

10-NA11

超並列宇宙プラズマ粒子シミュレーションの研究

大村 善治 (研究課題責任者・京都大学)

三宅洋平 (京都大学)、小路真史 (京都大学)、臼井英之 (神戸大学)

中島浩 (京都大学)、岩下武史 (京都大学)

概要 Particle-in-Cell (PIC) 方式に基づく宇宙プラズマ粒子シミュレーションの大規模クラスタ型のシステムにおける効率的な並列計算を実現するため、動的負荷分散機構 OhHelp の適用と実用化を推し進める必要がある。本研究課題で、我々は特に次の2課題に重点的に取り組んでいる。一つは OhHelp 適用済の粒子・流体ハイブリッドシミュレーションコードを用いて、太陽風中の特異な局所的磁場構造のメカニズム解明に関する大規模解析を行うことである。もう一つは、人工衛星表面でのプラズマ粒子吸収、光電子放出、そしてそれに起因する衛星帯電を模擬できる衛星プラズマ環境シミュレーター(EMSES)への OhHelp 導入である。これまでに京都大学 T2K オープンスパコン最大64ノード分を用いた大規模ハイブリッドシミュレーション実行を行い、太陽風中の特異な局所的磁場構造の再現に成功したのに加え、そうした磁場構造の原因となる素過程であるミラー不安定性の成長メカニズム解明につながる計算結果を得た。また、静電モデルの衛星プラズマ環境シミュレーターに OhHelp を適用し、その負荷分散機構が有効であることを確認した。現在は電磁モデルの衛星プラズマ環境シミュレーターに対する OhHelp とマルチグリッドポアソンソルバーの適用、および性能評価を急ピッチで進めているところである。

1. 研究の目的と意義

本研究の目的は、Particle-in-Cell (PIC) 方式に基づく宇宙プラズマシミュレーションを対象に、T2K オープンスパコンに代表される大規模クラスタ型のシステムにおける効率的な並列計算を実現することにある。PIC 粒子シミュレーションは、膨大な数のプラズマ代表粒子と空間格子点上の電磁場の相互作用計算がシミュレーションの大部分を占める。流体モデルとは違って、個々のプラズマ粒子はシミュレーション空間の任意の位置に存在しかつ時間的に移動するため、従来の均等型領域分割方式による MPI 並列では、プロセッサ間の負荷バランスが崩れる。このため PIC シミュレーションの効率的な並列計算は、特に大規模な分散メモリ環境では困難であるとされてきた。しかし Nakashima et al. [2009]により提案された PIC シミュレーション用動的負荷分散アルゴリズム OhHelp を宇宙プラズマシミュレーションに適用することにより、分散メモリ並列計算機においても優れた並列計算効率を得られることが実証された。

OhHelp は領域を均等分割し、各々の部分領域

とそれに含まれる粒子を各々のプロセスに割り当てる。この簡明な領域分割法では粒子の空間的な粗密による負荷不均衡が問題となるが、OhHelp では一つのプロセスを除く全てのプロセスが本来の担当(1次担当領域)とは別の部分領域を一つだけ担当し(2次担当領域)、その領域に含まれる粒子の一部分について電磁場との相互作用計算を行うことで、この問題を解決している(図1)。OhHelp は既に周期境界かつ総粒子数が保存されたモデルで

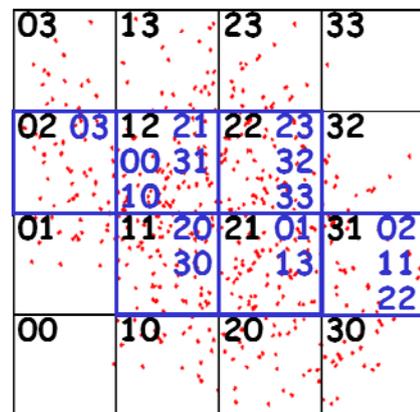


図1: OhHelp アルゴリズムにおける1次担当領域(黒字のプロセス番号)および2次担当領域(青字のプロセス番号)割り当て。

の全粒子および粒子・流体ハイブリッドシミュレーションコードに適用され、その有効性が確認されている。

上記を踏まえつつ本研究で取り組む研究課題の一つは、OhHelpを適用した粒子・流体ハイブリッドシミュレーションコードを用いた、マグネトシース中の局所的磁場減少に関する大規模かつ高解像度な3次元シミュレーションである。これによりミラーモード不安定性の非線形発展との関連を定量的に明らかにし、磁場減少メカニズムを解明することを目的としている。

