

jh240016

宇宙地球惑星系連成シミュレーションに向けた計算技術開発

三宅洋平（神戸大学大学院システム情報学研究科）

概要

本研究の目的は、異なる時空間スケールや素過程をターゲットとする複数のシミュレーションモデルをプロセス間通信により協調動作させることで、マルチスケール／マルチフィジックスの宇宙プラズマ・惑星大気シミュレーションを実現することである。独自に開発した MPMD モデルに基づくコード間結合フレームワーク CoToCoA を活用し、柔軟かつ省コストに連成シミュレーションを実装する。2024 年度は、本格的な連成シミュレーションモデルの構築に向けた要素モデルの高度化に取り組んだ。具体的には、1. 空間方向に対する並列性が制限される計算モデルにおける時間方向並列化を実装し、並列実行による高速化を実現した。また惑星上層における中性・電離大気統合数値シミュレーションの実現を新たに研究目標に据え、その要素技術となる、2.モンテカルロ直接シミュレーション (DSMC) への動的負荷分散機能の実装に取り組み、当該機能の有効性を確認した。

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

京都大学 学術情報メディアセンター
九州大学 情報基盤研究開発センター

(2) 課題分野

大規模計算科学課題分野

(3) 参加研究者一覧と役割分担

三宅・臼井 (神戸大学)	宇宙プラズマ連成モデルの設計・応用
酒谷・田中 (神戸大学)	宇宙プラズマ連成モデルコードの開発
川村 (神戸大学)	惑星上層中性大気シミュレーションプログラムの最適化
南里豪志 (九州大学)	連成フレームワーク CoToCoA の開発
深沢圭一郎 (京都大学)	グローバルプラズマシミュレーションモデルの開発
周靖得 (京都大学)	連成計算向け高効率データバフファリング機構の開発
加藤雄人 (東北大学)	メソスケールプラズマシミュレーションモデルの開発
寺田直樹 (東北大学)	惑星上層中性大気計算の妥当性検証

2. 研究の目的と意義

本研究の目的は、異なる時空間スケールや素過程をターゲットとする複数のシミュレーションモデルをプロセス間通信により協調動作させることで、マルチスケール／マルチフィジックスの宇宙プラズマ・惑星大気シミュレーションを実現することである。複合システムである宇宙地球惑星系の各領域や時空間スケールの物理現象計算の間を縮約化された物理情報で結合する「連成シミュレーション」を、本研究では独自のコード間結合フレームワーク CoToCoA の活用により柔軟かつ省コストに実装し、その有効性を探求する。この取り組みは宇宙科学の進展に大きな意義があると同時に、連成フレームワークそのものは、異なるシミュレーションプログラムを低作業コスト・高計算効率で結合する方法論と定義づけることができ、本課題で連成シミュレーションを実現する際に蓄積されたノウハウそのものが、幅広い応用分野への波及効果を持つと期待される。

連成シミュレーションモデルを構築するには、それぞれの要素モデルの高度化と、その結合方式の検討、という 2 側面を戦略的に推進する必要がある。2024 年度は前者に焦点を当て、将来の連成結合モデル構築を見据えた要素モデルの高効率化に取り組んだ。具体的には、1.空間方向に対する並列性が制限される計算モデルにおける時間方向並列化の検討を本格化させる。また惑星上層における中性・電離大気統合数値シミュレーションの実現を新たに研究目標に据え、その要素技術となる、2.モンテカルロ直接シミュレーション (DSMC) への動的負荷分散機能の実装に取り組む。

