

jh220005

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ラージ・エディ・シミュレーション(LES)について、拡張電磁流体力学(XMHD)モデルによる直接数値シミュレーション(DNS)およびSGSモデルの開発を行った。SGSモデルについての検証が進むとともに、高い磁気プラントル数乱流の性質について新たな知見を得た。また、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、格子点数 2048^3 のDNSを実行した。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) 共同利用・共同研究を実施している拠点名

東京大学 情報基盤センター

(2) 課題分野（該当するものを残す）

大規模計算科学課題分野

(3) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

(4) 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）：Wisteria/BDEC-01 Odyssey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）：4次元ストリ

ートビュー開発

松本剛, R. Pandit, Y. Sharad: データ解析, 乱流統計理論

2. 研究の目的と意義

プラズマ科学における重要課題として、低衝突頻度乱流の普遍法則を解明し、実現象の解明・予測・制御等に应用することを研究の大目標としている。この問題では、流体的に（しかも乱流として）ふるまう巨視的スケールだけでも巨大な自由度をもつ。これに加えて、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ことが、シミュレーションを極めて困難にしている。このように、流体・微視的スケールの間には巨大な乖離が存在し、両スケールを包含して無矛盾にシミュレーションするのは困難である。

この難点を克服する取り組みの一つが、MHD方程式に微視的效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である。しかし、XMHD方程式は、微視的效果に起因する数値不安定性が激しい。また、微視的效果が高波数成分を励起する性質があるため、シミュレーションに高い数値解像

度（大きな格子点数）を必要とすることによって変わりはない。さらに、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解像度を用意することはできない。さらに、より根源的な問題として、流体モデル (MHD, XMHD を問わない) の導出過程において、分布関数方程式のモーメントの階層を完結する際に、何らかの形で局所平衡仮説などに基づく近似が必要であり、この近似が微視的効果の不完全さとして現れることが指摘されている。

本研究の目的は、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の安定化と微視的効果を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。

これまでの研究から、微視的効果の 1 つである Hall 効果のサブイオンスケール（微視的効果が顕著に現れるスケール）が MHD スケールに与える影響を SGS モデルとしてモデル化した。このモデルを一様等方性減衰性非等方性 Hall MHD 乱流に適用し、その有効性を実証してきた。他方、圧縮性 XMHD モデルの場合には、コントロールパラメータや方程式中でモデル化すべき項、これに付随する非自明な効果が多いため、十分な実証が完了していない。このため、圧縮性 XMHD モデルによるシミュレーションを広範なパラメータ領域について実行し、我々の開発した SGS モデルの有用性を実証すること、圧縮性 XMHD モデル向けの開発を進めることが引き続き求められている。（詳細は 4. 項を参照。）

微視的効果のモデル化と並んでこの研究

の重要なミッションの一つは、大規模 LES 用の高性能・高並列シミュレーションコードの開発である。3 次元並列 FFT を用いた擬スペクトル法と Runge-Kutta-Gill 法を用いる我々のシミュレーションコードは、これまでの JHPCN プログラムで開発が進み、このコードを用いた研究成果も査読付き雑誌に奉告されるようになってきている。他方で、当初開発を行っていた Oakforest-PACS が運用終了となり、これに代わって Wisteria/BDEC-01 Odyssey を使用するために再度の最適化を行うこと、今後の展望を踏まえてコードの GPGPU 化を行うなどの対応が必要となってきている。

SGS モデルの開発およびコードの最適化に加え、シミュレーションの巨大化のなかで乱流の空間構造の複雑性を的確に把握する必要がある。このため、4 次元ストリートビュー (4DSV) による可視化手法を開発することも、我々の重要なミッションの一つとなっている。現時点で 4DSV の組み込み自体は概ね終了しているが、計算規模に合わせて急速に増大する可視化処理コストを削減するため、技術開発や物理的見当が必要な段階である。

上記のように、サブイオンスケールにおける物理的効果のモデル化、シミュレーションコードの新しいスーパーコンピュータアーキテクチャへの対応、可視化技術の開発がこの研究の主要目的である。