もう一つの研究課題は、衛星プラズマ環境シミュレーター(EMSES)へのOhHelp導入である。これまでのOhHelp適応コードはいずれも周期境界条件でかつ系内の粒子総数が保存された理想的な状況を扱うものであったが、EMSESはプラズマ空間内に衛星壁に相当する非プラズマ境界を内部に設定し、そこでの粒子吸収や光電子やイオンビームに相当する粒子放出を行うコードである。このような実用コードにOhHelpアルゴリズムを実装することで当該アルゴリズムの有効性を評価しつつ、同時に今後の衛星プラズマ環境解析に向けた強力な数値解析ツールを構築したい。

上述した2課題を遂行することはOhHelp手法の有効性の実証という数値アルゴリズム的観点、および、超大規模モデルによる宇宙プラズマ粒子シミュレーションの実現と最先端研究成果の創出という宇宙科学的観点の双方において大きな意義がある。

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

当課題は超大規模数値計算系応用分野の共同研究として、京都大学 T2K オープンスパコンの64ノード分(1024コア)を用いて進められた。当計算機システムは各ノードに4個のAMD社製クアッドコア Opteron プロセッサを搭載した Fujitsu HX600 クラスタとなっており、当研究課題を遂行するのに適したシステムである。

また、OhHelpは、粒子と場という2つの異なる並列計算の効率性を同時に達成する一般的手法

の一つとして捉えることができ、またそのアルゴリズムは木構造を用いた負荷均衡状況の再帰的なチェックなど、計算機科学的かつ非数値的な発想に基づいている。したがって、非数値的な並列計算アルゴリズムによる並列数値シミュレーションへの貢献ということができ、計算科学と計算機科学の分野間連携の有効性・重要性を示す好例となっている。こうした分野間連携をさらに強固にすることができたという点で、本課題を共同研究として遂行することには大きな意義があったといえる。

3. 研究成果の詳細

3.1. 太陽風中の特異な局所的磁場構造のメカニズム解明に関する3次元大規模ハイブリッドシミュレーション

地球近傍の宇宙空間では、太陽から放出される高速のプラズマ流である太陽風と地球固有の磁場との相互作用により、地球磁気圏と呼ばれる領域が形成されている。太陽風は惑星間空間磁場を伴って吹いているため、地球磁場との間に様々な相互作用を引き起こし、複雑な地球磁気圏構造を形成する。このような地球近傍宇宙空間中に生起する物理現象過程を解明することは、宇宙科学的な視点はもとより人類の宇宙環境利用の観点からも重要である。

近年、太陽風に満たされた惑星間空間から地球磁気圏への遷移領域であるマグネトシースにおいて、非常に特異な磁場構造が複数の科学衛星により観測されている。その磁場構造は、局所的に背景磁場レベルから数十%大きくなる、もしくは小さくなっており、それぞれ magnetic peaks, magnetic dips 等と呼ばれている。我々は3次元大規模ハイブリッドシミュレーションをこの領域に適用することにより、こうした特異な磁場構造の再現に成功した。

