要とされる。また、仮に安定にシミュレーションが可能になっても、巨視的スケールから 10 桁に及ぶスケールをカバーすることはできない。さらに、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

2. 研究の目的と意義

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。

本研究の目的は、MHD 方程式に微視的効果の一部を取り入れた拡張 MHD (XMHD) 方程式を基礎に、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) 手法を採用し、微視的効果を取り入れた巨視的シミュレーションを実現することである。SGS モデルを通じてシミュレーションを安定化するとともに、微視的効果の不完全さについても、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・意義がある。

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。以下は、主に 2019 年度の研究成果である。

LES のための基礎データに関する研究では、流体の粘性に比べて磁気拡散率が高い、すなわち磁気プラントル数の大きい乱流の数値シミュレーションを行った。2018 年度までに開発した非圧縮性 Hall MHD 乱流シミュレーションコードを活用し、粘性/磁気拡散率=磁気プラントル数 > 1 のシミュレーションを行ったところ、運動エネルギースペクトルに、これまで知られていなかった新しい冪則の領域が見つかった。これは、粘性が大きく流体の慣性力が作用しないスケールにおいて、ローレンツ力と粘性項のバランスによって形成されることが示された。この成果は

Physical Review E 誌に発表された (Miura, Yang, Gotoh, PRE vol. 99, 2019)。

LES の SGS モデルの開発の観点からは、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について、International Toki Conference (2019 年 11 月) などの国際会議で報告した。

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效果を解析し、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 FX100 (核融合科学研究所 Plasma Simulator, 2020 年 2 月末まで稼動) 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多視点・全方位・同時可視化

ライブラリと、これを利用し絵生成する多数の全方位動画像群から動画像列を抽出・表示する動画データブラウザ等ソフトウェア群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、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については、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基本的機能を実装し、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

この課題は、主要要素として【A】Hall MHD、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、【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 4DSV の導入の 3 つを掲げ、研究を進めてきた。以下では、各項ごとに今年度の研究成果を述べる。

【A】Hall MHD モデルにおいて、磁気プラントル数が高い場合について、2019 年に出版した論文を発展・大型化した一様等方乱流の数値シミュレーションを実施した。2019 年の論文で我々は、流体の慣性力が小さく、ローレンツ力と粘性効果が釣り合うスケールにおいて、これまで報告されていない新しい幕則が速度場のエネルギースペクトルに形成され得ることを報告した。しかし、この研究では磁気プラントル数を大きくするために粘性を大きくとらざるを得ず、速度場は十分に発達した乱流とは言えない状態であった。この問題を解決するため、Oakforest-PACS で実行できる最大規模の数値シミュレーションを 2020 年度に行った。実際には、Oakforest-PACS で

シミュレーションパラメータの調整等を行ったうえで、プロダクトランは核融合科学研究所のスーパーコンピュータ「プラズマシミュレータ」(NEC SX-Aurora TSUBASA)で実行するなど、複数機関を利用した。未だ最終的な結果を得るに至っていないが、2020 年度内に得られたシミュレーションからは、2019 年度のシミュレーションよりも乱流的な性質が強く現れ、また、我々が先に報告したエネルギースペクトルも再現されるなど、良好な結果が得られつつある。これらの成果は、2021 年度に追加のシミュレーションを実施したうえで、査読付き論文誌に投稿する予定である。

【B】上記【A】項で述べた高磁気プラントル数のシミュレーション成果について、2019 年に開催された国際会議 European Turbulence Conference (ETC17)で報告したところ、同会議の参加者から、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。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のが 2020 年度の【B】項における計画であった。この計画に従い、【A】の数値シミュレーションを実施する傍ら、シミュレーションモデルを非圧縮性 Hall MHD モデルから圧縮性 XMHD モデルに変更する作業を実施した。

シミュレーションモデルの変更にあたっては、方程式を構成する物理変数の増加に伴い、変数の配列を、3次元配列から空間3次元に変数種の次元を加えた4次元配列に変更するなど、基本的な構成の見直しを行った。また、この際に、変数種のループが最内側に来る場合と再外側に来る場合を容易に切り替えられスイッチを加えるなどの工夫を行った。

