

jh240004

動的縮約モデルによる多階層電磁乱流シミュレーションコード開発

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)コード開発について、LES 用モデル改良の参照データ取得を目的として、背景磁場を印加した非圧縮性 Hall MHD シミュレーションによるパラメータサーベイを実施した。これまでのシミュレーションによる研究成果をとりまとめ、関連研究とともに総説論文として論文を出版した。コード開発については、Wisteria/BDEC-01 (Aquarius)用 GPGPU コードから、JCAHPC Miyabi-G に対応する移植が進んだ。さらに、動的縮約モデルの開発の着手点として Proper Orthogonal Decomposition (POD)による縮約を行うべく、我々の LES コードによる大規模 3 次元データに適合する POD コードの開発を開始した。可視化については、4 次元ストリートビューにより乱流磁気リコネクションを検出するため、磁気リコネクションを起こしやすい状況下でシミュレーションを実施し、カメラ配置手法などの研究を進めた。

1. 共同研究に関する情報

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

(1) 課題分野

大規模計算科学課題分野

(2) 参加研究者一覧と役割分担

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、シミュレーション

SGS モデル開発半場藤弘（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）、大野暢亮（兵庫県大）：4 次元ストリートビュー

松本剛（京都大）、R. Pandit, Sharad K. Yadav, S. De：シミュレーション、データ解

析、乱流統計理論

2. 研究の目的と意義

衝突頻度が低く、支配的効果が相互に異なる複数の階層を形成するプラズマ乱流の理解は、プラズマ物理の重要課題の一つである。このような多階層現象では、各階層についてのシミュレーションだけでは不十分であり、階層間相互作用を考慮した大域的シミュレーションが必要となる。このような多階層大域シミュレーションは多くの学術分野で研究される共通の課題であり、典型的な学際分野の一つである。

多階層現象の大域的シミュレーションの実現はプラズマ物理のみならず関連する広範な分野に対して大きなインパクトをもたらす重要な意義があるものの、現実には、スーパーコンピュータの能力の限界が大きな障壁となる。これは、最も微細な微視的階層と最大階層の時空間スケールが極端に異なり、世界最大の計算機でもメモリ容量・演算

速度が不足するためである。特に衝突頻度の低い電磁乱流では、分散性波動効果が支配的な微視的スケールにおいて高波数・短波長成分が強く励起されるため、多階層大域シミュレーションの実現はきわめて困難である。

この問題の解決のため、我々は、この課題の前身となる「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」(2017 年度-2023 年度、以下「前課題」)において、微視的階層をサブグリッドスケール (SGS) モデルで置き換えるラージ・エディ・シミュレーション (LES) 研究に取り組んだ。2024 年度課題からは、前課題の目的・内容を踏襲しつつ、前課題で開発したシミュレーションコードの最新スーパーコンピュータへの対応を進めること、従来モデルの SGS モデルに代えて動的縮約モデルを開発することを新たな取り組みとして開始した。このような新しい取り組みにより、多階層電磁乱流シミュレーションを実現することが、この課題の目的である。

2024 年度の本研究課題は、以下の 4 つのサブテーマで構成されている。

・サブテーマ 1：コードの MPMD 型への転換と最適化(担当：三浦，中島，住元)

前課題で開発したシミュレーションコードを雛形として、コードをシミュレーションコードと動的縮約計算・可視化・解析コード(以下、動的解析コード)を並列して実行する Multiple Program Multiple Data (MPMD) 型に変更する。Wisteria/BDEC-01 Odyssey および Aquarius 上で h3-Open-SYS/WaitIO の利用を想定し、コード開発作業を行う。

・サブテーマ 2：シミュレーションコードの GPGPU 機に向けた最適化(担当：三浦，片桐，高橋)

前課題で開発した我々のシミュレーションコードは、2023 年度に東京大学情報基盤セ

ンター・JCAHPC のご厚意で、GPGPU 機向けに移植が行われた。この移植されたコードは、Wisteria/BDEC-01 Aquarius 上でテストした限り、格子点数 512^3 程度の計算については十分な性能を発揮するが、それより大きな計算規模の場合については、GPGPU 機の性能を十全に発揮するべく性能向上を図る必要がある。このための最適化を、Aquarius 上で実施する。

