

jh230004

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ラージ・エディ・シミュレーション(LES)について、モデル改良の参照データ取得のため、圧縮性拡張 MHD モデルによるパラメータサーベイを実施した。また、前年度までに取得したデータの解析を進め、Hall 効果を伴う電磁流体力学乱流の現象論・構造形成と波動伝播の関係を整理した。この成果は、国際会議で報告した。コード開発については、Wisteria/BDEC-01 (Aquarius)を用いた、MUTSU-T3/ iHallMHD3D、MUTSU-T3/XMHD コード(特に後者)の GPGPU 対応、特に格子点数が 1024^3 の場合の性能評価を進めた。シミュレーションコードの GPGPU 対応、Multiple Program Multiple Data(MDMP)化や同時可視化「4次元ストリートビュー」(4 DSV) に使用する VISMO ライブラリの改良を行った。

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
名古屋大学 情報基盤センター

(2) 課題分野

大規模計算科学課題分野

(3) 共同研究分野 (HPCI 資源利用課題のみ)

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)、住元真司 (東京大学)、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

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

2. 研究の目的と意義

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は、乱流研究の大目標の一つである。この問題では、流体的に取り扱える MHD スケールだけでも巨大な自由度をもつのに加えて、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する。このような、MHD・微視的スケールの間の巨大なスケール乖離が存在する問題において、両スケールの広いスケージング領域をともに包含して無矛盾にシミュレーションするのは、限りなく困難である。

この難点を克服するため、我々は 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 (特に Hall 項のみを含む

Hall MHD 方程式) によるシミュレーションに取り組んできた。XMHD 方程式は、微視的效果が高波数成分を励起する性質のために、シミュレーションに高い時空解像度（大きな格子点数と細かい時間刻み）を必要とする。特に Hall 項は whistler 波を励起し、高波数成分の波動が波数の 2 乗に比例する周波数で伝播する。このような波動的な性質が微視的スケールにおける乱流の特質であるため、高波数成分での解像度の問題を克服する手段を用意する必要がある。

本研究の目的は、XMHD 方程式を基礎に、広範な微視的效果の一部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、微視的效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效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。

これまでの研究では、Hall 効果のサブイオンスケール(微視的效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に成功している。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。

微視的效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報告されている。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ってきたが、GPGPU による加速が重要となる Oakforest-PACS II の運用開始を見据えて、コードの GPGPU 化を行うなどの対応が新たに必要となってきた。

SGS モデルの開発およびコードの最適化に加えて重要な課題の一つは、シミュレーションの巨大化のなかで乱流の複雑な構造を的確に把握することである。このため、同時可視化手法 4DSV の実装および改良を進めてきた。4DSV の概念実証などは完了しているものの、計算規模に対して急速に増大する可視化処理コストを削減するため、新たな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效果のモデル化、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. 当拠点の公募型共同研究として実施した意義

本研究課題では、XMHD 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する。これは、シミュレーションにおいてメモリアクセスが大きな比重を占めることが理由である。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】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】【B】【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、 $\beta=10$ 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。

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。これまで、Hall MHD 乱流シミュレーションデータを参照データとして、発表済の SGS モデル (Miura, Araki, and Hamba, J. Comput. Phys. 2016, vol. 316) を改良版する形で研究を進めてきた。この研究の結果、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改良前のモデルの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)。また、背景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のうえ、査読付き論文誌 Plasma Fusion Research 誌に発表した。

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】これまで、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てきた。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 6144^3 、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。この最適化を根拠に、HPCI 令和 6 年度 A 期 HPCI システム利用研究課題募集に応募し、採択され

た。2022 年度からは、東京大学・JCAHPC のご厚意で、Oakforest-PACS II の利用を想定したシミュレーションコードの GPGPU システムへの移植が行われている。

【C】4DSV 可視化手法開発

4DSV のためにに設置するカメラ（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 4096^3 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。この問題の改良は、2023 年度の継続課題となった。

可視化においては、乱流現象を特徴づける物理量についての考察も不可欠である。このため、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の強いところで大きくなるため、磁気再結合の可視化を行う材料の一つであるが、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も、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

