

jh130005-NA03

第一原理プラズマ運動論シミュレーションによるスケール間結合の研究

梅田隆行 (名古屋大学)

概要 地球周辺の宇宙空間であるジオスペースは無衝突プラズマで満たされている。本研究の目的は、近似の無い方程式系を用いた大規模運動論シミュレーションにより、プラズマのマルチスケール物理を理解することである。本研究では、スカラ型超並列計算機上においてコードのチューニング及び性能評価を行い、10,000 以上のコアを用いた場合においても 15% 以上の実効性能を達成した。また、ローカルな速度シア型境界層における KH 不安定性の大規模シミュレーションを行い、KH 渦の回転方向に対するイオンジャイロ運動の回転方向により、KH 渦の非線形発展が異なることを明らかにした。

1. 研究の目的と意義

我々が住む宇宙の 99.99% の以上の体積はプラズマと呼ばれる電離気体で占められている。宇宙空間に存在するプラズマの大部分は密度が非常に小さく無衝突状態にあり、宇宙プラズマ(無衝突プラズマ)を理解することは、我々が住む宇宙の本質的な理解に繋がる。本研究では特に、太陽地球惑星系プラズマの理解を目指している。我々が住む地球周辺の太陽地球惑星系プラズマ環境は、地球磁場と太陽から放出した高速流プラズマである太陽風及び太陽風が運ぶ惑星間空間磁場との相互作用によって複雑な磁気圏構造を形成している。このグローバルな磁気圏構造は、磁気圏内に生じる様々な領域間の境界層でローカルに現れる中間スケールの不安定性(平衡状態の破れ)に影響を受けて変動している。

グローバルな磁気圏構造からローカルな境界層不安定性はブラソフ(無衝突ボルツマン)方程式の 0 次・1 次・2 次のモーメントを取ることによって求められる磁気流体力学(MHD)方程式によって記述される。一方で境界層不安定性では、MHD 方程式で記述できる物理過程と粒子の運動論方程式によって記述できる物理過程が結合しており、これらのマルチスケールの磁気圏変動を宇宙天気と呼んでいる。この宇宙天気を真に理解するためには、全てのスケールをシームレスに扱える運動論方程式(第一原理)によるシミュレーションが本質的である。しかし、磁気圏グローバルシミュレーションはこれまで MHD コードを用いて行われてきた。

「京」が持つ計算リソースにより、MHD 近似の限界を超えた高解像度磁気圏グローバル計算がようやく可能になりつつあり、MHD 近似を超えた次世代グローバルシミュレーション技術として多電磁流体コードの開発が進んでいる。

一方で、第一原理に基づいて個々の荷電粒子の運動を直接解き進める Particle-In-Cell (PIC) 粒子シミュレーション手法も、次々世代のグローバルシミュレーション技術として開発中である。ブラソフコードはこの PIC コードと双璧を成す第一原理手法であり、PIC コードと比べて並列化が容易でありまた数値的なノイズが無いという利点がある一方、実空間 3 次元及び速度空間 3 次元の計 6 次元を扱う方程式であり、コンピュータで解くには膨大なリソースを必要とする。そのため、手法の開発はあまり進んでいない。実際、ここ数年の HPC プロジェクトによって計算機環境と計算手法が飛躍的に向上し、5 次元のテストシミュレーションがようやく実行できるようになった段階である。しかし、6 次元のテストシミュレーションにはエクサスケール、本格的な 6 次元シミュレーションにはゼタスケールのコンピュータが必要であり、本課題では、第一原理(ブラソフ/ボルツマン方程式)に基づく 6 次元シミュレーションの確立に向けた研究を行う。その意義は、磁気圏シミュレーションとしては「次々々」世代の技術にあたる第一原理ブラソフシミュレーション手法を世界に先駆けて確立し、プラズマ科学に基づいた宇宙天気の実現に貢献することにある。