・サブテーマ 3：高波数成分の動的縮約手法およびコード開発(担当：三浦，半場，松本，R. Pandit, S. De, S. K. Yadav)

前課題の LES 手法開発では、拡張 MHD モデルの SGS モデルを開発した。前課題の実施を通じてその有用性を示すことに成功したが、その限界も明らかである。SGS モデルはスケール間のエネルギー収支を統計的に考慮するものであり、乱流の動力的性質は考慮されない。このため、格子サイズに近い実空間の個別の現象は LES で必ずしも再現されない。この点を改善するため、乱流の動力的性質を反映した新たなモデルを検討するとともに、固有値直交分解法 (POD) や動的モード分解 (DMD) などの手法を活用した動的縮約手法の開発も検討する。プラズマ物理研究の観点からは、この SGS モデルのコンセプトの変更が前課題からの最も大きな変更である。

・サブテーマ 4：同時可視化手法・同時解析手法の開発と高度化(担当：三浦，陰山，大野，R. Pandit, S. De, S. K. Yadav)

サブテーマ 1 でコードを MPMD 型に変更するのに合わせ、シミュレーションの合間に行ってきた可視化や、別ジョブとして計算を実行してきた統計解析を、シミュレーションの実行と並行して別プログラムで実施する対応が必要となる。また、磁場の位相を変える磁気リコネクションなど突発事象の検知や強いホイッスラー波の形成、可視化処理や動

的 SGS モデルに重要な基本情報を与える重要な動的解析コードの開発を進める。

3. 当拠点の公募型共同研究として実施した意義
- 多階層大域シミュレーションは、核融合・プラズマ物理・流体力学などを様々な分野にまたがる点において、学際的な性質を有する。また、この課題で目指す動的縮約による微視的モデルの開発には、物理・工学研究課題データ科学的手法や、これをサポートする可視化技術が重要である。何よりも、この課題実施には大規模高性能計算機 (GPGPU スーパーコンピュータを含む)、コードの GPGPU 機上での実行に合わせた最適化、MPMD モデル実行環境整備についての知見が必要不可欠である。拠点公募型共同研究としてこの研究課題を実施することは、上記のような広い学際性を担保し、また、スーパーコンピュータの性質・最適化技術やプログラミングモデルを知悉した計算科学分野の研究者の協力を得る上で重要である。我々の研究課題には、拠点研究期間に所属する計算科学研究者も含めて、このような必要性を満たした共同研究者が含まれている。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

2023 年度までの研究課題では、【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、以下では【A】【B】【C】のそれぞれについて概要を示す。

【A】乱流シミュレーションと SGS モデル開発

1) 非圧縮性 Hall MHD モデルおよび圧縮性 XMHD モデルによる直接数値シミュレーション (Direct Numerical Simulation, DNS) を実施し、SGS モデルの開発と LES の妥当性を検

証するための基礎データを取得した。主要なパラメータは背景磁場の強さ, Hall パラメータ (イオン慣性長のシステムサイズに対する比率), イオンラーマー半径パラメータ, β 値 (圧縮性モデルの場合), レイノルズ数, ランキスト数, プラントル数などである。実施した DNS は背景磁場が印加されない一様等方性乱流が多くを占める。

2) Hall 効果に関わる SGS モデルの開発を行った。また, Hall MHD の大規模 LES と, 1) の DNS データの比較による SGS モデル検証を行った。先に発表済の SGS モデル (Miura, Araki, and Hamba, J. Comput. Phys. 2016, vol. 316) を改良する形で研究を進めた。この結果, 改良前に比べて, 同じ格子点数で実質的な空間解像度が改良前の 2 倍に向上した SGS モデルを開発した。この研究は, 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)。

3) 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。この成果は国際会議 (2022 年 11 月) で報告のうえ, 査読付き論文誌 Plasma Fusion Research 誌に発表した。

4) 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。以前の同様の研究 (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。これについては, 論文準備中である。

【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を開発してきた。最初のコードは Oakforest-PACS をターゲットに開発が行われた。この開発は順調に進み, 着手以降この

コードを利用した物理的な成果に関わる査読付き論文は Oakforest-PACS 以降、Wisteria/BDEC-01 Odyssey を利用した成果も含めて、9 本発表されている。今後も順次、成果発表を行う予定である。