- ・3次元圧縮性モデルコード MUTSU-T3/XMHD を用いた大型シミュレーション(128~512 ノード)で、Reynolds 数・Lundquist 数や内部エネルギー・磁気エネルギー比 (β 値) をコントロールパラメータとするシミュレーションを実施し、SGS モデル開発の基礎データの取得を進めた。

- ・前年度までに取得したデータの解析を進めた。特に、これまでの Hall MHD 乱流に関するシミュレーション結果を整理したところ、古典的なコルモゴロフの現象論に従った乱流の減衰が生じた場合に、一般化されたエルザッサー変数による乱流場のスケール間エネルギー輸送が、イオンサイクロトロン波からホイッスラー波への輸送(Araki and Miura, Plasma Fus. Res. 15, 2401024 (2020))でよく説明できることがわかった。この成果は、国際会議 AAPPs-DPP で、招待(プレナリー)講演として報告された[2]。

- ・VP 法による非周期系問題の DNS を実行し、これと PIC シミュレーションデータの比較から、SGS モデルを通じた運動論的効果導入について方針を検討する。

【B】シミュレーションコードの高度化

- ・Wisteria/BDEC-01 (Aquarius) を用いた、MUTSU-T3/ iHallMHD3D、MUTSU-T3/XMHD コー

ド(特に後者)の GPGPU 対応を進めた。Aquarius で規模シミュレーションを実行する場合の性能の確認を行った。

2022 年度は Aquarius の 1 ノード(8GPGPU)の中で納まる計算規模で性能確認を行ったが、我々の計算ターゲットである大規模乱流シミュレーションは 1 ノードでは計算できない。このため、Aquarius のジョブが実行可能な範囲(2 ノード)でノード間通信が発生する最大規模の計算(格子点数 1024³)の計算を

	領域分割	100 ステップ 計算時間[sec]
Aquarius 16GPGPU	1×16×1	2223.5
Aquarius 16GPGPU	1×8×2	926.1
Aquarius 16GPGPU	1×4×4	48978.4
Odyssey 16 node	1×16×4 (64 procs)	2380.8

表 1: Aquarius 2 ノード 16GPGPU および Odyssey による Hall MHD 乱流シミュレーション(格子点数 1024³)の実行結果。

行った。

表 1 は、Aquarius 2 ノード 16GPGPU による Hall MHD 乱流シミュレーションの実行結果である。参考のため、Odyssey (A64FX) 16 ノードによる計算結果も掲載する。この表からわかるように、Odyssey 16 ノードに比べて、Aquarius 2 ノード 16GPGPUの方が 2 倍以上高速である。しかし、格子点数 512³の場合には A64FX に比べて 10 倍以上高速であり(データは省略)、ノード間通信が大きな影響を及ぼしていることがわかる。NVIDIA 社の技術者からの意見でも、現時点ではこれ以上の高速化を望めないとのことであるため、これは alltoall 通信を多数含む

3 次元 FFT と、これを利用した擬スペクトル法をそのまま実行することによる限界であると考えられる。このため、今後、一部の計算を他の手法(差分法など)で代替するなどの検討を進める必要がある。

GPGPU への対応を進める一方、新たに共同研究者(住元)を迎え、h3-Open-SYS/WaitIO 関数(以下、単に WaitIO)による、MUTSU-T3/iHallMHD3D コードのヘテロジニアシステムでのシミュレーションへの対応を、Aquarius, Odyssey 両システムを用いて進めている。これは、4DSV の可視化ドライバーである VISMO コードを GPGPU 対応に変更することが困難であることを踏まえ、GPGPU システムでシミュレーションを実行し、可視化を CPU のみのノードで実行することを想定している。2023 年度は、共同研究者の意見をいただいて、2 つのプログラム間のデータの授受をファイル IO で行うことに決定し、必要なプログラムの整備を行った。この作業は 2024 年度も引き続き行う予定である。

また、2022 年度に引き続き、MUTSU-T3/iHallMHD3D コードの Volume Penalization 法を用いた機能強化を進めた。現在、2022 年度に問題が生じて停止したこの機能の再検証のため、より適切な問題設定の条件を実装しているところである。

【C】4DSV 可視化手法開発

4DSV を行う上で、カメラ数を削減しながら効率的な可視化を行うことが最近数年の課題となっている。2023 年度は、シミュレーション中にカメラの諸パラメータ(位置、角度)を、可視化対象の注目点に合わせて動的に変更することに成功した。