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

(1) 共同研究を実施した拠点名および役割分担

- ・ 深沢圭一郎 (九州大学) 超並列化支援
- ・ 荻野正雄 (名古屋大学) チューニング支援
- ・ 上野悟志 (名古屋大学) データ解析

(2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

(3) 当公募型共同研究ならではの事項など

アーキテクチャが異なる (SPARC, x86-64 等) 計算機を用いることによって、それぞれのアーキテクチャにおけるチューニングの特性や共通のチューニングの方法を見出すことができた。また、異なる機関で同一のシステムが導入されている場合でも、それぞれを比較することによってシステムパラメータの設定ミスを見出すことができた。

3. 研究成果の詳細と当初計画の達成状況

(1) 研究成果の詳細について

① コードの超並列化

本研究グループがこれまでに開発してきた並列版 5 次元ブラソフコードを用いて、日本国内において配備されているスカラ型スーパーコンピュータにおける性能評価を行った。この結果を図 1 及び 2 に示す。なお、FX1/京/FX10/CX400 のすべてのシステムについて、4 スレッドのハイブリッド並列により計測を行った。

九州大学の FX10・12, 288 コア (768 ノード) で実効効率 17.0%、並列効率 98.2%、九州大学の CX400・23, 616 コア (1476 ノード) で実効効率 18.3%、並列効率 84.6% を達成し、中間報告の時と比べて若干性能が向上した。これは、OpenMP D0 ディレクティブの COLLAPSE オプションにより多重 D0 ループのスレッド化を行い、スレッド並列の効率化を図ったためである。

また、本 JHPCN プロジェクトの範囲外ではあるが、理化学研究所の京コンピュータでの計測結果も記載する。49, 152 コア (6144 ノード) までは実効効率 17.6%、並列効率 96% を達成したが、65, 536 コア (8192 ノード) を超えたあたりで MPI_Allreduce の通信時間が極端に増大する現象

が見られた。図 2 のスケーラビリティにおいて、性能がぶれている様子が見られるが、利用ノード数が 96 (ラックのノード数) $\times 2^n$ でない場合に性能が劣化することが分かった。これは、2 次元版の MPI_Allreduce ライブラリのチューニングが十分に行われていない、即ち、システム側の問題であるという回答を富士通エンジニアから得た。尚、FX10 を用いた場合にも同様に性能が劣化している可能性があるが、ノード数が少ないためにほとんど目立たなかった。

② ケルビン-ヘルムホルツ不安定性 (KHI)