Oakforest-PACS の運用終了後、Wisteria/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。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%の性能を得た。このコードを、格子点数 6144^3 を仮定して HPCI のプログラム情報に基づいて評価すると (https://www.hpcioffice.jp/pages/r04a_boshu)、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。この成果は、令和 6 年度 A 期「富岳」を中核とする HPCI システム利用研究課題として活用された。

【C】4DSV 可視化手法開発

乱流の複雑な現象を可視化する手段として、Four-Dimensional Street View (4DSV) を、その可視化エンジンとして VISMO を採用して可視化プログラムをシミュレーションコードに組み込む研究を続けてきた。

4DSV の組み込みとその概念実証は成功裏に完了し、査読付き論文も出版された (Kageyama et al., Plasma Fusion Research 2020)。近年の課題としては、大型シミュレーションにおいてカメラ(可視化する地点・方向)が(結果として可視化に要する計算時間が)爆発的に増えることを回避するため、カメラの設置数を減らす問題に取り組んでいる。

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、2022-2023 年度には、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。しかし、高波数成分が強く励起された乱流場においては、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。

5. 今年度の研究成果の詳細

・サブテーマ 1 :

前課題で開発したシミュレーションコードを雛形として、シミュレーションのみを行うコードと動的縮約計算・可視化・解析を行うコード(以下、動的解析コード)を並列して実行する MPMD 型に変更するのがこのサブテーマの課題である。

まず、MPMD 化するためのプログラムのスケルトンを作成した。次に、JCAHPC の新スーパーコンピュータ Miyabi-G の情報を踏まえ、利用システムを Wisteria/BDEC-01 Aquarius から JCAHPC Miyabi-G に変更した。このため、Miyabi-G をターゲットとした移行作業(サブテーマ 2 に該当)を先行して実施し、その特性を理解した上で MPMD 化の可否を検討する方針とした。これは、Aquarius と Miyabi-G で CPU、メモリ、GPGPU 構成が大きく異なり、想定される大規模シミュレーション(例:格子点数 2048^3 、または $1024 \times 1024 \times 4096$)を実施して初めて MPMD 化の適用可否を判断できるためである。サブテーマ 2 の 2024 年度分作業の完了が年度末となり、2024 年度にはこのサブテーマは完了に至らなかった。

・サブテーマ 2 :

当該コードは、2023 年度に東京大学情報基盤センター・JCAHPC の支援により GPGPU 向け

に移植され、Wisteria/BDEC-01 Aquarius 上で性能評価を行った。移植完了後に Wisteria/BDEC-01 Aquarius 上でテストしたところ、格子点数 512^3 程度の計算では十分な性能を発揮する一方、格子点数 1024^3 では効率が低下することがわかった。また、システムの運用上、計算規模は 1024^3 が上限である。他方、Miyabi-G 上では格子点数 2048^3 規模のシミュレーションが可能である。しかしこの場合には、使用するノード数が（従って 3 次元 FFT が行う alltoall 通信のコストが）極めて大きくなる。このため、引き続き最適化を図る必要があると認識している。

2024 年度は、物理的成果を生み出すための解析サブルーチンも含めてコード一式を見直した。この一環として、Politano と Pouquet による MHD 乱流の Karman-Howarth 方程式 (Politano and Pouquet, PRE 1998), Galtier による Hall MHD 乱流の Karman-Howarth 方程式 (Galtier, PRE 2008) のスケーリングの確認、拡張された自己相似組成 (Extended Self-Similarity) を利用した縦速度相関・縦磁場相関スケーリング則の計算など、乱流の統計法則を明らかにするための解析も GPGPU 対応を行うことに決定した。これらは、プログラムが MPMD 化された際に (サブテーマ 1), 4DSV 可視化と同様にシミュレーションパートと並行して別プログラムとして解析を行

うことを想定している。

これらのサブルーチンを含むコード一式は、再び東京大学情報基盤センターの支援を得て、GPGPU 向けに移植・最適化された。表 1 は、格子点数 1024^3 のシミュレーションにおける計算時間を Wisteria/BDEC-01 Odyssey, 同 Aquarius, Miyabi-G の間で比較したものである。Odyssey 16 ノード 16 CPU を使用した計算を基準に、Aquarius と Miyabi-G では 16 GPU 16 プロセスで比較したものである。Aquarius と Miyabi-G では、GPU の枚数こそ一致しているが、ノード数や CPU 数が異なることに留意する必要がある。

