

10-NA21

GPGPU 流体シミュレーションを活用した宇宙物理学フロンティアの前進

村主崇行（京都大学次世代研究者育成センター）

本研究では、最近勃興してきた GPGPU クラスタ型コンピュータを、いち早く宇宙物理学的流体シミュレーションに応用することを目的としていた。我々が開発した GPGPU 向けの 3 次元圧縮性流体力学コードを利用し、分子雲形成領域における、2 相水素ガスの乱流状態の数値シミュレーションと解析を行った。またその流体コードの開発・運用経験を生かして、あらたに GPGPU クラスタ型コンピュータ向けの 3 次元磁気流体コードを開発してきた。東京工業大学 TSUBAME グリッドクラスタにおいて、120 枚の GPU 型演算器を並列的に利用し、この種のシミュレーションの解像度としては世界記録となる 1440^3 のシミュレーションを行い、その解析、および可視化を行ってきた。乱流の理解にとって高い解像度を達成できたことは意義深い。また、その経験をふまえ、磁気流体コードについても、現在着実に開発を進めている。

1. 研究の目的と意義

(1) 研究目的

本研究の目的は、ふたつである。一つ目は、すでに開発してある GPGPU クラスタ型コンピュータ向けの 3 次元圧縮性流体力学コードを利用し、大解像度数値計算により先進的な宇宙物理学の課題を研究することである。もう一つは、その流体コードの開発・運用経験を生かして、あらたに GPGPU クラスタ型コンピュータ向けの 3 次元磁気流体コードを開発することである。流体力学コードを用いる研究のテーマとしては、次を考えている。

【1】 分子雲形成領域における、2 相水素ガスの乱流状態の数値シミュレーションと解析。

【2】 原始惑星系円盤においてみられる低密度ダストのガス抵抗則の数値実験。

【3】 原始惑星系円盤における超音速微惑星まわりの衝撃波構造によるコンドリュール加熱の研究。

また、磁気流体力学コードを開発し、それを用いて次の研究を行う。

【4】 原始惑星系円盤における磁気回転不安定性 (Magnetorotational Instability, MRI) の、全円盤を表現したグローバルシミュレーション。

(2) 研究意義

宇宙では、日常生活とはかけ離れたガス/プラズマ環境が実現しており、地上では再現が困難な物理の実験場となっている。かくして天文学・宇宙物理学は物理学・科学と相互作用しながら、科学の進歩に貢献し、また人々の宇宙にたいする好奇心を満たすのに役立っている。ところが天文学的観測で得られる情報は多くの場合、人類の歴史よりはるかに長い時間現象を、地球という 1 つの方向から、ある瞬間に観測したスナップショットのみであるため、天体の時間発展を数値的にシミュレートし、その経過・結論を観測と照らし合わせる手法が重要である。

以上のような、シミュレーション宇宙部理学的手法の立場において、我々は、今日までの計算機の進歩により実行可能域にはいったテーマとして、【1】～【4】までを選定し、本研究で挑戦する課題の候補とした。以下に、本研究で実際に扱った【1】と【4】のテーマの意義について、まず宇宙物理学的側面から説明する。

【1】のテーマは星間物質の研究に貢献する。銀河において恒星・惑星系が生まれる場である星間物質で観測されている乱流は圧縮性、非等方的

であり、加えて輻射平衡を考慮した水素原子ガスの状態方程式は理想気体とは大きく異なり、100倍程度密度の違う2相が共存する乱流状態である(Field et al, 1969)。にもかかわらず観測される乱流の速度スペクトルは、一様、非圧縮、等方を仮定するKolmogorovスペクトル(速度場の冪指数 $\alpha_v = 11/3$)とよく一致する。ただしKolmogorovからの有意なずれ($\alpha_v = 3.87 \pm 0.11$)を観測した報告もある(Chepurnov et al. 2010)。この乱流の性質を研究するため、これまでに1000³規模の解像度のシミュレーションが行われているが、計算機の能力のため、追跡できる時間が限られていた。GPUの高い演算能力を活用することで、同じ解像度のまま、長時間にわたって乱流をシミュレートできるようになり、平衡状態のより詳しい情報を引き出せるようになる。