3. 当拠点の公募型研究として実施した意義

本研究課題では、流体モデルに基づく大規模シミュレーションで高レイノルズ数乱流を目指す観点から、各計算ノードに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 Wisteria/BDEC-

01 Odyssey は、高速メモリ（前者は MCDRAM、後者は HBM2）を搭載していることから、本研究の目的に最適である。さらに、拠点研究機関および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、この研究を推進する学際的体制が整っている。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。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

この研究課題では、【A】乱流シミュレーションと SGS モデル開発、【B】シミュレーションコードの高度化、【C】4次元ストリートビュー(4DSV)可視化手法開発の3つの小課題に分かれて研究を実行してきた。これまでの報告に倣い、以下でも【A】—【C】のそれぞれについて報告を行う。

【A】乱流シミュレーションと SGS モデル開発

1) 圧縮性 XMHD モデルによる格子点数 2048^3 の DNS を実施した。シミュレーションの主要なパラメータである β 値（平均圧力と磁気エネルギーの比）に代表的なものとして 0.1, 1, 10 を設定した。格子点数 2048^3 のシミュレーションをターゲットサイズとして、小型の DNS を実行して数値解像度などの健全性を確認したのち、残された CPU 時間を用いてシミュレーションを実施した。

2) Hall MHD の大規模 LES の実施と、これまでの DNS データの比較による SGS モデル検証を行った。過去の Hall MHD 乱流シミュレーションデータに基づき、SGS モデルを開発した。これは発表済の SGS モデル (Miura, Araki, and Hamba, J. Comput. Phys. 2016, vol. 316) を改良したものであり、改良前に比べて、同じ格子点数でありながら、実質的

な空間解像度が以前のモデルの2倍に向上することが確認できた。この研究成果は、査読付き論文として J. Comput. Phys. に出版された (Miura and Hamba, J. Comput. Phys. 2022)。

SGS モデルの検証および改良をさらに進めるため、非圧縮性一様等方減衰性 Hall MHD 乱流についての、これまでで最大規模（格子点数 $N^3=4096^3$ ）の DNS を実施した。このシミュレーションについての研究成果は、アジア太平洋物理学会連合プラズマ分科会議 (AAPS-DPP 2021) で、招待講演として報告された。さらに、2019 年度研究の継続として、磁気プラントル数が大きい場合の Hall MHD 乱流のシミュレーションを行った。以前に出版した論文 (Miura, Yang, and Gotoh, Phys. Rev. E. 2019 vol. 100) のデータよりもレイノルズ数を高めることにより、速度場の移流項がローレンツ力に比べて無視できない大きさをもつ乱流場のシミュレーションに成功した。この乱流場がもつ間欠性などの性質について、IUPAP Conference of Computational Physics 国際会議で報告した。

【B】シミュレーションコードの高度化

非圧縮性 Hall MHD モデル用シミュレーションコード MUTSU-T3/iHallMHD3D の、FX1000Wisteria/BDEC-01 Odyssey) に対する最適化を、最適化担当の共同研究者の助言を得て行った。最適化の内容は、コンパイルオプションの取捨選択、一部 OpenMP 指示行の変更（追加）、領域分割パラメータの変更等であり、シミュレーションコード自体は基本的に Oakforest-PACS 版から大きな変更を加えなかった。

この最適化の結果、格子点数 512^3 の場合、8 ノード 64 プロセス（スレッド幅 2）でピーク性能比 1.7%、格子点数 1024^3 の場合で 256 ノード 1024 プロセス（スレッド幅 2）でピーク性能比 1.6% の性能が得られた。

Wisteria/BDEC-01 もしくは富岳において、このコードを用いて実行する目標サイズは格子点数 6144³、ノード数 4096 である。上記の最適化結果を HPCI のプログラム情報 (https://www.hpcioffice.jp/pages/r04a_boshu) に基づいて評価すると、実効並列化効率 99.999547%、並列化効率 99.538712%、目安となる並列数は 220,728 となる。