表 1 では、Miyabi-G で 16 ノードを使用し、3 次元 (x, y, z) 空間を $1 \times 8 \times 2$ に分割した場合が最速となっている。Miyabi-G での計算時間は Odyssey の 34%, Aquarius の 71.5% である。Aquarius の NVIDIA A100 (HBM2 40GB, FP64 性能 9.7 PFLOPS) に対し、Miyabi-G の NVIDIA GH200 (HBM3 96GB, FP64 性能 70.4 TFLOPS) は理論性能で大きく上回ることを考慮すると、我々のコードはまだ十分に Miyabi-G の性能を引き出せていないと考えられる。ただし、擬スペクトル法においては 3 次元 FFT に伴うプロセス間通信が大きなコストを占めるため、FP64 演算性能がそのまま性能向上に直結す

	ノード数	GPU 数	領域分割 (プロセス数)	1 ステップ計算時間 [sec]
Miyabi-G	16	16	$1 \times 8 \times 2$ (16)	8.20
Miyabi-G	16	16	$1 \times 4 \times 4$ (16)	10.80
Aquarius	2	16	$1 \times 16 \times 1$ (16)	45.80
Aquarius	2	16	$1 \times 8 \times 2$ (16)	48.97
Aquarius	2	16	$1 \times 4 \times 4$ (16)	11.46
Odyssey	16	0	$1 \times 16 \times 4$ (64)	23.80

表 1: 格子点数 1024^3 のシミュレーションにおける計算時間比較。Odyssey 16 ノード 16 CPU を基準に、Aquarius と Miyabi-G では 16 ノード 16 プロセスで比較した。

るとは限らない。今後は、プロセス間通信を減らす何らかの工夫を行う必要があり、現在その方策を検討中である。

・サブテーマ 3 :

前課題の LES 手法開発では、拡張 MHD モデルの SGS モデルを開発した。一般的に SGS モデルは、格子サイズ以下の短波長成分の長波長成分に対する非線形効果を現象論的・統計的に補完するものであり、DNS における運動の格子スケール成分をそのまま LES で再現することは容易ではない。このような性質を改善し、乱流の格子スケール成分の動力学的性質が担保されるモデルを作成することが、2024 年度課題からの主要な目的の一つとなった。

2024 年度はこの課題に取り組むため、以下の 2 つの研究開発を実施した :

a. 短波長成分 (Hall MHD 乱流のサブイオンスケール) における支配的な運動の解明

Hall MHD 乱流のサブイオンスケール (高波数成分) の特徴は、乱流の性質やその発展段階で異なる。運動エネルギーと磁気エネルギーが同程度の大きさを持つ状態から始まる減衰性乱流のように、渦の巻き上がりが乱流の構造形成に重要な役割を果たす渦乱流的な場合もあれば、強制乱流、特に高磁気プラントル数乱流のように、磁場の高波数成分が波動乱流としての性質を強く示す場合もある。このような性質については、2024 年度に総説論文として出版した。今後は、特に波動乱流としての性質が強い場合についての短波長成分のモデル化の手法について調査を進める予定である。

これまでの研究成果を論文として出版する一方、Hall MHD 乱流シミュレーションの直接数値シミュレーション (DNS) により、動的縮約モデルの開発使用する参照データの生成を進めた。

b. 自由度を低減する力学系的手法としての

POD の実装

a. のような物理に関する調査研究の一方で、短波長成分をモデル化するための数値手法として POD コードの開発を開始した。POD は場の方程式の時間・空間共分散行列から固有値固有ベクトルを求めることが計算の本質である。POD 自体は古くからある手法であるが、我々の大規模シミュレーションデータに利用可能なオープンソースコードは現時点で見つからず、自作する判断をした。

2024 年度は、テストベッドとして Kuramoto-Sivashinsky (KS) 方程式のデータを用い、並列 POD コードの初期開発を行った。行列ソルバーには ScaLAPACK を採用し (EigenEXA も検討対象)、我々のデータ構造に適合した分散並列版を作成した。現在は基本機能が完成しており、並列性能の測定は 2025 年度に継続予定である。

・サブテーマ 4 :