3. 当拠点の公募型共同研究として実施した意義

部分プロセス空間内で独立に動作する複数のコードが高効率かつ正しく情報伝達を行うには、メモリー貫性に配慮した上でリモートメモリアクセス方式に基づいた並列プログラムを記述する必要がある、計算機科学分野の知識と経験が必要である。一方で、CoToCoA のような、連成フレームワークを設計する上では、実際の連成アプリケーションでやり取りが発生するデータの種別やサイズ、頻度に応じて仕様を策定する必要がある、ソフトウェア設計者と利用者間のコデザインが必要である。また個別のシミュレーションコードの効率化作業においても、両分野の協働が極めて有効であることは、申請者のこれまでの JHPCN 課題の成果が示してきたとおりである。このように本課題は、計算科学と計算機科学分野の緊密な連携が必要不可欠な研究テーマであり、拠点公募型共同研究として実施する意義は大きい。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

独立に設計・開発されてきた科学技術計算プログラム同士を省コストに結合する数値技術の実証として、磁気圏グローバル MHD

計算と人工衛星帯電予測計算を CoToCoA に基づき連結することで、磁気圏環境の時間変動効果を反映した人工衛星の帯電予測技術の構築に取り組んでいる。

2023 年度は、磁気圏－衛星帯電連成解析における各モデルに対する計算資源配分最適化を目的として、帯電計算の並列実装に取り組んだ。具体的には帯電計算の支配方程式を、独立電位を有する衛星筐体部分からなる多要素系に拡張することで、より実際の状況に即した解析条件に対応させるとともに、筐体要素未知数に対応する並列性を確保した。本取り組みは、CoToCoA フレームワークに基づき構築した地球磁気圏－人工衛星帯電連成モデルに、数値予測に必要な計算高速化の機能性を追加したものとして、宇宙天気予報技術の高度化に資する成果である。またコード間結合フレームワークの In-situ 可視化応用にも取り組み、CoToCoA と TCP 通信モジュールを活用することで、磁気圏－衛星帯電連成計算実行中の可視化データをオフロードすることに成功した。

5. 今年度の研究成果の詳細

太陽活動が極大期を迎える中、宇宙天気予報の一要素技術として宇宙環境変動を反映した衛星帯電予測を短時間で行う必要性が高まっている。我々は地球磁気圏のプラズマ環境を再現する磁気圏グローバル MHD 計算と人工衛星帯電計算を組み合わせた地球磁気圏－人工衛星環境連成解析の開発を進めている [Miyake+, ICCS, 2023]。連成対象となるモデル間の物理情報の連携により、大規模な宇宙嵐時の顕著な衛星帯電現象の再現に成功している一方で、計算の高効率化の観点で連成モデル間の負荷均衡の観点では課題が残っていた。具体的には磁気圏 MHD 計算は空間領域分割による並列化が実装されているが、帯電計算は並列化未実装である。