【C】4次元ストリートビュー(4DSV)可視化手法開発

4DSV に設置するカメラ(可視化する方向と視点の位置のセット)に関わる問題に取り組んだ。4DSV が提案された当時は、6方向カメラを全空間に均等に配置することを想定していた。しかし、この方式では、超大規模並列シミュレーションにおいてカメラの数が(従って同時可視化処理のコスト)が膨大になる。これを改善する対策案として、一方向の直線や適切な曲線上にカメラを配置することで、カメラの配置数を削減しつつ良好な可視化結果を得る手法の開発を行った。

2022 年度研究では x , y , z の各方向に座標軸と並行して設置される直線上にカメラを設置し、空間の把握状況を確認した。格子点数 40963 の非圧縮性 Hall MHD 乱流の数値シミュレーションで、 y 方向に伸びる直線状にカメラを配置し、エンストロフィー密度、電流密度の等値面で乱流場を可視化した。このカメラ配置で得られる可視化結果は、空間の各所における管状渦構造や薄層電流構造の疎密などの状況を把握するには良好であるが、磁気再結合などの重要な現象の痕跡をとらえるには不十分であった。このため、カメラを動的に配置する手法の開発が必要であるとの結論に至った。

可視化の際に場を特徴づけるために使用する物理量についての考察も不可欠である。磁場の位相構造を的確に表現可能な物理量について検討を行った。電流密度は磁気シアー

の強いところで大きくなるため、磁気再結合が発生する候補点として適切であるが、高波数成分が強く励起された乱流場の中で磁場構造や磁場と速度場の相互作用を明確に理解できない。このため、速度場・磁場などベクトル場の勾配テンソルの不変量などを利用することを考え、試験的な可視化を行い、良好な結果を得た。このような物理量についての検討は、2023 年度に引き継がれた。

5. 今年度の研究成果の詳細

上に述べた項目【A】-【C】について、以下のような研究成果を上げた。

【A】. 乱流シミュレーションと SGS モデル開発

- ・MUTSU-T3/XMHD コードの大型シミュレーションによる SGS モデル開発用基礎データ取得：熱エネルギー／磁気エネルギー比 $\beta=10$ の場合についてレイノルズ数などのパラメータを変えながら複数シミュレーションを実施した。このパラメータのシミュレーションを完了し、2022 年度計画を 100%完了した。

- ・2021 年度までの DNS, LES データの解析に基づく SGS モデルの改良：磁場による非等方性を考慮した SGS モデルについて、これまでのデータを元にした解析を進めた。この成果を、2022 年 11 月に開催の国際会議で報告[6]のうえ、査読付き論文誌 Plasma Fusion Research 誌に投稿、掲載が決定した[2]。また、速度勾配テンソルの不変量などの解析など DNS データに基づいた論文 ([1][3]; [1] は国際共同研究) が出版された。

- ・2022 年度以前にこの研究課題(Oakforest - Pacs, 以下 OFP, を利用)において開発した磁気拡散モデルに基づく拡張 MHD シミュレーション研究成果を、査読付き論文誌 Physics of Plasmas 誌に投稿した。この論文は、2023 年

4 月に受理され、掲載された[4] (国際共同研究)。

・VP 法による非周期系問題の DNS : プログラムの実行中に予期せぬ挙動を示す部分が見られた。原因が物理モデルに由来するものか、プログラム由来のものか、一旦シミュレーションを中断した。検討の結果、必ずしもプログラムの実装の問題ではなく、原理的なもの (VP 法の性質) に起因する可能性が高いため、時間をかけて検討することにした。これを受けて、プログラムの実行を 2023 年度に延期した。

【B】シミュレーションコードの高度化

・コードの Wisteria/ BDEC-01 Odyssey (以下、Odyssey) 向け最適化 : 特に格子点数が 2048^3 以上の最大規模シミュレーションで高効率・高並列率となることを目指して最適化を進めた。