本共同研究中で行った最大規模の計算は、 512^3 の格子点をもつ3次元空間中に、およそ80億個の計算粒子を配置したモデルであり、およそ1.5TB

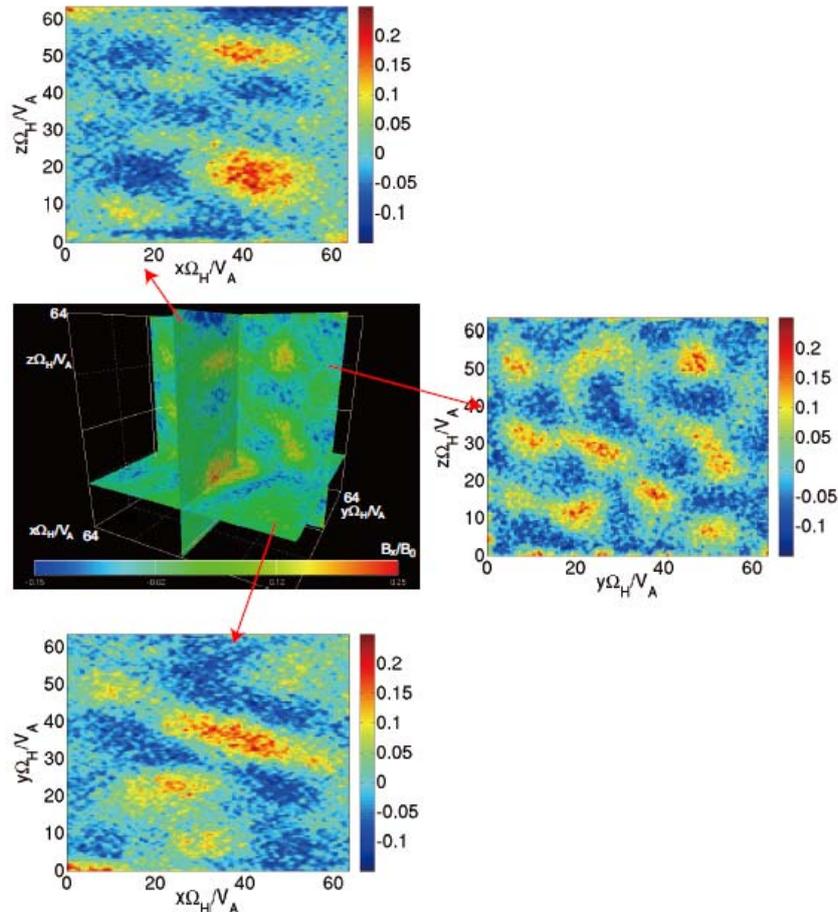


図 2: 3次元モデルにおける、背景磁場並行成分に現れる magnetic peaks 構造。中央のパネルは、各方向の断面を合わせたものを示し、周りのパネルは断面図を示す。

の主記憶容量を必要とする。これは従来の同格子点数での計算に比べて、粒子数を4倍にしたものに相当する。粒子シミュレーションにおいて粒子数の少なさは数値的なノイズの原因となる。特に従来は計算初期段階での数値的な擾乱により、詳細な物理過程の解析が困難であったが、本大規模計算によりそれが可能になると強く期待される。

図 2 は、ハイブリッドシミュレーションにより再現された特異磁場構造の一例である。この例では葉巻状の3次元構造を持った magnetic peaks が確認された。このような構造は、衛星観測により実際のマグネトシースでも観測されている。これとは別に、空間的な非一様性が2次元方向のみに存在する（残り1方向に関しては非一様性の空間スケールが十分に大きいような）状況を想定し、2次元ハイブリッドシミュレーションを行ったと

ころイオンベータと呼ばれるプラズマのパラメータの値に依存して、magnetic dips もしくは magnetic peaks が形成されることが確認された。この結果も、観測による統計的な解析結果と一致する。

さらに、我々はこれらの特異な磁場構造が、プロトン速度分布の非等方的が原因となって起こるミラー不安定性と呼ばれる現象の卓越によって形成されることを明らかにした。以上の結果からマグネトシースにおいて、空間的に2次元的な(背景磁場に対して垂直な一方向が、ミラーモード磁場構造の波長に比べて無視できるような)構造となっていて、かつ低ベータなイオンパラメータをもつ領域でのみ、magnetic dips が形成されることがわかった。

太陽風中の特異な局所的磁場構造のメカニズム

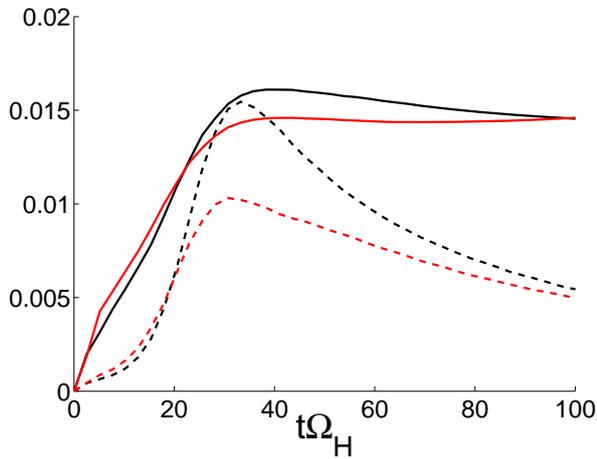


図3: LモードEMIC波(点線)およびミラーモード磁場構造(実線)のエネルギーの時間発展。黒線はプロトンのみのモデル、赤線はヘリウムを追加したモデルの結果を示す。