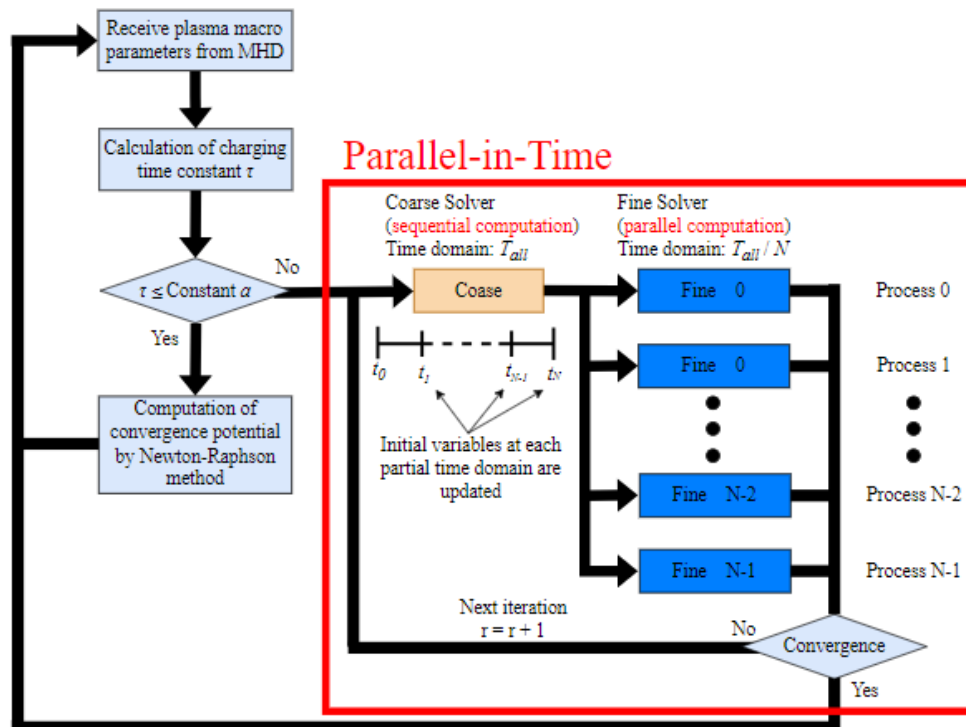


図 1 時間方向並列実装時の衛星帯電計算フロー

よって、磁気圏 MHD 計算の高並列実行時には帯電計算の計算速度が律速段階となってしまう。そこで磁気圏 MHD 計算の高並列実行時の実行時間と帯電計算の実行時間のバランスを可能な限りとるため、帯電計算の時間領域分割による並列化（時間方向並列化）を検討し、実装と性能検証を実施した【田中他, 情処研究報告, 2024】。

因果律に支配される系の時間方向並列化では、まずその時間発展を粗く低計算コストで予測した上で、その修正計算を並列処理する方針が基本的なアプローチである。当該方針に基づき、先行研究で幅広く用いられている Parareal 法 [Lions+, C.R.Acad. Sci. Paris, 2001] をベースとした時間方向並列を帯電計算へ適用した。当手法では計算対象の時間領域をプロセス数 N 個の部分時間領域に分割し、それぞれの部分時間領域を異なるプロセスが担当することで、並列に時間発展計算を行う。部分時間領域同士は因果律に基づく依存関係があるため、部分時間領域のつなぎ目で解の不整合が現れる。Parareal 法

は各時間領域間の不整合が許容できる程度になるまで反復計算を用いて修正を繰り返す手法である。部分時間領域間の不整合を修正するために時間刻み幅の異なる 2 種の時間発展計算を行う。一つは、本来計算したい時間刻み幅を用いる細かい積分演算（Fine solver）である。二つ目は、本来計算したいものより大きい時間刻みを用いる粗い積分演算（Coarse solver）である。粗い積分演算は計算コストを抑えつつ、細かい積分演算を近似する役割と部分時間領域間の数値結果の不整合を修正する役割を持つ。

部分時間領域間の数値結果の不整合の修正は、各部分時間領域の初期値を更新しながら電位時間発展計算を反復することによって実施する。修正には、手前の部分時間から Fine solver と Coarse solver を解き進めることによってそれぞれ得られる衛星電位値と、一つ前の修正反復における Coarse solver に基づく衛星電位値を用い、Newton-Raphson 法の考えに基づいて導出した初期値更新式【高見他, 情処研究報告, 2011】を用いる。図

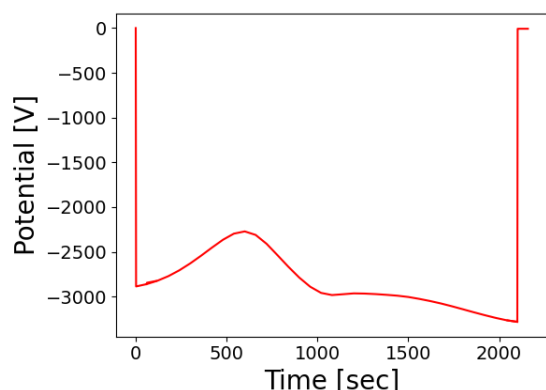


図 2 地球の蝕に対応する時間帯における衛星電位のモデル予測値

1 は時間方向並列化を適用した場合の衛星帯電計算フローチャートであり、水流動計算解析に同手法を用いた先行研究を参考にした。各反復においてまず、全時間領域において非並列で粗い積分を行い、各部分時間領域の初期値を更新する。更新された初期値を使用し、部分時間領域毎に各プロセスが細かい積分を並列で計算する。各部分時間領域の境界における数値結果の不整合が許容できる程度になるまでこの 2 種類の数値計算を繰り返す。