【4】のテーマは惑星形成理論にとって大変重要な意義を持つ。ここで扱う原始惑星系円盤とは、宇宙で生まれたばかりの恒星の周りに形成される、おもに水素分子ガスと氷や岩石の固体微粒子からなる円盤状の天体である。原始惑星系円盤の中ではさまざまな電磁気的プロセスがはたらいっていることが最近分かってきている(図1)。磁気回転不安定性(MRI)はその中核をなす物理素過程であり、さまざまな回転する天体ではたらき、初期の非常に弱い磁場、天体の活動に主要な影響を及ぼすまで成長させる役割をはたす。MRIの存在や線形成長段階はよく理解されている。しかし、肝心の、MRIの非線形段階、十分成長しきった段階の性質については、その天体の全体を考慮にいたしたシミュレーションを行わないかぎり理解できない。このMRIのグローバルシミュレーションは膨大な解像度と演算能力が必要なため、いままで手をつけられていないグランドチャレンジの1つである。過去にも、原始惑星系円盤やほかの天体のグローバルシミュレーションと称する研究は存在するが、磁場を無視しているか、角運動量輸送メカニズムの中核であるMRIを分解できていないため、それらのシミュレーションの結果が現実的で

あるとの保証はなく、物理学的価値はとぼしい。もしMRIを正しく扱ったグローバルシミュレーションを実現すれば、世界トップレベルの研究成果として、宇宙物理学界にインパクトを与えるだろう。

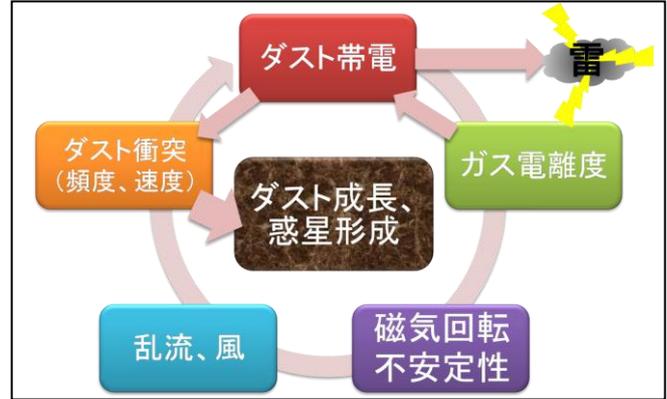


図1 原始惑星系円盤で相互作用する諸電磁気過程

磁気流体力学は電離気体、プラズマの挙動を記述する基本方程式のひとつであり、宇宙物理学にくわえて太陽、地球磁気圏、核融合炉の研究などにも使われている。GPGPUを使うことで、いままでない高解像度・高速の時期流体力学シミュレーションが可能になれば、これらの学問をも活性化し、太陽フレアの予測、人工衛星の防御などを通じて人類の生活にも直接の利益をもたらさう。

また、本研究は計算機科学の観点からも、次のような意義がある。シングルコアの演算速度がムーアの法則に従って上昇を続け、既存のプログラム、コンピュータが何もせずとも速くなっていった「フリーランチ」の時代は終わった。計算科学を行うものは並列計算を考慮することを余儀なくされた。このことは一般的には悪いニュースとされている。だが本当にそうか？たとえばGPUには、演算器あたりのレジスタの多さや、それが可能にする高速スレッド切り替えによるレイテンシ隠蔽などの特長がある。並列計算を前提にすれば、並列ハードウェアが、同じflops性能の直列ハードウェアより優れている面があるのである。このような、現在・将来のスーパーコンピュータの性質を理解し、性能を十分にひきだしてゆくために