このシミュレーションコードは JHPCN 共同研究課題として OFP 用に開発されたものである。OFP に比べて Odyssey は 1 ノード当たりのメモリが小さいため、作業配列を減らす変更を行った。この際に、演算速度が低下しないように演算方法も合わせて変更した (一部機能制限を伴う)。この結果、計算時間はむしろ短縮された。なお、計算時間が短縮されたことで 3 次元 FFT の alltoall 通信時間の占める部分が相対的に増大し、見た目の実行効率 (ピーク性能比) は低下した。実行効率のみでコード性能が評価される場合には注意が必要となった。

・シミュレーションコードの VP 法適用箇所および PIC 機能使用箇所の最適化について :

【A】で述べた理由により、最適化をいったん中止した。実装方法について、2023 年度のシミュレーション再開を目指して検討中である。

・東京大学、筑波大学 (JCAHPC) の支援で、シミュレーションコードの GPGPU マシンへの移植が行われた。この移植は、FFT のカーネル部分を CUDA FFT (cufft) に置き換えるものである。

この移植の結果、格子点数 256^3 のテスト計算では以下のような性能 (方程式の時間発展パートのみ、可視化パートは除く) が得られた。

- ・Wisteria/BDEC-01 Odyssey 2 CPU:
4.8 secs/step
- ・Mercury 1 node 8GPGPU:
0.25 secs/step

この結果、1 ノード 8GPGPU のメモリ内で実行できるシミュレーションについては十分に高速化できる見通しが得られた。なお、多数のノードにまたがる大規模計算の際には、ノード間通信 (特に alltoall 通信) の占める割合が大きいうえに、GPGPU の利用に伴い通信と演算のオーバーラップによる効率化の効果が低下するため、さらなる効率化が求められる見込みである。これについては、2023 年度に何らかの見込みを得ることを目標としたい。

【C】4 次元ストリートビュー (4DSV) 可視化手法開発

2021 年度までの成果で述べた通り、4DSV では可視化視点と可視化方向を指定する多数のカメラを空間の各地点に配置することで、シミュレーションにおける同時可視化を行う。この手法は、中規模のシミュレーションには十分機能してきたが、シミュレーション規模が増大するにつれてカメラ数は急速に増加し、これに伴う可視化のコストも一気に増大する。

この問題に対する対処として、2022 年度は

カメラ位置の動的変更を行うことを課題とした。動的にカメラ位置の変更を行うため、可視化ドライバー `vismo` の関数の利用についての機能確認を進めた。現在利用中の可視化ドライバー `vismo` には、カメラ情報の変更のために関数 `vsmChangeCam` が用意されている。これを利用することで、シミュレーション途中でもカメラ位置が変更できることがわかった。

カメラ位置の変更に加えて、カメラ位置情報を決定するための物理量の検討を進めた。2021 年度までの研究成果から、電流強度（電流密度ベクトルの二乗）は磁気リコネクションのような重要な事象を追跡するには心もとないことが明確である。

この欠点を克服してカメラを動的に配置するための試みとして、ベクトル場の勾配テンソルの第二不変量(Q 値)を用いる手法を検討した(図 2)。(この検討には文献[4]の 2 次元 3 成分拡張 MHD シミュレーションデータを利用した。)この検討の結果、この物理量によるカメラ配置は基本的には有効であるが、ベクトル場の微視的な構造変化(Q 値はこれを反映する)と磁場の大規模な位相構造の変化(0 点、X 点といった磁気リコネクション特有の構造)が必ずしも一致しない傾向(図 1)が見られるなど、さらに検討が必要であることがわかった。また、Q 値と磁気リコネクションが対応する場合でも、カメラの再配置の是非を決める閾値に任意性が残るため、継続して検討を行うことにした。

この他、`vismo` を Wisteria/BDEC-01 Odyssey 上で利用するため、他システム用に開発された `vismo` ツールの利用確認など、環境整備を進めた。