解明には、衛星で観測されているような構造をシミュレーションで再現するのみにとどまらず、その原因となる素過程を詳細に解析していく必要がある。マグネトシース領域でみられるプロトンの温度異方性は、今回の磁場構造の直接的な要因となっているミラー不安定性だけではなく、Lモード電磁イオンサイクロトロン(EMIC)不安定性と呼ばれる現象も引き起こす。ここで注目すべき事は、線形理論解析においてはLモードEMIC不安定性の成長率が、ミラー不安定性のものよりも大きくなるという事実である。これは観測および前出のシミュレーション結果と矛盾する点であり、この理由を明らかにするためさらに詳細な解析が必要である。そこで我々は、2次元と3次元モデルの比較、もしくはパラメータサーベイをハイブリッドシミュレーションにより行った。

一連のシミュレーション解析によって、次にまとめるような結果を得た。

- A) 前述した理論と観測の矛盾に関しては、線形理論解析では取り扱いが困難な空間3次元性を考慮することにより解決可能であることが、2次元と3次元シミュレーションの比較により明らかになった。背景磁場に対して斜め方向に励起されるミラー不安定性は、3次元空

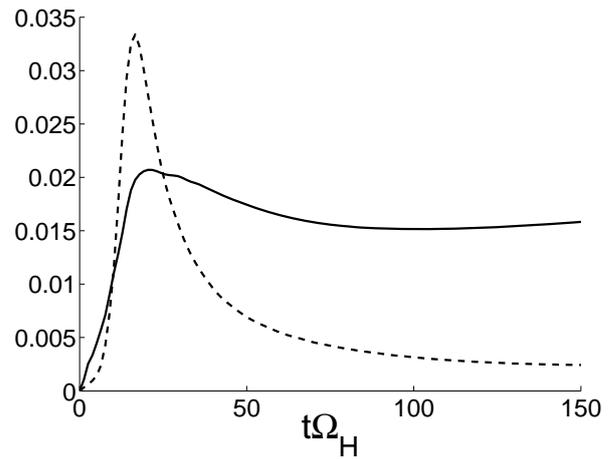


図4: 温度異方性が高くLモードEMIC不安定性とミラー不安定性の線形成長率の差が大きい場合のLモードEMIC波(点線)およびミラーモード磁場構造(実線)のエネルギー時間発展。

間において、2次元モデルと比較して、より多くのモードが励起される。一方、LモードEMIC不安定性は、背景磁場に対してほぼ平行な方向にLモードEMIC波を励起するため、空間次元の影響をほとんど受けない。従って、より多くのプロトンの温度異方性の自由エネルギーがミラー不安定性の成長に用いられることが判明した。図3に、3次元モデルにおけるそれぞれの波動のエネルギーの時間発展のシミュレーション結果を黒線で示す。シミュレーションの途中からLモードEMIC波はエネルギーを失い始め、最終的にはミラーモード磁場構造のエネルギーが支配的となる様子が示されている。

- B) プロトンイオン以外に太陽風中に数%程度含まれる重イオン(He++)の存在が、よりミラーモードを卓越させる方向に働くことがわかった。3次元空間中に、ヘリウムをプロトンの4%分仮定した結果を、図3中に赤線で示す。この場合、LモードEMIC波は非線形段階で形成する静電ポテンシャルによって、重イオン加熱を引き起こす。従って、LモードEMIC波はプロトンのみの場合以上に強烈に減衰される。一方で、ミラー不安定性は重イオンの

影響をあまり受けないことから、より有利となつてミラーモード磁場構造のみが残る事がわかった。

- C) 異なる種々の初期プラズマパラメータに関して複数のシミュレーションを行い、ミラー不安定性とLモードEMIC不安定性との競合過程のパラメータ依存性を明らかにした。特にLモードEMIC不安定性とミラー不安定性の線形成長率の差が大きくなるようなパラメータ設定では、一時的にLモードEMIC波が卓越するが、最終的にはLモードEMIC波は減衰してしまう(図4)。これはLモードEMIC波が作る非線形静電ポテンシャルがイオン(具体的にはプロトン)粒子を加熱することで波のエネルギーを失うことに起因することがわかった。

全体として今回の研究成果は、高度な並列計算技術によって初めて可能になる大規模かつ高精細なシミュレーションを複数回行うことにより、従来では謎とされていた物理過程の解明に貢献した実例といえることができる。