我々の数値シミュレーションでは、シミュレーション手法として擬スペクトル法を用いるため、3次元 FFT の高速化が最も重要な技術的要素である。これについては、非圧縮性

Hall MHD 乱流シミュレーションコードから、FFTE の多重実行による高速化のモジュールを移植した。

N^3	Node	Process	Secs/step
256 ³	1	32	19.24
512 ³	2	64	81.70
1024 ³	16	512	100.72
2048 ³	128	4096	115.04
4096 ³	1024	32768	249.19

表 1: 格子点数 N^3 の圧縮性 XMHD シミュレーションのウィークスケーリング性能。

これらの作業の結果、圧縮性 XMHD シミュレーションコードは、2020 年度末に、一部の最適化作業を残して一通りの作業を完了した。ウィークスケーリングの観点から性能測定を行った結果は表 1 の通りである。

これらのシミュレーションの格子点数 N^3 に対し、演算量は主に 3次元 FFT で決定されるため、 $N^3 \log N$ に比例する。これを考慮すると、 $N=512, 1024, 2048$ の間では良いウィークスケーリング性能が出ている。これに対して $N=2048$ から $N=4096$ の間で、性能が著しく劣化していることがわかる。 $N=4096$ のシミュレーションを実施する際には、再度の最適化を行う必要がある。これは 2021 年度の課題である。

この新しい圧縮性コードの物理的な妥当性の検証のため、3次元一様等方性乱流の減衰性乱流の直接数値シミュレーション(DNS)を、いくつかのパラメータについて実施した。

図 1: は、 $N^3=512^3$ の圧縮性減衰性一様等方性乱流におけるエネルギースペクトルである。(a) 磁気エネルギースペクトル、(b) 運動エネルギースペクトル、(c) 圧力(内部エネルギー)スペクトルの 3 種類のエネルギースペクトル

は、非圧縮性乱流におけるスペクトルに比較的類似しており、密度揺らぎの小さい圧縮性

乱流としては物理的に妥当な結果だと考えられる。

LES の観点からは、非圧縮性 Hall MHD 向けに開発された SGS モデルをもとに、圧縮性拡張 MHD 向けの再調整 (Smagorinsky 係数など) を行った。圧縮性モデルの LES においては、方程式に対して質量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る。このため、非圧縮性モデルの変数と考え方が異なる。2020 年度は、密度揺らぎが小さい場合に話題を限定し、非圧縮性モデルを使用することについての検証シミュレーションを行った。圧縮性 XMHD モデルにこれまで開発した SGS モデルを導入し、LES を行ったところ、質量密度、運動エネルギー、圧力といった代表的な物理量のエネルギースペクトル (図 1) の低波数成分の挙動を適切に再現することが確認できた。この成果は、International Toki Conference で報告した。

さらに、2020 年度は 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していた。これは 2019 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、支配方程式の非圧縮性 Hall MHD モデルから圧縮性 XMHD モデルへの変更を優先することにした経緯がある。2020 年度は圧縮性 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 PIC との連携・比較シミュレーションに着手することを予定していた。

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。これについては、非周期境界条件のための埋め込み境界法に関する技術を開発し、非周期境界条件で実行される PIC シミュレーションとの比較を可能にするための準備作業を行った。