シミュレーション空間の下側に止まった低密度領域を配置し、上側には左に移動する高密度領域

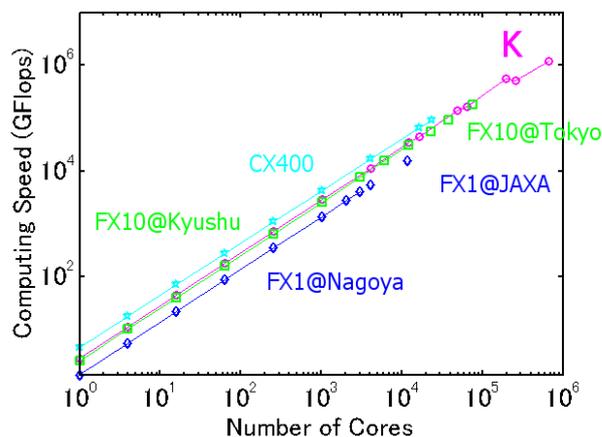


図 1 : コア数に対する計算速度 (GFlops)。

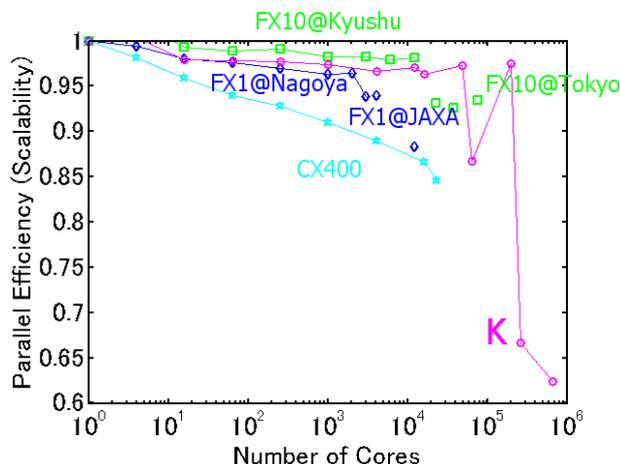


図 2 : コア数に対する実効並列効率 (スケーラビリティ)。「京」で不自然に性能が劣化しているのは 16, 384、65, 536、262, 144 及び、663, 552 コアを用いた場合。

を配置し、KH 渦の発展を超並列ブラソフシミュレーションにより解き進めた。速度シア層で発達する流体スケールの 1 次 KH 渦の回転方向がイオンのジャイロ運動方向と同じ場合 (Run A) 及び、回転の向きが逆向きの場合 (Run B) の 2 通りの計算を行い、発展の違いを比較した。図 3 に示すとおり、Run B に比べ、Run A のほうが、1 次 KH 渦の成長が速いことが分かった。1 次 KH 渦の波長はイオンジャイロ半径に対して 48 倍であり、成長の違いはイオンのジャイロ運動効果ではないと考えられる。一方、1 次 KH 渦の波長はイオン慣性長に対して 12 倍 (約 4π 倍) であり、ホール効果の影響を受けている可能性があるが、成長率に差が出る原因については更なる調査が必要である。

また、イオンジャイロスケールの 2 次的な KHI 及びレイリー-テイラー不安定性 (RTI) は、Run A では強く表れたのに対し、Run B ではそれらの特徴的な非線形構造は確認できなかった。これは、イオンジャイロ運動効果によって 2 次的なシア層の幅が広められ、急速な成長が妨げられたためである。一方で、本研究では電子慣性スケールの 2 次的不安定性の励起が見られたが、Run A と Run B で、発達するタイミングが同じである一方で位置に違いが表れた。これは、イオンジャイロ運動によってそれよりも細かい空間スケールの密度構造が緩和されて渦の成長が妨げられるためであり、2 次渦の回転方向とイオンのジャイロ運動方向が逆向きの位置でのみ成長することが分かった [Umeda et al. PPCF, in press]。

③ 磁気リコネクション

GEM-Reconnection Challenge (磁気リコネクションに対する標準ベンチマーク問題) について、空間格子幅をデバイ長に設定した高解像度シミュレーションを行い、磁力線が繋ぎ変わる磁気拡散領域周辺の詳細な電場構造と電子の速度分布関数の構造を明らかにした。また、磁気拡散量 $|\Delta B|$ で定義される磁気拡散領域と、電子の拡散領域 (磁気エネルギーが電子の運動エネルギーへ変換される領域) の構造がよく一致していることを示した [Zenitani & Umeda, PoP, 2014]。