は、プログラミングパラダイムの段階から考えなおしてゆく必要があるのかもしれない。そのためには、本研究で挑戦する流体・磁気流体シミュレーションのように、さまざまな数値科学の課題を新世代の超大規模計算機の上で実現するという経験を、まずは積んでいく必要がある。

参考文献

- Field G. B., Goldsmith D. W., Habing H. J., 1969, *Astrophysical Journal Letters*, 155, L149+
- Chepurinov A., Lazarian A., 2010, *Astrophysical Journal*, 710, 853

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大学名

本研究は、京都大学 次世代研究者育成センター（白眉センター）特定助教の村主崇行、および長崎大学 先端計算研究センター超並列部門長准教授の濱田剛が共同して行った。

(2) 共同研究分野

本研究の、平成22年度 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 公募型共同研究としての共同研究分野は超大規模数値計算系応用分野であった。また、村主崇行の専門分野は宇宙物理学、濱田剛の専門分野は計算機科学であった。

(3) 当公募型共同研究ならではの事項など

学際型共同研究として異分野の多くの研究者と共同してコード開発・研究に当たれたことはたいへん有意義な経験であった。特性の異なる複数の計算機を研究の段階に応じ使い分けられたことも大変便利であった。また東京工業大学のみなさんや、東京大学の JHPCN 担当者様方も親切で、技術的サポートや事務的サポートを的確かつ迅速にい

ただくことができた。

3. 研究成果の詳細

本研究では、京都大学で村主が中心となって開発・構築した GPU クラスタ TenGU (Tenmon GPU Cluster)、長崎大学先端計算研究センターで、本研究の共同研究者である濱田剛（准教授）が中心となって開発している GPU クラスタ DEGIMA (DEstination of GPU Intensive Machines)、および学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 公募型共同研究を通じて利用可能となった東京工業大学の TSUBAME (Tokyo-tech Supercomputer and UBiquitously Accessible Mass-storage Environment) 1.2 グリッドクラスタを使用し、GPU を多数使用する流体コードの開発・それを利用したシミュレーション宇宙物理学的研究、また磁気流体コードの開発を行った。

開発した流体コードは MPI GPU Full-Godunov 2nd order MUSCL 3-dimensional uniform mesh Navier-Stokes equations solver である。MPI 経由で多数の GPU を並列に利用して計算を行うことができる。これに加え、故障率の高いマシンや、キューの実行時間に制限があるマシンでも長時間の計算が行えるよう、シミュレーションの内部状態を適宜出力してそこから復帰できるチェックポイント機能や、ムービー作成のための不可逆圧縮データ出力機能も実装した。

この流体コードのベンチマークを主に DEGIMA で行い、576 ノードまでの強いスケールリングおよび弱いスケールリングを測定した。

本研究のシミュレーションではこれまでにない大解像度を達成したことから、その出力データ量も膨大なものとなり、その解析および可視化のためのあらたなツール群を開発したことを述べておきたい。例えば1つのスナップショットのサイズは約 60GB であり、典型的なパソコンのメモリに収まらない。そこでデータの2次元断面程度のメモリしか消費せず、かつディスクアクセスを最小限