時間方向並列機能を実装した衛星帯電モデルを磁気圏 MHD シミュレーションと連成させ、動作検証を実施した。宇宙プラズマ環境としては大規模な地磁気サブストームが発生し、米国 Galaxy15 衛星の障害発生が報告された 2010 年 4 月 5 日の地球磁気圏環境を想定した。当該環境に Galaxy15 とは異なる仮想的な人工衛星が曝されたことを想定し、帯電現象を解析した。京都大学 Camphor3 システムを用い、地球磁気圏グローバル MHD 計算に 512 プロセス、衛星帯電計算に 32 プロセス、両者の連携を統括する制御プログラムに 1 プロセスを割り当てて計算を実施した。

図 2 は地球の蝕に対応する時間帯の衛星構体の電位推移を示したものである。30 分ほど継続する蝕の時間帯を通して、衛星構体部が

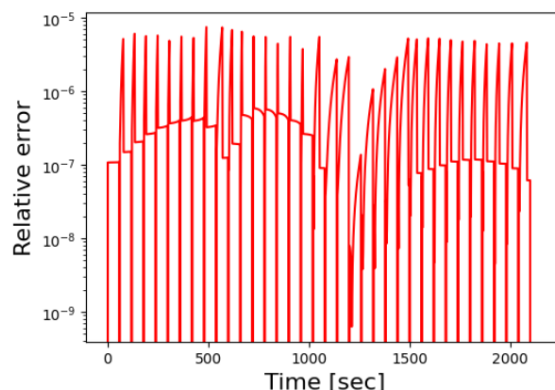


図 3 時間方向並列実装前後の衛星電位予測値の相対誤差

3~4.5 kV 程度の負電位に帯電している。当計算結果は、帯電計算に時間方向並列化を適用する前の解と非常に良い一致を示す。実際、並列化実装前後の解の相対誤差を図 3 に示す。部分時間の接続や解の振る舞いに応じて誤差は変動するが、その大きさは 10^{-5} 以下に抑えられており、宇宙天気予報で必要とされる衛星帯電評価に照らして十分な精度が確認された。当該計算においては、32 並列実行で平均して 29 倍の速度向上が得られており、時分割に基づく並列実装が有効に機能することが確かめられた。

空間方向に並列度を持たない衛星帯電軽量計算モデルにおいて、時分割に基づく並列化および高速化を達成した。本成果は、リアルタイムの地球磁気圏環境シミュレーションに付加可能な衛星帯電予測モデルの実現可能性を示すものであり、将来の宇宙天気予報システムの高度化への寄与という意味でもその意義は大きい。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