④ 弱磁化小天体

これまで太陽風と天体との相互作用のシミュレーション研究は主に MHD コードやハイブリッドコードを用いて行われてきた。しかし、イオンジャイロ

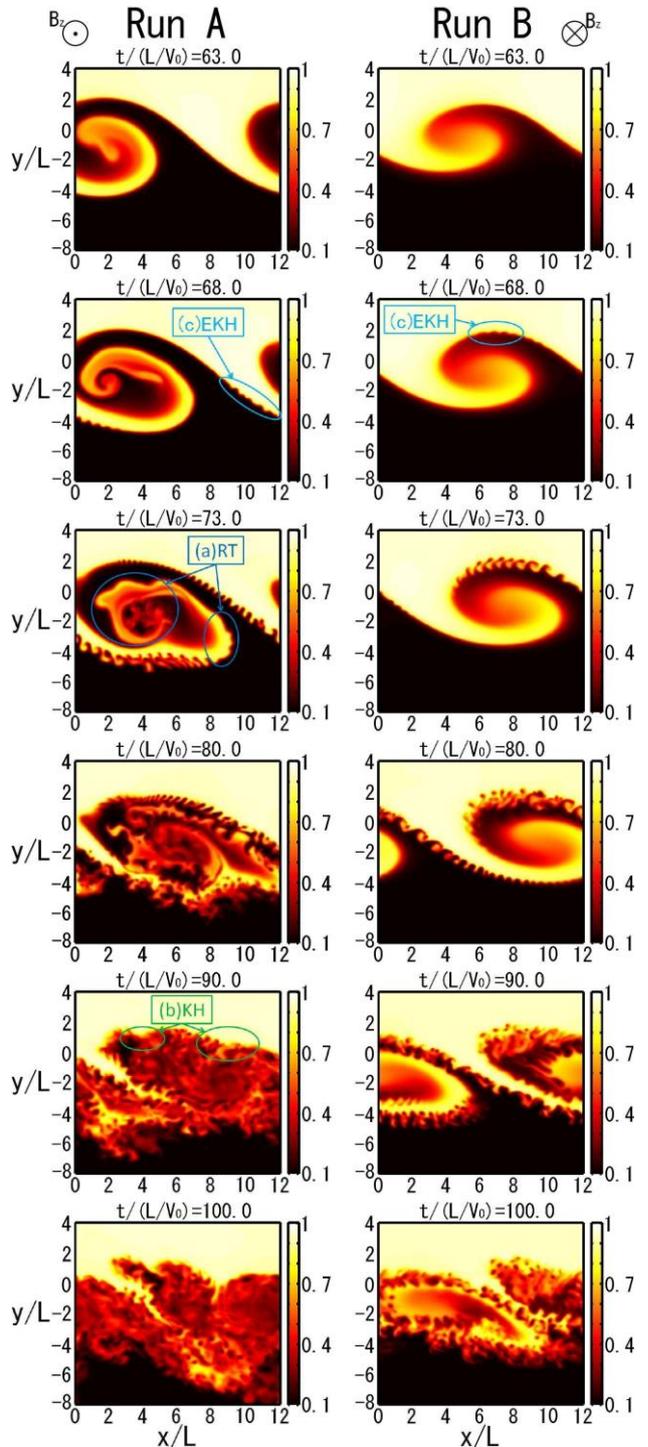


図 3: ケルビン-ヘルムホルツ (KH) 不安定性の時間発展。Run A は KH 渦の回転とイオンジャイロ運動の回転が順方向、Run B は逆方向の場合 [Umeda et al. PPCF, in press]。

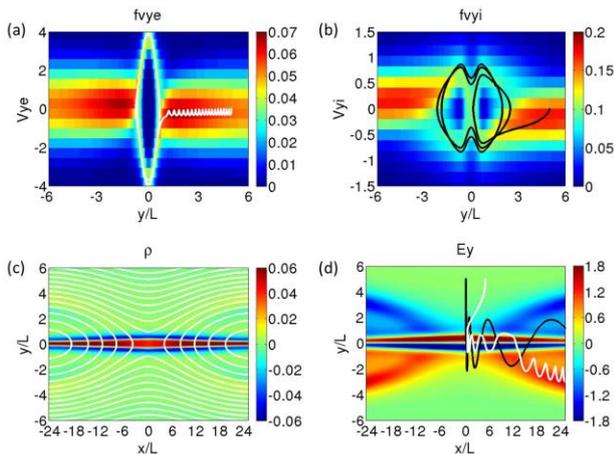


図 4：高解像度 2 次元ブラソフシミュレーションで再現された、磁気拡散領域近傍の (a) 電子速度分布関数、(b) イオン速度分布関数、(c) 電荷密度及び、(d) インフロー方向の電場の構造。パネル (a, b, d) の白線及び黒線はそれぞれ電子及びイオンの軌道を表す。パネル (c) の白線は磁力線を表す。