学際大

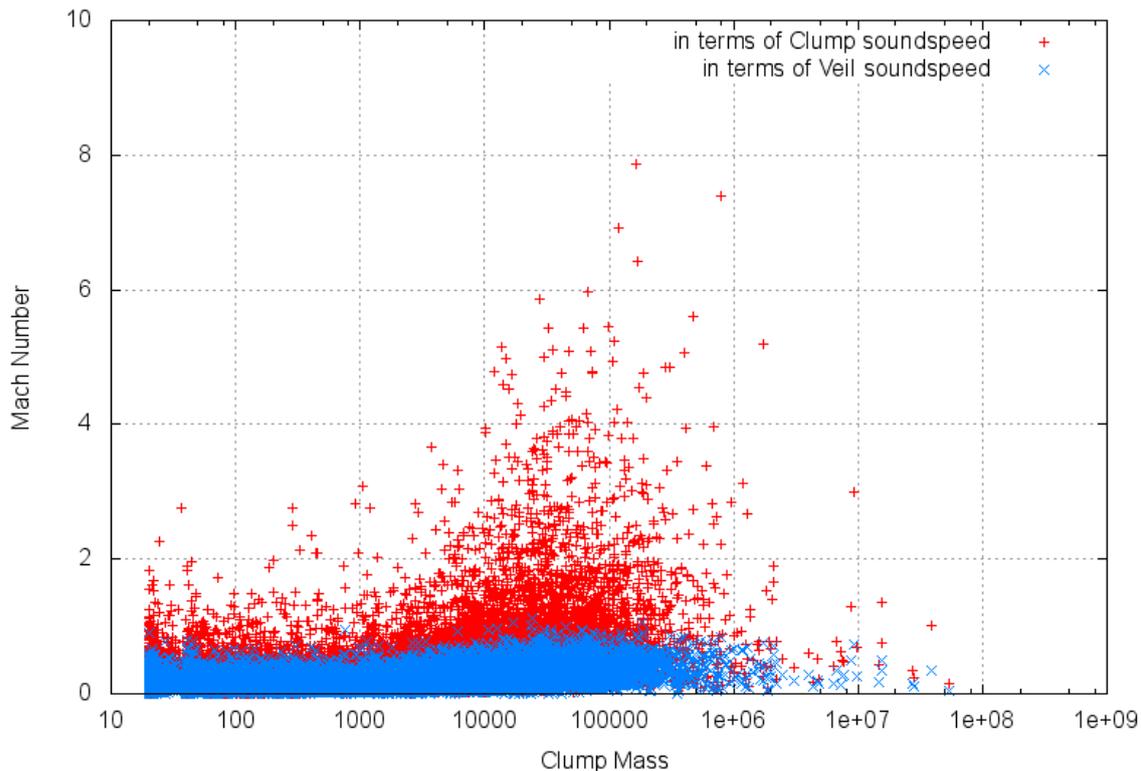


図 2 塊検出解析の結果。検出された塊の質量を横軸に、検出された塊(Clump)の、外部(Veil)に対する速度をプロットしたもの。Clump の速度は、Clump 自身の音速を基準にして測ると超音速運動になっているが、Veil の音速を基準にすればあくまで亜音速運動(Mach 数<1)であることがわかった。

に抑えたまま、スペクトル解析や塊検出、可視化などを行うアルゴリズムが必要であった。

例えば、塊検出というデータ解析では、ある密度の閾値を決め、それより密度の大きいセルの連結成分をすべて検出し、おのおの高密度塊(Clump)とその周辺を取り巻くガス(Veil)について密度、音速、相対速度などの物理量を求め、その統計解析を行う必要がある。連結成分の検出には、素朴に考えると 3 次元データへのランダムアクセスが必要に思える。我々は以上の解析を、(データの 2 次元断面) × (定数倍) しかメモリに持たずに、全データを 2 回シーケンシャルアクセスだけで行うアルゴリズムを開発した。これにより、パソコンでも、解析対象データをディスクに置いたまま、実用上問題のない時間で解析ができるようになった。

この解析の結果、Cold Neutral Medium (CNM: 冷たい高密度の星間ガス塊) の速度は確かに CNM

の音速より速い。しかし、CNM は周囲を不安定相の気体に取り巻かれている。その音速よりは CNM の速度は遅い、という状況が分かった。塊の運動は本質的にこの不安定相の気体内部での亜音速乱流なので、塊の挙動は非圧縮 Kolmogorov 乱流で説明できるのではないかと示唆を得た。