下記では、課題申請時に設定した計画に対する進捗度とその内容を記載する。

- (1) 空間方向に対する並列性が制限される人工衛星帯電計算の時間方向並列化（申請書内：研究計画項目 1）：進捗率 100%

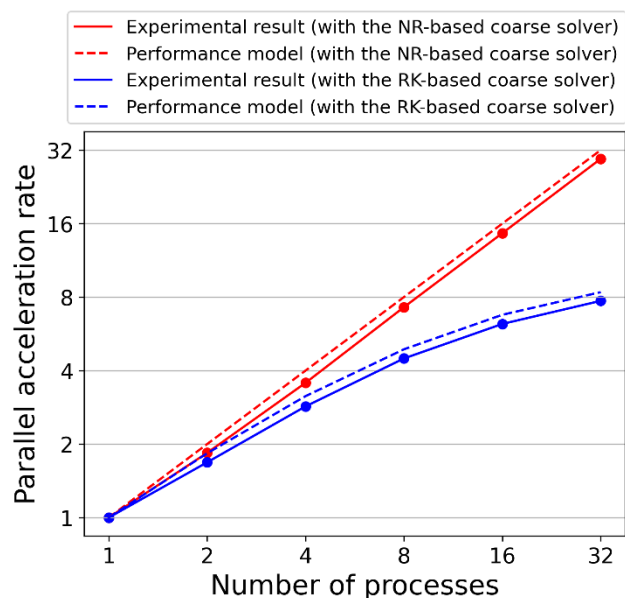


図 4 時間方向並列実装された衛星帯電計算の並列加速率（1 反復実行時）。NR と RK はそれぞれ粗い時間刻み幅の計算に、ニュートン法とルンゲクッタ法を使用した結果を示す。Performance model は、[田中他, 情処研究報告, 2024] の論文にに記載した性能モデルに基づく。

5 節で報告した Parareal 法による人工衛星帯電計算の時間方向並列化において、並列効率を向上するための検討を進めた。Parareal 法では本来依存性を持つ時間発展を複数区分に分割して並列実行し、その際に生じる時間区分間の不整合を反復計算により減少させる。この際の収束性が全体の性能を左右する。2023 年度の準備的検討では、拡散方程式問題において Parareal 法の有効性が再現されているものの、衛星帯電計算では前述の収束性が悪化し、Parareal 法による高速化のメリットが得られていなかった。我々はこの収束性悪化の原因とその解決策を探るべく、①時間区分間の修正式、②Coarse solver の数値化法、③反復における収束判定式、など多方面の検討を実施した。その結果、時間区分間不整合の修正を時間順方向に速やかに伝搬させる役割を持つ Coarse solver の最適化によって、収束性ひいては全体の並

列性能を改善できることを見出した。下記ではその検討内容について説明する。

並列化前の衛星帯電計算では常微分方程式の数値積分に 4 次のルンゲクッタ法を用いており、並列実装における Fine solver の計算手法もこれを踏襲している。Coarse solver の計算手法としては、時間刻み幅を大きくとった同様の数値積分法を用いるのが基本の実装となる。本研究ではこれに加え、粗い時間刻み幅での計算に求根アルゴリズムであるニュートン法を用いる手法を提案した。つまり、各部分時間領域の初期値の近似・修正に衛星に流入する全電流がゼロに収束した平衡電位解を使用する。一般に衛星電位は周囲のプラズママクロパラメータの変化に対応した有限の応答速度を持つことが知られている。この帯電応答速度がプラズマ環境変動速度よりも十分に小さい場合、上述の平衡解を実際の衛星電位の良い近似と見なせる。ニュートン法を用いることで得られるメリットは二つある。一つは時間発展計算と比較して非常に計算量が小さい点である。もう一点は、時間刻み幅を考慮する必要がない点である。帯電計算において時間発展計算を行う場合、計算負荷を抑えつつ、適切な計算精度を保つための時間刻み幅の大きさはプラズママクロパラメータによって異なるため、調整が必要である。しかし、ニュートン法を用いることで時間刻み幅の大きさの調整が不要となる。

Coarse solver に従前のルンゲクッタ法と今年度新たに実装したニュートン法を用いた場合の並列効率評価を実施した。図 4 は並列加速率である。粗い時間刻み幅での計算にニュートン法を用いた場合（赤線）と粗い時間積分にルンゲクッタ法を用いた場合（青線）のそれぞれについて実測値と我々が田中他 [情処研究報告, 2024] の論文で示した性能モデルに基づく理論値を示している。粗い時間積分にニュートン法を用いた際は、実測値