イロ半径オーダーの大きさを持つ弱磁場小天体の場合には、太陽風プラズマが天体表面へ到達するため、イオンのジャイロ運動と天体の帯電を同時に扱う必要があり、従来の MHD・ハイブリッド・粒子コードで扱うのは困難であった。本研究では、計算格子スケールの数値ノイズを除去できる性質を持つブラソフコードによってこれらを同時に扱い、磁化天体のグローバルブラソフシミュレーションを世界で初めて成功した。図 3 に示すとおり、太陽風プラズマの圧縮によって昼側にバウショックが現われ、夜側にはウエイクと呼ばれる低密度構造が現れる。

本研究では特に、太陽風イオンのウエイク内への侵入過程について着目した解析を行った。その結果、昼側の閉じた磁力線付近に現れる磁気圏境界面で太陽風イオンが反射し、その一部が惑星間空間磁場によって加速され、ジャイロ運動によって夜側ウエイク領域に運ばれることを示した。

(2) 当初計画の達成状況について

① コードの超並列化

SPARC 系チップと x86-64 系チップのチューニング方法の違いの確認や OpenMP DO ディレクティブ

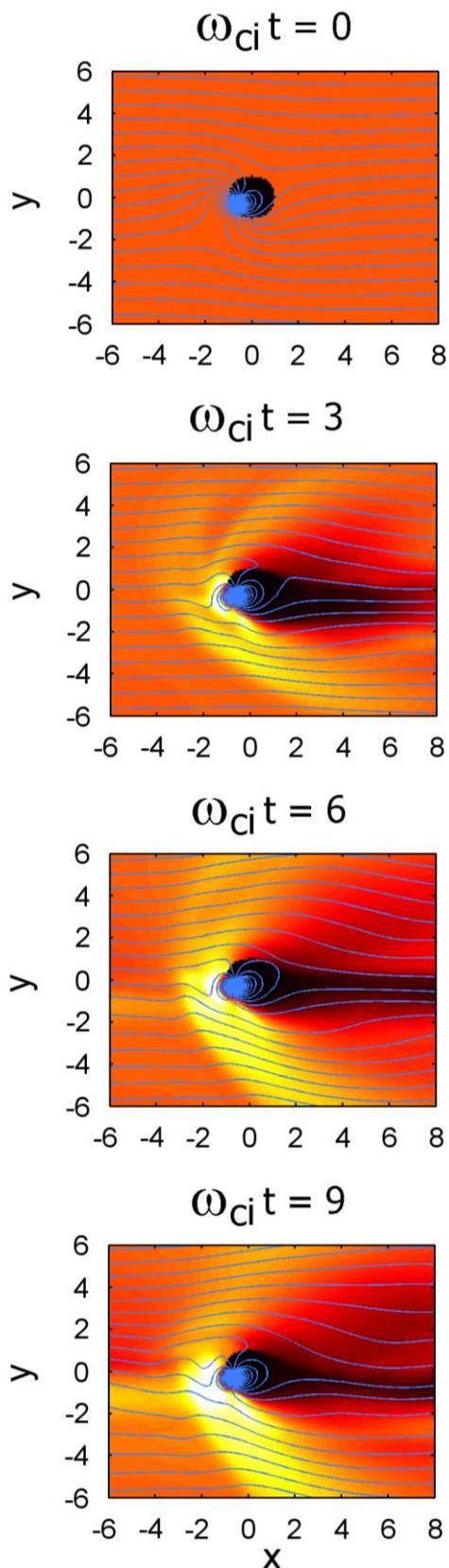


図 5：太陽風と弱磁化小天体との相互作用で得られた、イオン密度の空間プロファイルと磁力線構造 [Umeda & Ito, PSS, 2014]。

の COLLAPSE オプションの追加により、弱いスケールリングにおいて、数千ノードまで高いスケールビリティが得られることを確認し、ベンチマークにおいて予想以上の性能を達成した。