3.2. 衛星プラズマ環境シミュレータ(EMSES)へのOhHelp導入

EMSESへのOhHelp導入にあたり、考慮すべき事項は2つある。一つは計算空間内に対する粒子注入あるいは空間内からの粒子除去に伴う、系内の粒子総数の変化である。もう一つは衛星帯電を正確に再現するために必要となるポアソン方程式求解の効率的な分散メモリ並列方式の実装である。

OhHelpは系内の粒子総数の保存/非保存に関わらず、各ノードが担当する粒子数を常にモニターしながら最適な1次/2次担当領域を割り当てる機構となっている。従って上記のうち前者については、既存のOhHelpアルゴリズムの枠組みの中で対応することが可能である。我々は、粒子注入・除去の機能を保持している衛星プラズマ環境解析用コードにOhHelpアルゴリズムを適用し、実際にOhHelpの負荷分散機構が有効であること

を確認した。

後者に関しては、現在は3次元分割された計算領域を一旦スラブ状の1次元分割に変換し、分割方向を適時交換しながらスラブ平面内で高速フーリエ変換を行うことで、ポアソン求解を実現しており、その計算過程で全対全通信が必須である。現状ではシミュレーション全体に対するポアソン求解に要する時間の割合が小さいためこの方式の問題点は顕在化していないが、将来並列プロセス数が増大した際に並列効率の阻害要因となることが予想される。そこで新たにマルチグリッド法を利用した領域分割ポアソン求解の検討・実装を開始した。

上記2点の詳細については、次節でその詳細を紹介する。

4. これまでの進捗状況と今後の展望

4.1. 3次元大規模ハイブリッドシミュレーション研究の進捗および展望

3.1節に述べたように、これまでに空間格子点数 512^3 (2次元モデルでは 512^2)に対して、およそ80億もしくは20億の粒子を入れた大規模ハイブリッドシミュレーションを、京都大学T2Kオープンスパコン64ノード分を用いて行うことで、宇宙科学分野の進展に貢献可能な貴重な研究成果を得ることができた。これらの研究成果は、*Journal of Geophysical Research*等の論文誌から随時公表されていく見込みである。

今回のシミュレーションでは、磁場のみならずイオン粒子密度にも空間的な不均一性が現れる。もし適切な負荷分散機構を実装していなければ、粒子が最も集中した場合の小領域内粒子数を事前に予想し、それが十分に収まる粒子バッファをすべての計算ノードで準備する必要があり、今回用いた最大粒子数(80億個)での計算は困難になる。従って、本研究成果は計算資源のみならず、OhHelpのような高度な負荷分散機構の導入により、初めて得ることが可能になったといえる。

また上記の計算すべてが京都大学T2Kオープ

ンスパコンの 64 ノード分を必須とするわけではないが、OhHelp の導入により 1 シミュレーション実行に要する計算時間を飛躍的に低減させることができたため、結果的にパラメータサーベイのような多数回シミュレーション実行が可能になったと評価することができる。

以上の事を踏まえると、本研究課題に関しては当初の研究目的を着実に達成しつつあると評価できる。一方、64 ノードを用いた計算では、その計算規模の大きさから従来行ってきたものに比べ、ストレージ上に出力する計算結果データをかなり限定することが必要であった。今後は 1 シミュレーションから得られる知見を最大化するために、計算中の物理過程の発展状況に応じたデータ出力量の動的な調整等、データ出力法にさらなる工夫が必要であると考えられる。

これまでに行ってきた研究をさらに推し進め実際のマグネトシースを模擬するためには、シミュレーションモデルをさらに発展させることで非一様な背景磁場の影響を解析の中に取り入れることが必要である。OhHelp 及び T2K オープンスパコン 64 ノード分の利用により可能となる計算規模に非一様磁場を導入すれば、空間中のローカルな位置で定量的に解析しうる磁場構造を十分に得られると考えられる。残りの共同研究期間や今後の研究において、現実のマグネトシース環境での L モード EMIC 不安定性及びミラー不安定性の競合関係や、ミラーモードの非線形磁場の空間構造を定量的に解析していく予定である。

4.2. 衛星プラズマ環境シミュレータ (EMSES) への OhHelp 導入の進捗状況

EMSES は衛星物体の存在を考慮しつつ、電場・磁場両方の変動を自己矛盾なく解き進めるコードであるが、その機能限定版として静電場の変動のみを解き進める衛星プラズマ環境解析コードも保持している。これまでに第 1 段階として後者のコードに対して OhHelp アルゴリズムを適用し、動作確認および性能評価を行った。