この部分を検証するために、Tsubame で行った 1440³ の解像度のシミュレーションのスペクトル解析を行った。これに際しても、膨大な 3 次元データのフーリエ解析を直接行う困難を避けるため、次のようなアルゴリズムを開発した。つまりまずディスクに保存されたスナップショットを 1 回シーケンシャルアクセスし、その間に各方向への 2 次元投影を作成する。次にその投影された速度を 2 次元フーリエ変換する。最後に 2 次元のスペクトルから、天文観測で用いられている手法を模して 3 次元スペクトルを再構築する。このアルゴリズムを採用することで、スペクトル解析の所要時

間を短縮できた。また、地球という一点から、天を2次元球面として観測せざるを得ないという制限のある天文観測と比較・検証する上でも有意義なデータを得た。

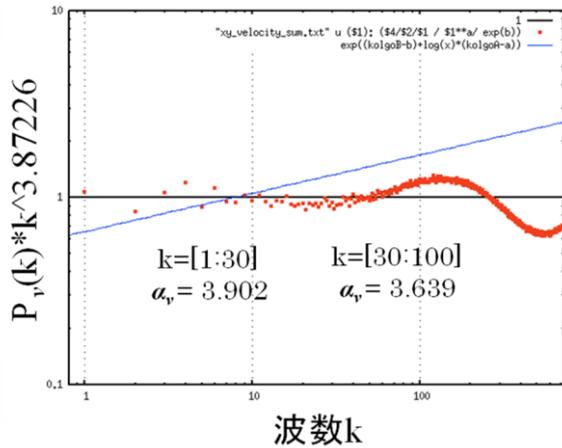


図3 スペクトル解析結果のフィット

解析の結果、シミュレートされた乱流の冪は、超音速乱流領域、Kolmogorov 様領域、数値的散逸領域の3重構造を示した(図3 スペクトル解析結果のフィット)。全体としての冪は Chepurnov et. al. 2010 の速度・密度スペクトル ($\alpha_v = 3.87 \pm 0.11$) ($\alpha_\epsilon = 3.0 \pm 0.1$) と誤差の範囲内で一致した。超音速領域は比較的 softer, Kolmogorov 様領域は比較的 harder である。これらのことから、Chepurnov et. al. のような非 Kolmogorov 的観測は超音速領域と Kolmogorov 領域の重ね合わせとして説明できるかもしれない、という示唆を得た。

4. これまでの進捗状況と今後の展望

流体コードについて

まず、平成21年度 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点公募型共同研究(試行)にひきつづき、平成22年度4月より、流体コードの並列化や、詳細なベンチマーク測定、チューニングを行った。これら開発には主として長崎大学先端計算研究センターのGPUクラスタ DEGIMA を使用した。また約 1280^3 の解像度で、星間水素ガスの熱的不安定性のシミュレーションを行った。

DEGIMA では約 $800 \times$ NVIDIA GT200 GPU 型演算器が利用可能であり、うち576個は InfiniBand で連結されていた。単精度ピーク演算性能は 514.9TFlop/s であり、最大 $1769'4720$ スレッドを同時実行可能であった。また総ビデオメモリは約 460GB、総ビデオメモリ帯域幅は 64.454TB/s であった。DEGIMA では、上記約 1280^3 の解像度のシミュレーションにおいて 40.91Tflops の実効性能を達成した。

また平成22年度7月ごろより、東京工業大学の青木尊之教授のアドバイスも得て、チェックポイント機能や不可逆圧縮データの出力機能を実装した。これにより、占有型キューを複数回利用しての長時間計算や、不可逆圧縮されたデータを高頻度で出力してのムービー作成が可能になった。

