

jh250013

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）

高精度高並列 Hall MHDLES シミュレーションコードを Miyabi-G へ移植し、Odyssey 比で約 2.3 倍の高速化を達成した。一方で GPU 利用効率には改善の余地があり、通信・計算の最適化を含めた改良を検討している。さらにデータ解析コードの GPU 化および AMD MI300A 搭載環境への移植も進めた。Hall MHD 乱流の数値シミュレーションにより、等方・非等方乱流の基礎データを取得し、エネルギー伝達や高波数励起の特徴を確認した。これらのデータを用いた解析により、磁気プラントル数に依存したフラクタル特性のスケール差を解明し、成果を Phys. Fluids 誌に報告した。さらに POD に基づく動的縮約コードを並列実装し、計算コストを抑えつつ多成分乱流の主要モード抽出に成功した。可視化・解析手法の GPU 対応も進展した。

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

サブテーマ 1 (シミュレーションコードの GPU スーパーコンピュータ対応) 担当: 三浦、中島、高橋、住元、片桐

サブテーマ 2 (SGS モデル開発のための基礎データ取得・動的縮約コード開発) 担当: 三浦、半場、松本、Yadav, Pandit, Patel

サブテーマ 3 (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

2. 研究の目的と意義

衝突頻度の低いプラズマ乱流は、巨視的な MHD スケールから、サブイオンスケール、さらに電子スケールに至るまでの広い階層にわたって構成される、多階層乱流である。こ

のような乱流構造を解明するためには、階層間の相互作用を適切に取り入れた大規模な大域シミュレーションが不可欠である。しかしながら、これらすべての物理過程を同時に記述できる単一の統一モデルは、現時点では存在していない。また、サブイオンスケール以下の微視的現象は電子の運動の影響を強く受けるため、極めて微細な時空間構造を伴う。このことは、対象とする計算の規模と計算負荷を著しく増大させる要因となっている。

本研究では、格子解像度以下のサブグリッドスケール (SGS) を現象論的モデルで表現するラージ・エディ・シミュレーション (LES) コードを発展させる。具体的には、主にサブイオンスケールを対象とする動的縮約モデルの導入と GPU 対応コードの開発を行い、多階層プラズマ乱流の効率的なシミュレーションの実現を目指す。本手法の確立により、低衝突頻度プラズマ乱流における多階層性の解明をはじめとする、プラズマ物理学の進展への寄与が期待される。

この研究は前年度からの継続課題であり、前年度までの研究との大きな違いは、以下の通りである。

- (i) CPU マシン用コードから GPU マシン用コードへの本格的な転換

2024 年度まで使用していた Wisteria/BDEC-01 Aquarius から、主要なターゲットを JHPCN Miyabi-G に移行し、シミュレーションコードの GPU 化を推進する。

- (ii) SGS モデルの転換

スケール間のエネルギーバランス（運動・波動の強度）を主に評価する伝統的な SGS モデルから、強度に加えて位相も考慮しつつ計算規模を圧縮する動的縮約モデルへの転換を行う。

2024 年度・2025 年度に低次元のサンプルデータを用いてモデル化作業と POD コード開発を進め、2026 年度以降に 3 次元データの POD 計算やシミュレーションとの連成の具体化に取り掛かる計画となっている。

2024 年度には、動的縮約の基本ツールとして POD を選定し、一次元偏微分方程式のデータによる POD コードのテストを行った。2025 年度は大規模シミュレーションデータから最適固有展開 (POD) を速やかに実施するためのコード開発を進めるものである。

3. 当拠点の公募型共同研究として実施した意義

本課題は、シミュレーションコードの最新 GPU スパコンへの最適化と、データ科学を応用した動的縮約モデルの開発を主目的としている。この課題を JHPCN の公募型研究として行う意義は以下の通りである。