本サブテーマでは、MPMD 化に伴い、従来はシミュレーションと独立に実行していた可視化および統計解析を、並列プログラムとしてシミュレーションと同時実行可能とする体制を整備することを課題とした。また、乱流現象で重要な役割を果たすと考えられる磁気リコネクションなど突発事象の検知や高波数成分を支配すると考えられるホイッスラー波の形成と伝播など、物理的に重要な事象を効率よく可視化解析するための 4DSV の改良も引き続き行っている。

2024 年度計画では、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、シミュレーションコードのヘテロジニアスシステムへの対応 (コードの MPMD 化) を、Aquarius, Odyssey 両システムを用いて進めることを計画していた。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 のみのノードで行うことを想定したものである。これについては、サブテーマ 1 と同じ事情で、Miyabi-G へのコード移植が完了するのを待ため、一時作業を停止した。Miyabi-G へのコード移植が完了したことを踏まえ、2025 年度には、Miyabi-G での最適化を踏まえつつ MPMD 化を再開する。

また、2023 年度に引き続き、4DSV 機能の開発改良を行った。図 1 は、渦による電流シートの巻き取りのシミュレーションである。このシミュレーションは、乱流渦が比較的弱い電流シートを巻き取り、これにより（電流シートを形成する）反平行磁力線が形成されること、その後反平行磁力線の間にリコネクションが発生する状況を単純化したものである。このモデルは簡単ではあるが、単にリコネクションの簡単な事例に留まらず、ヘリシティと深く関わっている。

MHD および Hall MHD モデルでは、磁気ヘリシティは磁気抵抗ゼロの極限で保存量となる。しかし、有限の磁気抵抗が存在するシミュレーションでは、磁気ヘリシティが変化し続ける（これに伴ってベクトル場の構造が変わるので、物理的に重要な事象である）。この変化の原因の一つが磁気リコネクションであると考えられるが、実際にシミュレーションの中で磁気リコネクションの発生を同定するのは簡単ではない。図 1 のような画像を 4DSV 機能で大量に生成し、如何に効率よく磁気リコネクションの発生を検知するかが重要である。磁気リコネクションを検知するには多数の可視化画像が必要である一方、現実的な計算資源を考えると可視化画像の作成枚数を減らす必要がある。この両者を高いレベルで両立させるため、ノウハウの蓄積を進めている。これについては、2025 年度も研究を継続する予定である。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

2024 年度研究の自己評価は、サブテーマ 1 から 4 についてそれぞれ、40%, 100%, 120%, 70%程度である。

サブテーマ 1 は、ターゲットシステムを Aquarius から Miyabi-G に変更した影響が出ている。表 1 のように、Aquarius よりも Miyabi-G の方が素早く演算できること、最適化を進めればさらに高速化できる可能性もあることから、2025 年度にはコードの MPMD 化を進める予定である。

サブテーマ 2 については、東京大学・筑波大学(JCAHPC)の支援を受けて Miyabi-G スーパーコンピュータへの移植が進んだため、2024 年度目標は 100%完了したと考える。他の作業との調整を図りつつ、2025 年度も最適化作業を進める。

サブテーマ 3 については、概ね順調に研究が進んだと考えられる。短波長成分 (Hall MHD 乱流のサブイオンスケール) における支配的な運動の解明とモデル化の参照データ取得については、当初想定以上に研究が進んだ。短波長の性質についての論文が出版されただけではなく、磁気プラントル数が異なる乱流についての比較論文も投稿目前であり、この点だけを見るなら当初目標に対して 150%の進捗である。

自由度を低減する力学系的手法についても、ScalaPACK による大型データの POD 計算コードの開発は順調に進んでいる。2025 年度にはコード開発をさらに進め、KS 方程式の解の揺らぎを POD モードの係数の集合として表現すること（これを実現できなかったためサブテーマ 3 の進捗率は 120%とする）、次には二次元データの展開と順を踏み、最終的には Hall MHD 乱流の 3 次元データの POD へと向けて開発を進める計画である。

サブテーマ 4 も概ね順調である。Miyabi-G へのコード移植を待ためにコードの MPMD 化を停止したが、この移植作業が完了したこ

とで、今後のコード開発の焦点がコードの MPMD 化に移る。2025 年度には、本格的に開発を進める予定である。また、4DSV については、顕著な進展こそないが、ノウハウの蓄積は進んでいる。現在の可視化作業をさらに進展させつつ、手法の改良を進める予定である。

※7. 研究業績はウェブ入力です