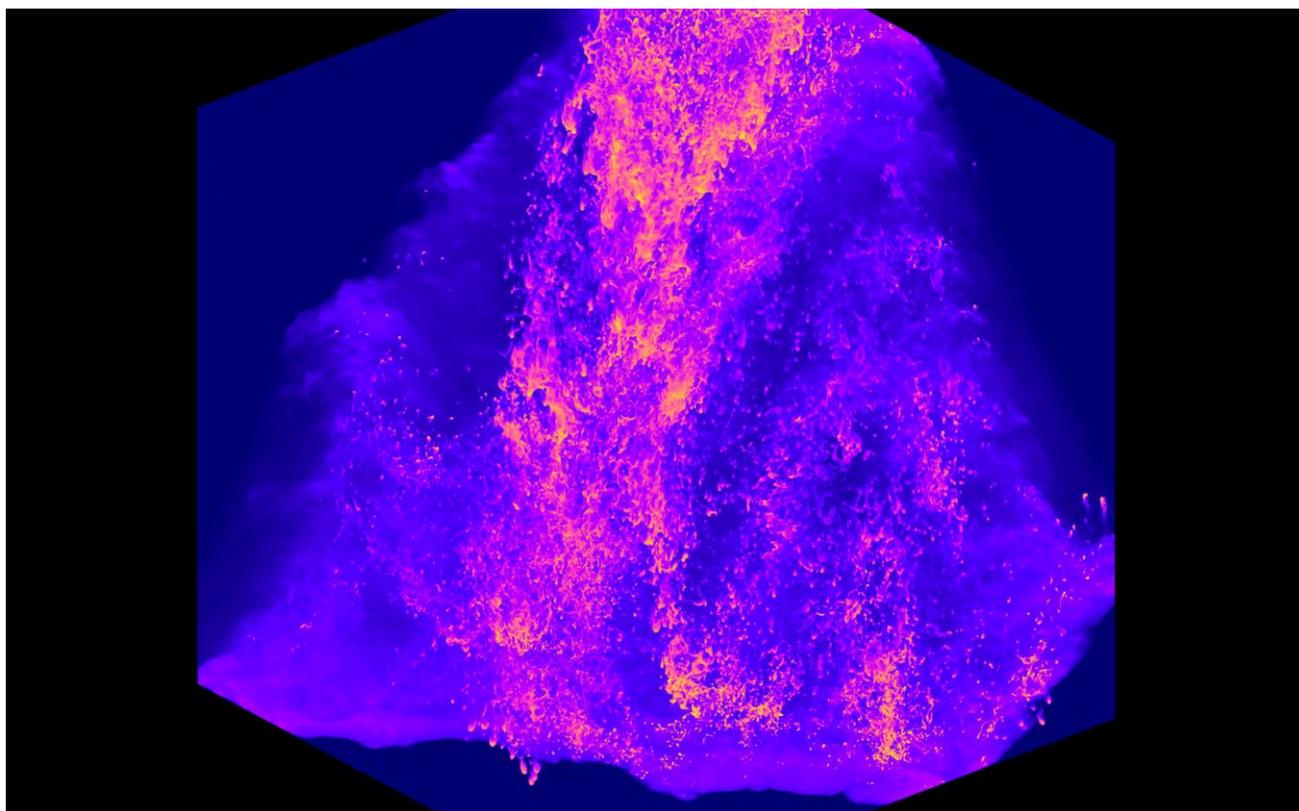


図 4 東工大の GPU スパコン TSUBAME を利用して行った 1440^3 のシミュレーションの可視化。

そこで、おもに東工大の GPU スパコン TSUBAME を使って長時間計算を進めた。期間は 7/6-7/9、7/20-7/23、8/20-8/24 の 3 回、のべ 10 日であった。利用した hpc1tes2 キューでは、120 個の NVIDIA GT200 GPU 型演算器が利用可能であり、単精度ピーク演算性能は 124.2TFlop/s、また最大 $122'880$ スレッドを同時実行可能であった。総ビデオメモリは 480GB、ビデオメモリ帯域幅は合計 1.224TB/s であった。また利用負担金は 13 万 2 千円であった。

これにより 1440^3 の解像度で、約 8 sound crossing time の計算ができ、乱流スペクトルを解析する上で十分な量のデータが得られた。また約 200 枚の可視化用のデータを得た。また実効演算性能は 11.5Tflops であった。

このデータの可視化にあたっては、ハードディスクに置いたまま、1 回あるいは数回のシーケンシャルアクセスのみで、流体速度、密度、化学状態、温度など、さまざまな物理量を可視化できる