- (i) 多角的な学際性

プラズマ物理・データ科学・計算科学・可視化を融合した研究であり、かつ「多階層乱流」という広範な流体现象に共通する概念を扱うため、極めて高い学際性を有している。

- (ii) 計算科学との連携の不可欠性

スーパーコンピュータの最適化技術やプログラミングモデルに精通した専門家の協力が不可欠であり、本拠点の公募型共同研究として実施する明確な意義がある。

- (iii) 最適な研究体制の構築

本課題には、拠点に所属する計算科学の専門家を含め、上記のニーズを十分に満たす最適な共同研究者が結集している。

このように、最新のスーパーコンピュータの性能を引き出し、物理学とデータ科学の融合によって多階層現象の解明を目指す、理想的な学際的共同研究を企図する本課題は、JHPCN 公募型研究として実施する意義がある。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

サブテーマ 1 (シミュレーションコードの GPU スーパーコンピュータ対応) :

これまでの JHPCN 共同研究課題において、Hall MHD モデルに基づくシミュレーションコードの開発を行ってきた。また、本コードを用いた直接数値シミュレーション (DNS) を実施し、LES 用サブグリッドスケール (SGS) モデル開発のための基礎データを取得してきた。さらに、非圧縮性 Hall MHD モデルに加え、圧縮性拡張 MHD モデルに対応したコードの開発も進めた。

これらのコード開発の初期段階では、3 次元 FFT に P3DFFT ライブラリを利用していた。その後、共同研究者である高橋大介氏が開発した FFTE を基盤として、計算と通信のオーバーラップによる高速化手法を実装した。

加えて、東京大学・JCAHPC の支援のもと、これらのコードを Wisteria/BDEC-01 Aquarius へ実装し、さらに JCAHPC Miyabi-G への移植を行った（ただし、可視化用エンジンである VISMO ライブラリを除く）。特に Aquarius を用いた比較的小規模（格子点数 512³）のシミュレーションでは、1 ノードあ

たりで Odyssey の 10 倍以上の計算速度を達成しており、顕著な性能向上が確認されている。

サブテーマ 2 (SGS モデル開発のための基礎データ取得・動的縮約コード開発) :

JHPCN および他の計算資源を活用し、SGS モデル開発のための基礎データ取得を目的とした直接数値シミュレーション (DNS) を実施した。本計算により、Hall MHD 乱流におけるコヒーレント構造の特徴抽出、エネルギースペクトルのスケージング則、ならびに間欠性の定量的特徴づけを行い、プラズマ物理に関する複数の論文として成果を報告してきた。

さらに、これらのシミュレーションデータに基づき、従来開発してきた SGS モデルの高解像度化を実施した。その結果、当該 SGS モデルが強磁場下においても期待通りの性能を発揮することを確認した。

2023 年度および 2024 年度には、これら一連の成果を統合・発展させ、国際学会におけるプレナリー講演および招待講演として報告するとともに、総説論文として公表した。

加えて、2024 年度より着手した SGS モデルの高度化・転換に向けて、一次元データを入力とする並列 POD コードの開発および検証を行った。具体的には、Kuramoto-Sivashinsky

方程式のシミュレーションデータを入力として固有値・固有ベクトル解析を実施し、同一データに対して Octave を用いて独立に計算した結果と比較することで、数値計算の妥当性を確認した。

サブテーマ 3 (同時可視化手法・同時解析手法の開発と高度化) :

2024 年度までの研究により、大規模シミュレーションにおいて in-situ 可視化を行う場合には、可視化用カメラ (可視化する視点の位置) が格子点数に比例して増大するため、可視化処理時間の削減が課題として浮かび上がった。これを解決するための手段として、重要イベントを集中的に追跡することを提案し、これを実現するためカメラの移動・再設定機能などの実装を行った。

5. 今年度の研究成果の詳細

サブテーマ 1 (シミュレーションコードの GPU スーパーコンピュータ対応) :

(i) ベンチマーク :

前年度までにシミュレーションコードの GPU 対応 (移植) を完了し、JCAHPC Miyabi-G 上での実行が可能となった。これを踏まえ、本研究課題では Wisteria/BDEC-01 Odyssey および JCAHPC Miyabi-G を用いたベンチマー