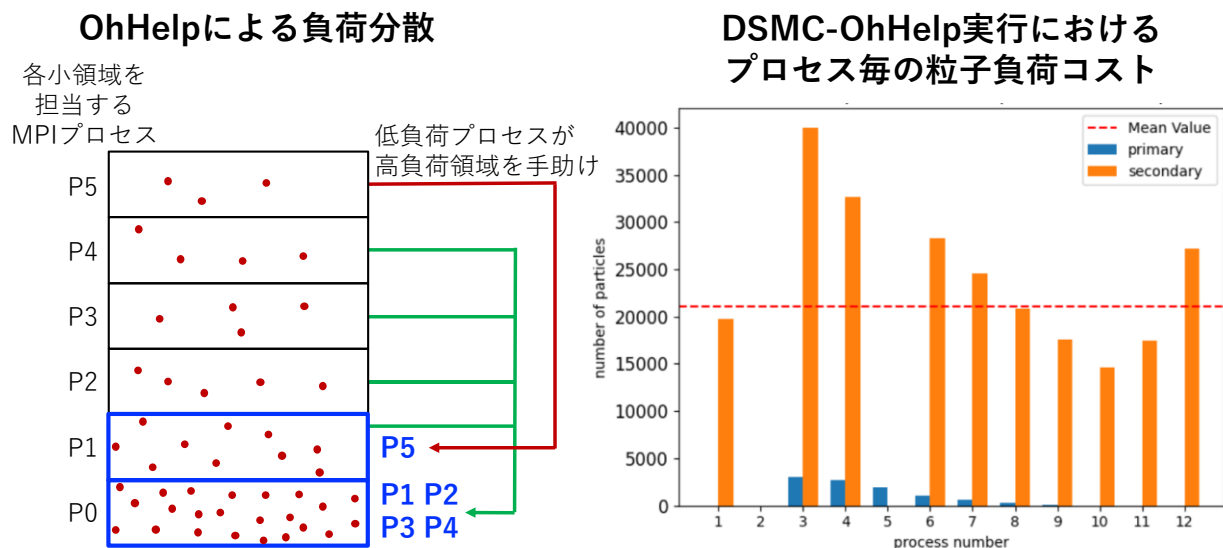


図5 (左図) OhHelp による粒子演算負荷分散の基本概念. (右図) OhHelp 実装 DSMC 計算におけるプロセス毎の粒子演算負荷ヒストグラム. 赤点線は「総粒子数/プロセス数」で計算した理想的な負荷均衡条件を示す。

はモデル予測値に対して、プロセス間の通信コスト等がオーバーヘッドとして付加されるが、その影響は軽微である。計算性能はプロセス数に応じて概ね線形に増加している。一方、粗い積分にルンゲクッタ法を用いた場合の並列加速率は、プロセス数に応じて線形に増加しない。32 プロセス使用時の並列加速率はそれぞれ、29 倍、7.7 倍となっている。今回の計測条件ではプラズママクロパラメータの時間変動が帯電応答速度よりも小さくなっており、ニュートン法による近似精度が十分に高い。このようなケースでは、Coarse solver にニュートン法を用いることに優位性がある。

(2) モンテカルロ直接シミュレーション (DSMC) への動的負荷分散機構の実装 (申請書内：研究計画項目 2)：進捗率 70%

2024 年度より新たに惑星上層における中性・電離大気統合数値シミュレーションの実現を新たに研究目標に据え、その要素技術となる、モンテカルロ直接シミュレーション (DSMC) への動的負荷分散機能の実装に着手している。その目的は宇宙空間への惑星大気の流出過程を明らかにすることにある。惑

星科学分野の中核的な科学課題の一つである、惑星大気流出過程の解明には、電離大気と中性大気の数値モデルを個別に高効率化した上で、連成計算により統合する必要がある。

惑星上層の中性大気に対しては、モンテカルロ直接シミュレーション (Direct Simulation Monte Carlo: DSMC) 法に基づく粒子コードが整備されてきたが、並列実行のために領域分割を実施した際に生じる粒子密度の非一様性に伴う負荷不均衡が課題となっている。本研究では、上述の惑星上層大気統合粒子コード構築の足掛かりとして、これまで粒子モデルシミュレーション向けの動的負荷分散手法である OhHelp を、DSMC コードに対して適用することで、並列計算効率上の課題解決を目指す。