プログラムを開発した。これにより、熱不安定性を引き起こしている衝撃波面が激しくゆらぎ、強い噴出流が間欠的に突きあげる乱流のありさまが明らかとなった(図 4 東工大の GPU スパコン TSUBAME を利用して行った 1440^3 のシミュレーションの可視化。)

また、大規模データの可視化を得意とする京都大学小山田研と共同研究により、40 面タイルドディスプレイを利用した大画面・高解像度の可視化を行った(図 5)。さらに TSUBAME で実行した計算を、青木尊之教授と協力してムービーにし、TSUBAME の広報活動等に活用していただいた。

分子雲形成領域における、2 相水素ガスの乱流状態の数値シミュレーションについては、その後も現在に至るまで、物理条件を変えた計算や、追加のデータ解析解析を行ったりしながら研究を進めている。

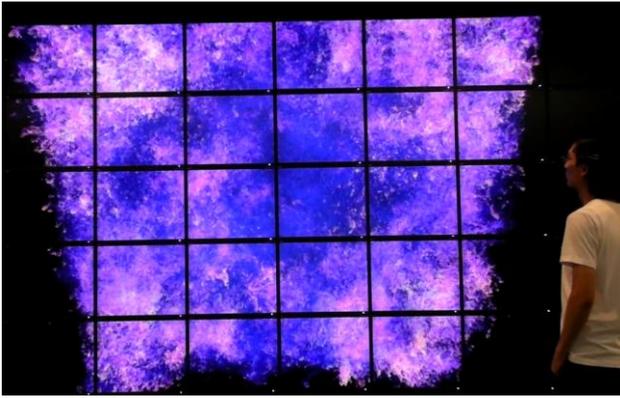


図 5 京都大学小山田研と共同で行った、40面ディスプレイによる可視化。

磁気流体コードについて

以上の流体コードの開発・運用経験をふまえ、8月ごろより磁気流体コードを開発開始した。最初のバージョンは空間一次精度のコードで、磁気流体力学のリーマン・ソルバーとして HLLD を採用した (Miyoshi & Kusano 2005)。

ところで流体シミュレーションのアルゴリズムを作るにあたっては流体の保存量を変数にとり保存量のフラックスを計算することで、物理的に意味を持つ保存量がきちんと保存することを保障する手法が主流である。しかし、この手法では、流体の温度などを決める内部エネルギーが、全エネルギーからその他のエネルギーをすべて引いた値となり、打ち切り誤差の範囲内でゆらいでしまう。このため内部エネルギーが負という非物理的な状態を作り出してしまい、シミュレーションがクラッシュすることがままある。これは、単精度計算を行う場合に問題となる可能性が高まる。また磁気流体力学系では、磁場のエネルギーが支配的になる領域があらわれることも多いため、この場合は浮動小数点の機械表現の精度によらずこの問題が生じる。

そこで、犬塚修一郎教授(名古屋大学)らのグループとともに、内部エネルギー、速度などの原始変数をシミュレーション変数に採用しつつ、全エネルギー、運動量、磁束などの保存則を形式上厳密に達成する internal-energy conserved MHD ス

キームを研究してきた。このスキームは大きな数どうしの減算から生じる桁落ち誤差を避けることができ、前述の問題を軽減するのに役立つことがわかってきた。

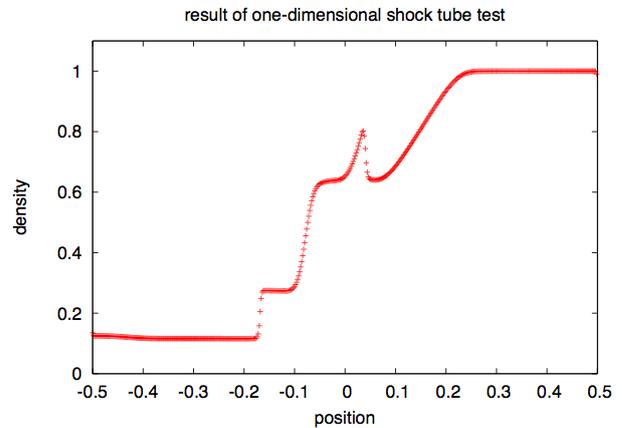


図 6 我々の磁気流体コードの衝撃波管テストの結果。位置と密度の関係をプロットしてある。このテスト結果は Miyoshi & Kusano(2005)と整合的であった。