	格子点数	ノード数	GPU 数	プロセス数	1 ステップ計算時間[sec]
Miyabi-G	1024 ³	16	16	16	8.26
Aquarius	1024 ³	2	16	16	11.46
Odyssey	1024 ³	16		64	23.80
Miyabi-G	2048 ³	128	128	128	11.03
Odyssey	2048 ³	128		512	25.50

表 1: シミュレーションコードのベンチマーク結果

クを実施した。プロダクトランの指標となる格子点数 2048³ 規模における評価の結果、Odyssey を 128 ノード使用した場合と比較して、Miyabi-G を同じく 128 ノード使用した場合には約 2.3 倍の高速化が得られることが確認された (表 1)。

本シミュレーションコードは、メモリバンド幅およびインターコネクト性能 (特に 3 次元 FFT における all-to-all 通信) が計算性能を支配する特性を有する。メモリバンド幅の観点からは約 4 倍程度の性能向上が期待されたが、Odyssey (TofuD) と Miyabi-G (InfiniBand NDR200) のインターコネクト性能の差異を考慮すると、現状の性能は概ね妥当な水準にあると考えられる。

一方で、Miyabi-G において 1 ノードあたり 2 プロセスで実行した場合でも、1 プロセス実行時と比較して計算時間に大きな差が見られないことから、GPU 資源が十分に活用されていない可能性が示唆される。この点は、GPU 利用効率のさらなる向上に向けたコード改良の余地があることを示している。

今後は、これらの課題に対する部分的な最適化に加え、計算スキーム自体の見直しも含めた改良を進める予定である。なお、本研究で得られた成果の一部については、拠点所属研究者との共著論文として現在投稿中である。

(ii) 関連プログラムの GPU 対応

(i) に加え、シミュレーションコードの GPU への移植サービス期間から今年度に至るまでに開発した、データ解析プログラムについても GPU 対応を進めた。また、課題代表者の所属機関で新たに導入したスーパーコンピュータ Plasma Simulator (双星) の一部として、AMD MI300A GPU を搭載したマシンが稼働を開始した。これに合わせたコードの移植も行った。

サブテーマ 2 : SGS モデル開発のための基礎データ取得・動的縮約コード開発

(i) 基礎データ取得

SGS モデルの検証の一環として、強制一様等方性 Hall MHD 乱流および一様非等方性 Hall MHD 乱流の数値シミュレーションを実施した。

図 1 には、非等方シミュレーションの代表的な可視化結果を示す。本シミュレーションでは、3 次元空間 (x, y, z) において、各方向の長さがそれぞれ $2\pi, 2\pi, 8\pi$ の直方体領域を設定し、 z 方向に一様な外部磁場を印加した。外力により駆動された速度場から磁場へエネルギーが伝達されるとともに、Hall 項の効果により磁気エネルギーの高波数成分が励起されることが確認された。

これらの非等方乱流シミュレーションの結果は、これまでに取得してきた等方乱流データとあわせて、(iii) で述べる動的縮約モデル構築のための基礎データとして活用されている。さらに、今後は乱流の物理機構解明に向けたデータセットとしての利用も予定している。

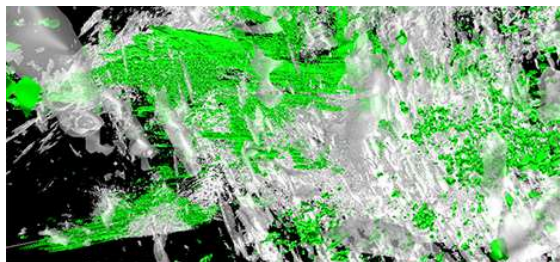


図 1: 非等方乱流シミュレーションの in-situ 可視化。緑色がエンストロフィー密度、灰色が電流密度。

(ii) 基礎データの解析に基づく物理研究

これまでに取得したシミュレーションデータを活用し、プラズマ物理に関する研究を推進した。その成果として、Hall MHD 乱流における磁気プラントル数の影響について、査読付き論文として報告した (Patel et al.,