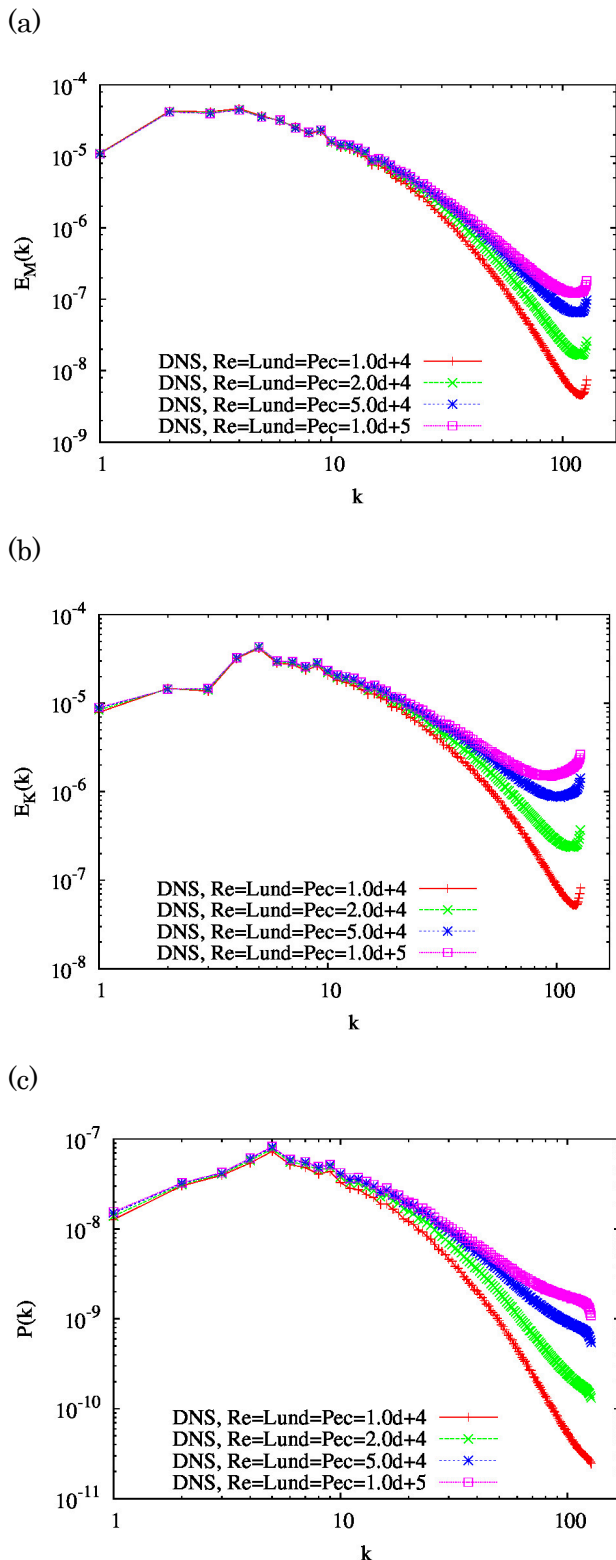


図 1: 圧縮性減衰性一様等方性乱流におけるエネルギースペクトル。(a) 磁気エネルギースペクトル、(b)運動エネルギースペクトル、(c) 圧力 (内部エネルギー) スペクトル。

2021 年度には、磁気リコネクションの数値シミュレーションに着手したいと考えている。

この他、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た。このシミュレーションは、コード開発からプロダクトランの段階に移ったため、実行するプラットフォームを JHPCN の計算資源である Oakforest-PACS から核融合科学研究所（研究代表者の所属機関）のプラズマシミュレータ（NEC SX-Aurora TSUBASA）に移行する作業を行った。ただし、プラズマシミュレータの、富士通 FX100 から NEC SX-Aurora TSUBASA への更新作業がコロナ禍で遅れたこと、FX100 の SPARC64 プロセッサから NEC のベクトル型プロセッサへのアーキテクチャー変更への対応などに時間を取られ、大きな進展を得るには至らなかった。ただし、NEC SX-Aurora TSUBASA への移植は完了しており、今後は計算時間を確保しつつ、本件の研究の進展を図ることになる。

【C】2019 年度に、それ以前までの 4 次元ストリートビューの可視化ドライバーである 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。2020 年度は、VISMO を用いて、Hall MHD 乱流の数値シミュレーションについて 4 次元ストリートビューの概念実証を行った。格子点 512^3 のシミュレーションを、6 方向カメラを用いて多地点で可視化しつつ実施することに成功した。この際に使用したノード数は、可視化を行わずにシミュレーションを実施する場合のノード数の 2 倍である。これは無視できないコストの増加ではあるが、少なくとも格子点数 512^3 程度の小型シミュレーションでは、完全に受け入れられる程度のコスト増加である。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