DSMC 計算では、セル内の粒子間で衝突処理を実施するため、同セル内の粒子が複数のプロセスに配分されることを可能な限り回避する実装が求められる。そこで OhHelp を用いた既往研究で活用してきた分割小領域毎に加え、新たにセル毎の粒子数を計上するヒストグラムデータを追加実装した。このヒ

ストグラムに基づき、粒子を所属セルに応じて適切にソーティングして管理する処理を組み合わせることで、正確な DSMC 計算に適合した実装を行った。

これまでに高度方向 1 次元空間を対象とする DSMC 計算への OhHelp 基本機能の実装と動作検証を完了し、2 次元 DSMC 計算の OhHelp 実装に着手している。また当初は計算内での粒子生成・消失処理と OhHelp の粒子管理に不整合が生じていたが、先述の粒子ヒストグラムの維持管理方法を再検討することで惑星上層では高度方向に大気密度の勾配が顕著に発現するため、OhHelp の持つ動的負荷分散機能が特に必要とされる条件設定である。

OhHelp の導入前後の 1 次元 DSMC コードの動作検証と並列性能評価を実施した。火星上層の希薄中性大気を対象としたシミュレーションでは、計算開始後に計算領域の下端から順次中性粒子が導入され、最終的に高度と共に粒子密度が低下する非一様な密度分布が形成される。計算で扱う総粒子数をプロセス数で均等割した理想的な負荷分散状況下でのプロセスあたりの粒子数に対する、実際に 1 プロセスが所持した粒子数の最大値を不均衡度合いと定義し（完全な均衡化が達成されていればこの値は 1 となる）、OhHelp 導入前後で比較した。その結果、元々の不均衡度合いである 9.8 が OhHelp 導入により 2.0 まで緩和されることを確認した（図 5）。

(3) 進捗状況の総括と今後の展望

当継続研究課題において数年来に渡り取り組んできた磁気圏グローバル MHD 計算—人工衛星帯電予測連成モデルは、CoToCoA を活用した結合計算の基本実装、現実に即した衛星帯電評価を行うための機能拡充に加えて、課題となっていた衛星帯電モデルの時間方向並列化を達成した。現状の連成モデルは、MHD と帯電計算の双方にマルチプロセスを柔軟に割り当てることができ、連結モデ

ル間の計算負荷バランスの調整が可能な実装である。これらの成果をもって、宇宙環境変動効果を範囲した衛星帯電評価計算の基盤技術が概ね確立されたと評価できる。今後は宇宙理工学分野において当該技術の高機能化をさらに進め、運用中の人工衛星システムに対応した実用化を追求するフェーズに進めていく。

2024 年度から宇宙理学分野における中核的研究課題をターゲットに据えた数値技術開発を展開している。惑星上層大気物理過程の数値シミュレーションモデルへの高効並列実装がその皮切りである。2024 年度の検討では、OhHelp 導入による負荷均衡の効果が一定程度認められたと評価できる一方、当初はさらなる負荷均衡化を想定していた。1 次元の計算モデルにおいては、1 プロセスが担当するセル数が非常に小さい。この場合、同セル内の粒子が複数のプロセスに配分されることを回避する実装では、粒子負荷のプロセスへの割り付けに制約が生じ、負荷均衡が十分に達成されなかったと分析している。

現在実装中の 2 次元計算モデルでは 1 プロセスが担当するセル数が各段に増加するため、より負荷均衡が有効に機能すると期待される。2025 年度の継続課題で、当該観点を検証予定としている。また数値計算技術の観点から惑星上層中性大気モデルの大規模化・多次元化を図る取り組みと並行して、光化学過程や電離大気モデルなどの物理要素を結合し、有機的に連成することで高忠実な太陽系固体天体の希薄大気モデルを構築していく。

以上の進捗状況を総括して、課題全体としての達成率を 85%と自己評価し、2025 年度以降の継続課題でさらに検討を加速する計画である。