いっぽう多数 GPU 向けの流体コードを開発、運用した経験から、素朴なコードを書いているのは行数があまりに多くなってしまっていて大変である一方、C++/CUDA による抽象化をしようとしても、C++の抽象化能力の枠内では、限界があることもわかってきた。そこで、あくまでも本研究の補助的研究としての所要時間にとどめつつ、本研究で必要となるようなコード(とくに、流体コードの開発からまなんだもの)を簡潔に生成できるもの、という拘束条件のもとで、簡易的なコード・プリプロセス・メカニズム cprb を設計した。cprb は Haskell で書かれており、ruby 風の文法で、C++のコードをメタプログラミングできる。目的と意義のところでも掲げられている、並列プログラミングのための新しい手法を模索する上での一歩となったと考えている。

現在は磁気流体コードの開発を続けるかたわら、開発中のコードを用いてテストを行っており、流体力学や磁気流体力学の MHD 衝撃波も解けることを確認している(図 6)。

さて原始惑星系円盤において、Resistive MHDの素過程のみから放電を引き起こすメカニズムとして Inutsuka-Sano (2005) が提案されていた。この論文においては、当メカニズムは one-zone モデルで説明されていたが、最近 Okuzumi により、3次元的に不安定を引き起こしうることが予言された。ぜひこれをシミュレートしてみたい。そのためには Resistive 磁気流体力学シミュレーションが必要で、ゆくゆくはダストとか化学反応も考慮していく必要がある。3次元、高解像度シミュレーションが必要なので、ぜひこれからも自作のコードで GPU 並列計算機の性能を引き出して行きたい。

総じて、【1】「分子雲形成領域における、2相水素ガスの乱流状態の数値シミュレーションと解析」のテーマでは、このテーマに於いては世界一となる解像度の3次元・一様シミュレーションを行うことができた。先例の少ない中での、マルチGPU向け流体プログラムの実装に当たって、また解析・可視化にあたっては未知の困難にゆきあたったものの、1つ1つこれらを解決し、課題申し込み時に予期していた以上の成果をあげることができた。なおデータ解析を中心として研究を続け、複数の論文をまとめ、世に貢献したい。

【4】「原始惑星系円盤における磁気回転不安定性 (Magnetorotational Instability, MRI) の、全円盤を表現したグローバルシミュレーション」については、【1】に時間をさいたこともあって、課題申し込み時に予期していた開発スケジュールよりは遅れているが、【1】の成果を踏み台とし、着実に研究を進めてゆきたい。

参考文献

- Miyoshi & Kusano, Journal of Computational Physics 208 (2005) 315–344
- Inutsuka & Sano, The Astrophysical Journal, Volume 628, Issue 2, pp. L155-L158 (2005)

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)

“High-Resolution Simulations of Interstellar Medium Dynamics: by Compressive Fluid Solver for GPU Cluster” Muranushi & Hamada, 投稿中

- (2) 国際会議プロシーディングス
- (3) 国際会議発表

“Hydrodynamic and Magnetohydrodynamic Simulations on GPU Supercomputers,” The fourth East Asian Numerical Astrophysics Meeting, Nov. 2-5 2010, Taipei, Taiwan

- (4) 国内会議発表

“GPU クラスタ型計算機による星間物質の熱的不安定性の高解像度シミュレーション,” 日本天文学会 2010 年秋季年会、9月22日～24日 於 金沢大学

- (5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)