Physics of Fluids)。本研究では、特に乱流の間欠性に着目し、磁場および速度場の構造関数のスケーリング特性に基づく解析を行った。その結果、磁気プラントル数が 1 程度あるいはそれ以上の条件下では、Hall 項を特徴づけるイオン慣性長よりも大きい MHD スケールにおいて、乱流場はマルチフラクタル的性質を示すことが明らかとなった。一方、イオン慣性長よりも小さいサブイオンスケールでは、スケーリング特性がモノフラクタル的であることが示された。これらの成果は、以下の論文として公表されている：

Pratik, Yadav, Miura, and Pandit, Physics of Fluids 37, 085237 (2025).

次に、我々の過去の研究(Araki and Miura, Plasma Fus. Res. 15, 2020) で提案した乱流場のイオンサイクロトロン・ホイッスラーモード分解を、大規模シミュレーションデータに適用する研究を行った。この結果について国際会議の招待講演として報告した(AAPPS-DPP2025, 福岡, 2025 年 9 月)。この研究をさらに発展させた内容を、2026 年度の国際会議 EPS Plasma Physics Conference (Edinburgh, United Kingdom, June 29-July 3, 2026) で招待講演として報告予定である。

さらに、GPU 化したコードを用いて、これまで開発した SGS モデルの検証を進めた研究成果発表を、国際会議で報告した(JSST Symposium, 査読付きプロシーディングス)。

(iii) 動的縮約モデルのコード開発

2024 年度には、Kuramoto-Sivashinsky 方程式に基づく 1 次元 1 成分データを対象として、Proper Orthogonal Decomposition (POD) コードの開発を行った。この段階ではデータサイズが小さく、計算が比較的容易であった。

2025 年度にはこれを発展させ、2 次元・3 次元の多成分データへの適用を見据えたコード開発を行った。多次元多成分乱流場に対する POD のテストデータとして、(i) 項で述

べた 3 次元非等方 Hall MHD 乱流シミュレーションを用いた。ただし、3 次元データの直接処理は計算コストが高く、開発初期段階には不向きであるため、磁場方向に平均化した 2 次元 6 成分の乱流データを使用した。

2 次元・3 次元乱流データから POD モードを効率的に抽出するため、Sirovich によるスナップショット POD を採用した。本手法は、大規模な時空間データから支配的構造(モード)を効率的に抽出する方法であり、特に自由度の大きい乱流問題に適している。通常の POD では、空間自由度に比例する大規模な自己共分散行列に対して固有値問題を解く必要があるが、スナップショット法では時間方向の相関行列を用いることで、問題サイズを「スナップショット数 × スナップショット数」に削減できる。このため、空間自由度が非常に大きい場合でも計算コストの大幅な低減が可能となる。

本スナップショット POD は、ScaLAPACK を用いた並列プログラムとして実装した。並列 POD コードとしての基本機能は 2024 年度のものに踏襲しつつ、z 方向に伝播する乱流波動を想定し、(x, y) 面データを z 方向にサンプリングすることで、疑似的なスナップショット POD を構成した。その結果、計算コストを抑制しながら、2 次元多成分乱流に対する POD モード(固有値および固有ベクトル)を取得することができた。ただし、本手法はコード開発段階における簡便な検証を目的としたものであり、必ずしも物理的に厳密な手法ではない。今後、POD に基づくモデル構築の段階では、時間的に十分離れた複数のスナップショットを用いた標準的な POD 解析へ移行することを想定している。

サブテーマ 3(同時可視化手法・同時解析手法の開発と高度化):

このテーマについては、Miyabi-G 上で

OpenACC 無しで VISMO ライブラリを用いて行う可視化がすべて期待通りであることを確認し、VISMO の挙動の検証を終えた。また、VISMO を本格的に Miyabi-G に対応するため、OpenACC 指示行を主だったループに挿入を終えた。