この機能限定版コードでは、場の更新に対して

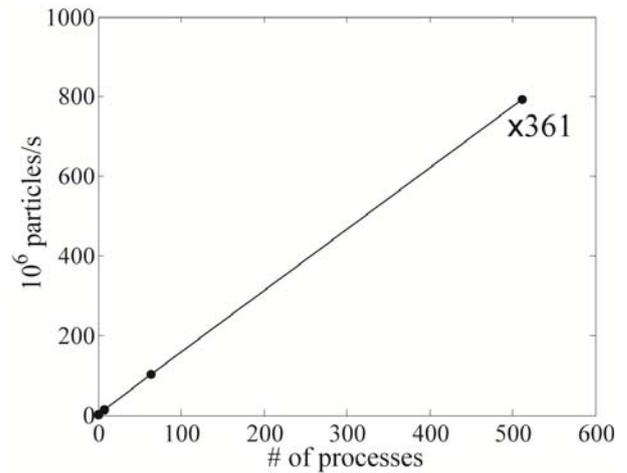


図 5: OhHelp 適用後の静電モデル衛星プラズマ環境解析コードの性能。

はポアソン方程式を解き、さらにそのソース項としてプラズマ粒子の分布から求まる電荷密度を用いる。また現段階ではポアソンソルバーとして、高速フーリエ変換による実装を用いた。このコードに OhHelp を適用し、導体物体帯電のテストシミュレーションを行ったところ、その帯電値および周辺のプラズマ密度分布は OhHelp 適用前のコードによる結果と一致した。これにより、OhHelp 適用コードが正しく動作していることが確認された。

次にプロセス数に比例して全体の領域サイズと粒子数を増加させる Weak Scaling の手法により、OhHelp 適用コードの性能評価を行った。シミュレーションのモデルとしては全体領域の中央部分に立方体導体を置き、その表面において電子放出を行うものを仮定した。また全体領域外に飛び出したプラズマ粒子はシミュレーション空間からいなくなったものとし、その減少分を補うために全体領域の端から一様なプラズマ空間を仮定した粒子注入を行った。プロセスあたりの領域サイズを 32^3 の立方体に固定し、全体領域が立方体形状となるよう $P=8^p$ ($p=0-3$) の MPI プロセス数に対して測定を行った。また性能は総粒子が大きく変化しない定常状態の段階で測定し、その間の平均粒子数は 1 プロセスあたりおよそ 8.4×10^6 個であった。

図 5 に上記条件で測定した OhHelp 適用衛星プ

ラズマ環境解析コードの性能を示す。なおここでは性能の指標として、1秒間の間に移動計算を行った粒子数を用いている。逐次性能は 2.2 Mparticle/s であり、図5より 512 プロセスでは、逐次計算の 361 倍の性能を有していることが確認できる。またこのときの並列効率は $361/512=70\%$ である。これは、従前に評価を行った総粒子数一定の OhHelp 適用全粒子コードにおける並列効率と比較しても妥当な値であり、これにより衛星プラズマ環境解析コードにおいても OhHelp が有効であることが確認された。

本性能評価で行ったシミュレーションでは、導体周辺に粒子が密な領域が形成されており、OhHelp による負荷均衡機構が有効となっている。一方、粒子が集中する領域は常に一定であるため、OhHelp による 1 次・2 次担当領域割当は測定中で不変であった。このことから今回の性能評価では、OhHelp の重要な機能の 1 つである動的な担当領域割当変更の効果を加味しておらず、OhHelp そのものの性能評価としては完全とはいえない。しかし、全体領域の中央付近に粒子が密もしくは疎な領域ができるような状況は、しばしば実際の衛星プラズマ環境解析の対象となるため、今回の性能評価はそうした实际的に起こりうる解析条件において OhHelp の負荷分散機構の有効性を確認したものと評価することができる。

以上の評価により、粒子注入・除去の機能を保持している衛星プラズマ環境解析用コードへの OhHelp の実装と有効性評価の第 1 段階を完了したといえる。ただし本研究課題の当初目標は電磁場変動を含めた完全版 EMSES での OhHelp 性能評価であるため、現段階ではその目標を完全に達成したとはいえない。現時点で完全版 EMSES への OhHelp の実装自体はほぼ完了しつつあるので、残りの大規模演算実施期間にその性能評価を集中的に行いたい。