② ケルビン-ヘルムホルツ不安定性 (KHI)

特に 2 次的不安定性に注目した計算を行い、渦度と磁場ベクトルとの内積の極性(渦の回転方向とイオンジャイロ運動の回転方向の違い)により、2 次的不安定性の発展が抑制されることが分かり、当初目標としていた成果を得られることができた。

③ 磁気リコネクション

磁気拡散領域周辺の電子の速度分布関数の詳細な構造を明らかにし、最低限の成果は得られたが、イオンの拡散領域に対して計算領域が小さかったために、当初の目標には届かなかった。

④ 弱磁化小天体

世界で初めて天体のグローバルプラソフシミュレーションに成功し、さらにウェイクに侵入するイオンの軌道も明らかにすることができ、当初目標としていた成果を得られることができた。

4. 今後の展望

① コードの超並列化

特に京コンピュータを用いた場合に 6000 以上のノード数を用いた場合に全体通信の負荷が大きくなることが分かったが、コードの性能限界ではなく、むしろシステム側の問題の可能性が高いため、システム側での 2 次元全体通信用ライブラリのチューニングを期待する。

② ケルビン-ヘルムホルツ不安定性 (KHI)

根本的な問題として、1 次 KHI も渦度と磁場ベクトルとの内積の極性によって成長率が異なるという、新たな課題が発生した。現在は初期速度シア層の半幅とイオン慣性長を同じ長さ設定しており、1 次 KH 渦の波長がイオン慣性長に対して 12 倍(約 4π 倍)になっている。今後、初期速度シア層の半幅をイオン慣性長数倍以上に設定することにより、渦度と磁場ベクトルとの内積の極性による 1 次 KHI の成長率の違いの原因について、切り分ける必要があり、HPCI システム利用課題におい

て、更なる大規模計算を行っていく。

③ 磁気リコネクション

H25 年度に行った計算では、アウトフロー方向の空間長が不十分であったために、イオンの拡散領域周辺の構造が再現できていなかった。今後は、アウトフロー方向の空間長を伸ばした大規模計算を実施し、プラズマ速度分布の詳しい構造を解析していく。また HPCI システム利用課題において、ガイド磁場(電流方向の一様磁場)を取り入れたシミュレーションも行っていく。

④ 弱磁化小天体

H25 年度に行ったシミュレーションでは、空間格子幅をデバイ長の 10 倍に取っており、天体への荷電粒子の帯電が正確に再現できていなかった。しかし、空間格子の解像度をデバイ長に設定した(10 倍×10 倍)高精度計算は京コンピュータでしか実施できない。H26 年度は HPCI 京利用課題に残念ながら不採択であったため、H27 年度も引き続き申請を行う予定である。

5. 研究成果リスト

(1) 学術論文(投稿中のものは「投稿中」と明記)

1. Umeda, T., S. Ueno, and T. K. M. Nakamura, Ion kinetic effects to nonlinear processes of the Kelvin-Helmholtz instability, *Plasma Physics and Controlled Fusion*, in press.
2. Umeda, T., and Y. Ito, Entry of solar-wind ions into the wake of a small body with a magnetic anomaly: A global Vlasov simulation, *Planetary and Space Science*, Vol.93-94, pp.35-40, 2014. .
3. Zenitani, S., and T. Umeda, Some remarks on the diffusion regions in magnetic reconnection, *Physics of Plasmas*, Vol.21, No.3, 034503 (5pp.), 2014.

(2) 国際会議プロシーディングス

1. Umeda, T., and K. Fukazawa, Performance measurement of parallel Vlasov code for space plasma on scalar-type supercomputer systems with large number of cores, In: *AsiaSim 2013, Communications in Computer and Information Science*, Vol.402, edited by G. Tan, G. K. Yeo, S. J.