動的可視化の研究の一環として、注目する物理量と現象の対応を調べた。図 2 は、非圧縮性 MHD モデルによる乱流ダイナモシミュレーションにおける可視化である。図 2(a)-(c) は時系列となっていて、楕円で囲まれた領域に、徐々に 2 本の平行（または反平行）渦が形成されていることがわかる。平行渦はお互いに回転を、反平行渦対は相互に回転をもたらすことから、可視化の中で渦の向きを指定しなくても、渦の相対運動から渦の向きを推定することができる。このように、可視化対象に対する物理的な理解と可視化を対応させることで、可視化の注目点を自動選定する方向で、可視化手法の向上を検討している。

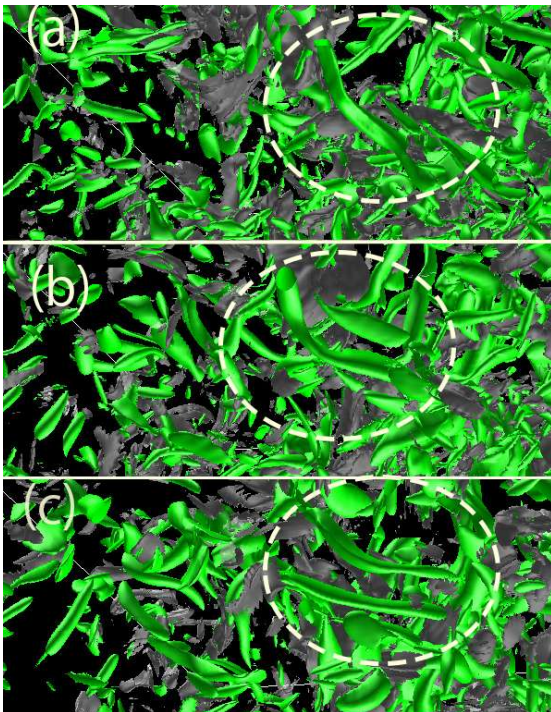


図 2: MHD ダイナモ乱流の渦構造の時間発展。時間発展(a)-(c)の過程で、平行（あるいは反平行）に並ぶ渦対（緑の等値面）が形成されている。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

サブテーマ 1 (シミュレーションコードの GPU スーパーコンピュータ対応) :

GPU 化作業は順調に進んでいる。5. の項で述べたように、一通りの作業は行われ、プラズマ物理の研究についての研究成果を出し始めている。ただし、シミュレーションコードの性質(3次元 FFT の多用)から、GPU のピーク性能に比べて低い性能にとどまっている。このため、可能な限り性能を高めるため、3次元 FFT における通信と計算のオーバーラップだけではなく、他の演算と 3次元 FFT のオーバーラップなどの改良を検討する。また、必要であれば基本的なアルゴリズムの変更も検討する必要があると考えている。

サブテーマ 2 (SGS モデル開発のための基礎データ取得・動的縮約コード開発) :

基礎データ取得およびプラズマ物理研究の観点からは、十分に研究が進展したと考えている。この進展の結果、JHPCN 共同研究で得られた乱流データを解析した研究が、初参加の EPS Plasma Physics Conference で招待講演に選ばれた。今後も、着実に研究を進展させる予定である。

新しい SGS モデル研究の展開として始めた POD による動的縮約コード開発については、所期の目標を達成した。これまで 1次元、2・3次元と着実にステップアップを果たしている。2026 年度は、3次元多成分の snapshot POD を実施し、乱流の構造解析に使用するところまでを達成することで、SGS モデルの構築への目途を明確にすることができるものと考えている。

サブテーマ 3 (同時可視化手法・同時解析手法の開発と高度化)

現在の課題は、可視化コストを削減するために、複雑な乱流現象の中に紛れ込んだ重要イベントを特定し、これを集中的に追跡することである。重要イベントの検知には、その前兆現象を明示的にコード中に与える必要がある。何をもって前兆現象とするかを定める点において、このサブテーマは、単なるコード開発の問題ではなく物理研究の段階に入っている。別のアプローチとして、機械学習などと組み合わせる手法も考えられることから、物理としての前兆現象の研究と並行して検討を続ける予定である。

※7. 研究業績はウェブ入力です