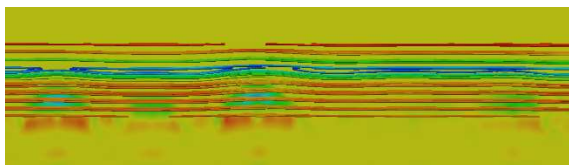


図 1: 2 次元シミュレーションにおける磁気島の形成と磁場 Q 値の対応テスト図。色付き等高線の赤い(青い)領域は Q 値の高い(低い)領域に対応する。Q 値が高い領域では、ベクトル場が回転的な構造を持つ。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

2022 年度研究は、【A】 90%、【B】 90%、【C】 80%程度である。【A】 および【B】 で 100%とならないのは、いずれも VP 法に関わる課題である。基本的な解決方針は立っているため、2023 年度にはシミュレーションを再開する予定である。また、【B】 については、当初予定の中に入っていなかった GPGPU システムへの対応が実現できたため、むしろ 100%以上の実現度と考えても良い。これについては、東京大学・筑波大学(JCAHPC)の関係者の皆様に感謝する次第である。

今後の展望は、以下の通りである。本研究課題は 2017 年度に開始し、以来、2022 年度末で 6 年間の経過した。(この報告書の提出時点で、2023 年度の当該プロジェクトも採択・開始しているため、2023 年度末で 7 年である。)このプロジェクトで開発したシミュレーションコードも成熟しつつあり、初期のシミュレーション成果は一定の頻度で査読付き論文として出版するなど、プロジェクトとしては収穫期に入っている。

他方、最近の研究の主要な潮流の一つは、シミュレーションデータにデータ科学的手法を応用して物理的知見を取り出すことである。このようなアプローチ、たとえば固有値直交分解(POD)、動的モード分解(DMD)などの手法は我々の目指す高波数成分のモデリングについても有効であると考えられる。

データ科学的手法は極めて広く普及しており、GitHub などの公開コードや商用ソフトでもツールが用意可能である。しかしながら、我々が実施する大規模シミュレーション研究のデータに POD、DMD といった手法を応用

するには、既存ライブラリ利用は効率的ではなく、新たに解析用コードの開発が必要になる見通しである。(既存の公開コードの改良を行うか、新規開発を必要とするかについては、検討を要する。)このような状況を踏まえて、JHPCN によるこの共同研究を、大型シミュレーションと高波数成分のモデル化を主眼としつつ、この目的を達成するためにデータ科学的手法の大規模シミュレーション向け実装・最適化を行う方向で再構築する方向で検討している。

7. 研究業績

(1) 学術論文 (査読あり)

[1] Sharad K. Yadav(+), Hideaki Miura, and Rahul Pandit(+), *Physics of Fluids* **34**, 095135 (2022).

[2] Hideaki Miura and Fujihiro Hamba, *Plasma Fusion Research* **18**, 2401022 (2023).

[3] Yasushi Todo, Hideaki Miura, et al., to appear in *Plasma Fusion Research* (2023).

[4] Hideaki Miura, Linjin Zheng(+), and Wendell Horton(+), *Physics of Plasmas* **30**, 052503 (2023).

(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)

[5] Hideaki Miura and Toshiyuki Gotoh, XXXIII IUPAP Conference on Computational Physics 2022 (August 1-4, 2022, online).

[6] Hideaki Miura, Linjin Zheng(+), and Wendell Horton(+), the 27th International Conference on Numerical Simulation of Plasmas (ICNSP 2022), August 30 - September 2, 2022 (Online).

[7] Hideaki Miura and Fujihiro Hamba, International Toki Conference (November

8-11, 2022, Online).

(4) 国内会議発表 (査読なし)

[8] 三浦英昭, 後藤俊幸, 数理解析研究所共同研究 (公開型) 「乱流の予測可能性と可制御性」(2023年7月20日-22日, 京都大学数理解析研究所)

(5) 公開したライブラリなど

なし

(6) その他 (特許, プレスリリース, 著書等)

なし