可視化の注目点としては、(i)エンストロフィー密度、電流密度の最大値、(ii)各計算プロセスにおけるこれらの物理量の最大値、(iii)ベクトル場のトポロジーの変化点などを想定して実装を行った。これらについて

は、可視化ドライバーの関数およびこれを呼び出すシミュレーションコード側のインターフェースとしては作業が完了した。しかし、注目点の突然の変化（たとえば、ある箇所の物理量に注目していたところ、他の離れた点の物理量の方が突如大きくなった場合）に対応するなど、より現実的なノウハウの蓄積が必要であり、今後も開発は続行する。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

2023 年度研究は、【A】100%、【B】70%、【C】80%程度である。

【A】は想定された目標をほぼ達成した。これまで LES の SGS モデル作成のために取得した大型データも含めて、過去のデータを整理した結果は国際会議[3]で報告し、これを 2024 年度中に論文として投稿する予定である。

【B】および【C】については、当初より予定が遅れた部分がある。これは、シミュレーションコードを WaitIO を用いてシミュレーション本体部分と 4DSV 可視化に分離して MDMP 化する作業について、今後 Oakforest-PACS II による GPGPU システム上でプログラムの実施を想定した場合にどのようにすべきか検討するために作業を一旦止めたことに起因する。現在、東京大学・筑波大学(JCAHPC)の支援を受けて GPGPU への移植および最適化がさらに進んでいるため、この作業との調整を図りつつ、2024 年度も開発・最適化作業を進める。

今後の展望は、以下の通りである。本研究課題は 2017 年度に開始した。これを受けて、2024 年度は、課題の主軸を、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ためのコード開発に移し、2024 年度も課題を採択いただいた。これに伴い、この課題は、2023 年度で一旦一区切りがついたと認識している。ただし、本報告で述べた通り、GPGPU 化への対応など積み残

した課題は存在するため、これは新課題に引き継ぐ。

2024 年度は、上に述べたデータ科学的手法を用いたデータ解析手法の実装が大きな課題となる。たとえば固有値直交分解 (POD)、主成分解析 (PCA) などは、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。しかし、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, PCA 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 2023 年度以来調査を行っているので、簡単なサンプルプログラムを実行しつつ、検討を継続する。

7. 研究業績

(1) 学術論文 (査読あり)

[1] [Hideaki Miura](#) and Fujihiro Hamba, Numerical Simulations of Hall MHD Turbulence with Magnetization, Plasma Fus. Res. 18, 2401022 (2023).

[2] Yasushi Todo, [Hideaki Miura](#), et al., Research Plan of Complex Global Simulation Unit, Plasma Fus. Res. 18, 2503067 (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)

[3] [Hideaki Miura](#) and Toshiyuki Gotoh, Spatio-temporal evolution of homogeneous and isotropic Hall MHD turbulence with a high magnetic Prandtl number, 34th IUPAP Conference on Computational Physics, August 4th-8th, 2023 (Kobe International Conference Center, Kobe, Japan). (口頭発表)

[4] [Hideaki Miura](#), Sharad K. Yadav(+), Keisuke Araki, and Rahul Pandit(+),

Analysis on interaction of two scaling regimes in Hall MHD turbulence, 28th International Conference on Statistical Physics, Statphys28, August 7th-11th 2023 (The University of Tokyo, Tokyo, Japan).
(口頭発表)

[5] Hideaki Miura, Sharad K. Yadav(+), Keisuke Araki, Rahul Pandit(+), and Toshiyuki Gotoh, "Statistical and structural properties of Hall MHD turbulence", 7th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics (AAPPs-DPP2023), November 12-17, 2023, Nagoya, Japan (招待(プレナリー講演))

(4) 国内会議発表 (査読なし)

[6] 三浦英昭, 他, "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", JHPCN 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第 14 回シンポジウム(2023 年 7 月, 東京)

[7] 三浦英昭, 後藤俊幸, "高磁気プラントル数 Hall MHD 乱流の時空間構造", 日本物理学会第 78 回年次大会(2023 年 9 月, 東北大学)

(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