本研究課題では、2020 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、松本、宇佐見、大谷）：

2021 年度は、これまで使用してきた非圧縮性 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、これらについてのパラメータサーベイが必要である。現状では、中規模圧縮性 XMHD 直接数値シミュレーションが可能になりつつある段階であるが、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 を実行する観点からは、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。今年度は、昨年度に引き続き、密度揺らぎが小さい問題を対象に、既存の非圧縮性用 SGS モデルの Smagorinsky 係数の調整などを中心に研究を進めるとともに、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による基礎データの取得を優先する。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。

2019 年度からの懸案である、Particle-In-Cell (PIC) 法との連携による SGS モデルの改良については、磁気リコネクションシミュレーションについての比較を努力目標として想定する。2020 年度に開発した圧縮性 XMHD コードを用いて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を目指す。比較対象となる PIC シミュレーションデータとの関係で、シミュレーションは一方に薄い形状の準 2 次元シミュレーションとなることを想定している。

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 2021 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)

2020 年度にシミュレーションモデルを圧縮性 XMHD モデルに変更した際に、ウィークスケーリング性能について一通りのデータ採取を行った。表 1 に示す通り、格子点数 $N=1024$ から $N=2048$ にかけて、ウィークスケーリングが極度に劣化することが分かった。この点について、改善方法を模索している。

また、2021 年度後半からは、BDEC-01/Odyssay (富士通 FX1000) の利用を予定している。このため、Oakforest-PACS での経験をもとに、FX1000 に向けた最適化を行う。

【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、大野暢亮):

2019 年度、2020 年度にかけて、可視化エンジンを VISMO に変更したうえで、6 方向カメ

ラによる Hall MHD 乱流の in-situ 可視化を実施し、これを専用動画ブラウザで確認するなど、乱流シミュレーションにおける 4DSV を用いた可視化の概念実証に成功した。

これを踏まえて、2021 年度は、カメラの配置法など 4DSV をより成熟させるためのノウハウの蓄積を行う。また、Oakforest-PACS から FX1000 への利用システムの変更に伴い、VISMO の最適化、シミュレーションパートと可視化パートのバランス調整などを実施し、FX1000 による大型計算を実現するための開発作業を進める。

7. 研究業績一覧 (発表予定も含む。投稿中・投稿予定は含まない)

(1) 学術論文 (査読あり)

- [1] H. Miura, and F.Hamba, "Sub-grid-scale model for studying Hall effects on macroscopic aspects of magnetohydrodynamic turbulence" (投 稿 中), <https://arxiv.org/abs/2012.00981>
- [2] A. Kageyama, N.Sakamoto, H.Miura and N.Ohno, "Interactive Exploration of the In-Situ Visualization of a Magnetohydrodynamic Simulation", Plasma Fus. Res. 15, 1401065 (2020).
- [3] A. Kageyama and N. Sakamoto, "4D street view: a video-based visualization method", PeerJ Comput. Sci., e305, doi:10.7717/peerj-cs.305 (2020).

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)

なし

(3) 国際会議発表 (査読なし)

- [4] H. Miura and F. Hamba, "A study of large eddy simulations of compressible extended MHD model", 29th International Toki Conference

(Oct. 27-30 2020, Toki, Japan). P2-F5-8.

(4) 国内会議発表 (査読なし)

[5] 三浦英昭, 大野暢亮, 陰山聡, 大谷寛明, “乱流シミュレーションにおける同時可視化手法を用いた構造解析”, 日本物理学会秋季大会(2020年9月8-113日, オンライン).

[6] 三浦英昭, 大野暢亮, 陰山聡, 大谷寛明, 3次元乱流のVISM0, 4DSVによるin-situ可視化, 第34回数値流体力学シンポジウム(2020年12月21-23日, オンライン) F08-3

[7] 宇佐見俊介, 堀内利得, 大谷寛明, “磁気リコネクションにおける特異な速度分布に関するシミュレーション研究の進展”, 第37回プラズマ・核融合学会年会(オンライン, 2020年12月1日-4日).

[8] 三浦英昭, 後藤俊幸 “高磁気シュミット数 Ha_{11} MHD 乱流の統計的性質”, 日本物理学会第76回年次大会(2021年3月12日-15日, オンライン)

(5) 公開したライブラリなど

(6) その他(特許, プレスリリース, 著書等)