Turner, and Y. M. Teo, pp.561-569, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013.

2. Umeda, T., Y. Ito, and K. Fukazawa, Global Vlasov simulation on magnetospheres of astronomical objects, *Journal of Physics: Conference Series*, Vol.454, 012005 (9pp.), 2013.

(3) 国際会議発表

1. Umeda, T., and Y. Ito, Entry of solar-wind ions into the wake of a small unmagnetized body: A global Vlasov simulation, *American Geophysical Union (AGU) 2013 Fall Meeting*, San Francisco, USA, December 2013.
1. Ueno, S., T. Umeda, T. K. M. Nakamura, and S. Machida, The ion gyro effect to nonlinear processes of the Kelvin-Helmholtz instability, *American Geophysical Union (AGU) 2013 Fall Meeting*, San Francisco, USA, December 2013.
2. Ueno, S., T. Umeda, T. K. M. Nakamura, and S. Machida, The ion gyro effect to nonlinear processes of the Kelvin-Helmholtz instability, *International CAWSES-II Symposium*, Nagoya, Japan, November 2013.
3. Umeda, T., and K. Fukazawa, Performance measurement of parallel Vlasov code for space plasma on scalar-type supercomputer systems with large number of cores, *13th International Conference on Systems Simulation (AsiaSim 2013)*, Singapore, November 2013.
3. Umeda, T., Vlasov simulation tutorial, *11th International School/Symposium for Space Simulations (ISSS-11)*, Zhongli, Taiwan, July 2013.
4. Umeda, T., Vlasov code handson, *11th International School/Symposium for Space Simulations (ISSS-11)*, Zhongli, Taiwan, July 2013.
5. Ueno, S., T. Umeda, T. K. M. Nakamura, and S. Machida, The effect of the ion gyro motion to the nonlinear process of the Kelvin-Helmholtz instability, *11th International School/Symposium for Space Simulations (ISSS-11)*, Zhongli, Taiwan, July 2013.

(4) 国内会議発表

1. 梅田 隆行, 上野 悟志, 中村 琢磨, 無衝突プラズマ中のケルビン-ヘルムホルツ不安定性におけるイオンジャイロ運動効果, *第 27 回数値流体力学シンポジウム*, 名古屋大学, 2013 年 12 月.
2. 梅田 隆行, 伊藤 陽介, 弱磁化小天体のグローバルブラソフシミュレーション, *第 134 回地球電磁気・地球惑星圏学会*, 高知大学, 2013 年 11 月.
3. 上野 悟志, 梅田 隆行, 中村 琢磨, 町田 忍, ケルビン-ヘルムホルツ不安定性の非線形発展に対するイオンジャイロ運動の効果, *第 134 回地球電磁気・地球惑星圏学会*, 高知大学, 2013 年 11 月.
4. 梅田 隆行, 京コンピュータを用いた宇宙プラズマの第一原理ブラソフシミュレーション, *サイエンティフィック・システム研究会 科学技術計算分科会 2013 年度会合「ペタからエクサへの課題」*, ホテルオークラ神戸, 2013 年 10 月.
5. 梅田 隆行, 深沢 圭一郎, 京、FX10 及び CX400 におけるブラソフコードの性能チューニング, *第 141 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会*, 沖縄産業振興センター, 2013 年 9 月.
6. 梅田 隆行, 伊藤 陽介, 京コンピュータを用いた小天体の高解像度グローバルブラソフシミュレーション, *日本地球惑星科学連合 2013 年大会*, 幕張メッセ, 2013 年 5 月.
7. 上野 悟志, 梅田 隆行, 中村 琢磨, 松本 洋介, 町田 忍, ケルビン-ヘルムホルツ不安定性の非線形発展に対するイオンジャイロ運動の効果, *日本地球惑星科学連合 2013 年大会*, 幕張メッセ, 2013 年 5 月.

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

なし