上記の性能評価と並行して、マルチグリッド法を利用した領域分割ポアソン求解の検討・実装を京都大学学術情報メディアセンターの岩下准教授および中島教授との共同研究により進めている。

マルチグリッド法では、対象とする問題の離散化格子に対してそれよりも粗い格子を複数用意し、誤差を複数の格子上で効率的に除去することを行う。特に本研究では、マルチグリッド法の手順の一つであるスムージングにおいて、高い収束性とキャッシュデータの再利用性を両立できるブロック化赤-黒順序付け法に基づくガウス=ザイデルスムーザを用いることにした。

これまでに、領域分割方式による MPI 並列に対応したマルチグリッドポアソンソルバーのコーディングを完了し、正しく動作していることを確認した。今後、OhHelp が実装された EMSES コードへの実装を行う必要があるが、開発されたポアソンソルバーはプラズマシミュレーションの中で扱いやすいようにサブルーチン化された形でコーディングされているので、この作業は見通し良く進めることができると予想される。マルチグリッドポアソンソルバーも含めた OhHelp 適用 EMSES コードの性能評価を早急に進めたいと考える。

4.3. 研究課題全体の進捗状況の自己評価

ハイブリッドシミュレーションを用いた物理シミュレーション研究に関しては、OhHelp 化コードを使った具体的な研究成果も出てきていることから、90%の達成度と評価できる。EMSES への OhHelp 実装に関しては、電磁場変動モデルのシミュレーターへの OhHelp 実装・性能評価が完全に完了していないことから 70%程度の達成度と評価し、課題全体としては 80%程度の達成度と評価する。年度内に 4 回設定された大規模演算実施期間のうち 1 回を残している状況でもあるので、残りの共同研究期間でこの達成度を 100%に近づけていきたいと考える。

5. 研究成果リスト

(1) 学術論文

1. Shoji, M., and Y. Omura, Simulation of the Electromagnetic Ion Cyclotron Triggered

Emissions in the Earth's Inner Magnetosphere, *submitted to J. Geophys. Res.* (投稿中)

2. Shoji, M., Y. Omura, and L. C. Lee, Three-dimensional Nonlinear Mirror-mode Structures in the Earth's Magnetosheath, *to be submitted to J. Geophys. Res.* (投稿予定)

(2) 国際会議発表

1. Shoji, M., Y. Omura, and L. C. Lee, Nonlinear Mirror Mode Structures in the magnetosheath: Two- and Three-dimensional Hybrid Simulations, AGU Fall meeting, Dec. 2010.
2. Shoji, M., and Y. Omura, Electromagnetic Ion Cyclotron Triggered Emissions in a Dipole Geometry: Hybrid Simulation Results, AP-RASC, Toyama, Sep. 2010.
3. Miyake, Y., H. Usui, and H. Kojima, Particle-in-cell Analysis of a Space-based Electric Field Instrument Surrounded by a Photoelectron Cloud, AP-RASC, Toyama, Sep., 2010.
4. Shoji, M., and Y. Omura, Mirror-mode Structures in the Magnetosheath: 3D Hybrid Results, Asia Oceania Geosciences Society Annual Meeting, India, Aug. 2010 (*Invited*).
5. Shoji, M., and Y. Omura, Hybrid simulations of electromagnetic ion cyclotron triggered emissions in a dipole geometry, COSPAR, Germany, Jul. 2010.

(3) 国内会議発表

1. Shoji, M., Y. Omura, and L. C. Lee, Nonlinear Mirror Mode Structures in the magnetosheath: Two- and Three-dimensional Hybrid Simulations, SGEPS 秋季大会、沖縄、2010.
2. 三宅洋平、中島浩、秋山隼太、小路真史、大

村善治、動的負荷分散技法 OhHelp による全粒子およびハイブリッドプラズマシミュレーションの並列化、日本地球惑星科学連合大会、2010.

3. Shoji, M., Y. Omura, and L. C. Lee, Nonlinear Mirror Mode Structures in the Three-dimensional Model, 日本地球惑星科学連合大会、千葉、2010.
4. Shoji, M., and Y. Omura, Hybrid simulations of electromagnetic ion cyclotron chorus emissions in a dipole geometry, 日本地球惑星科学連合大会、千葉、2010.