

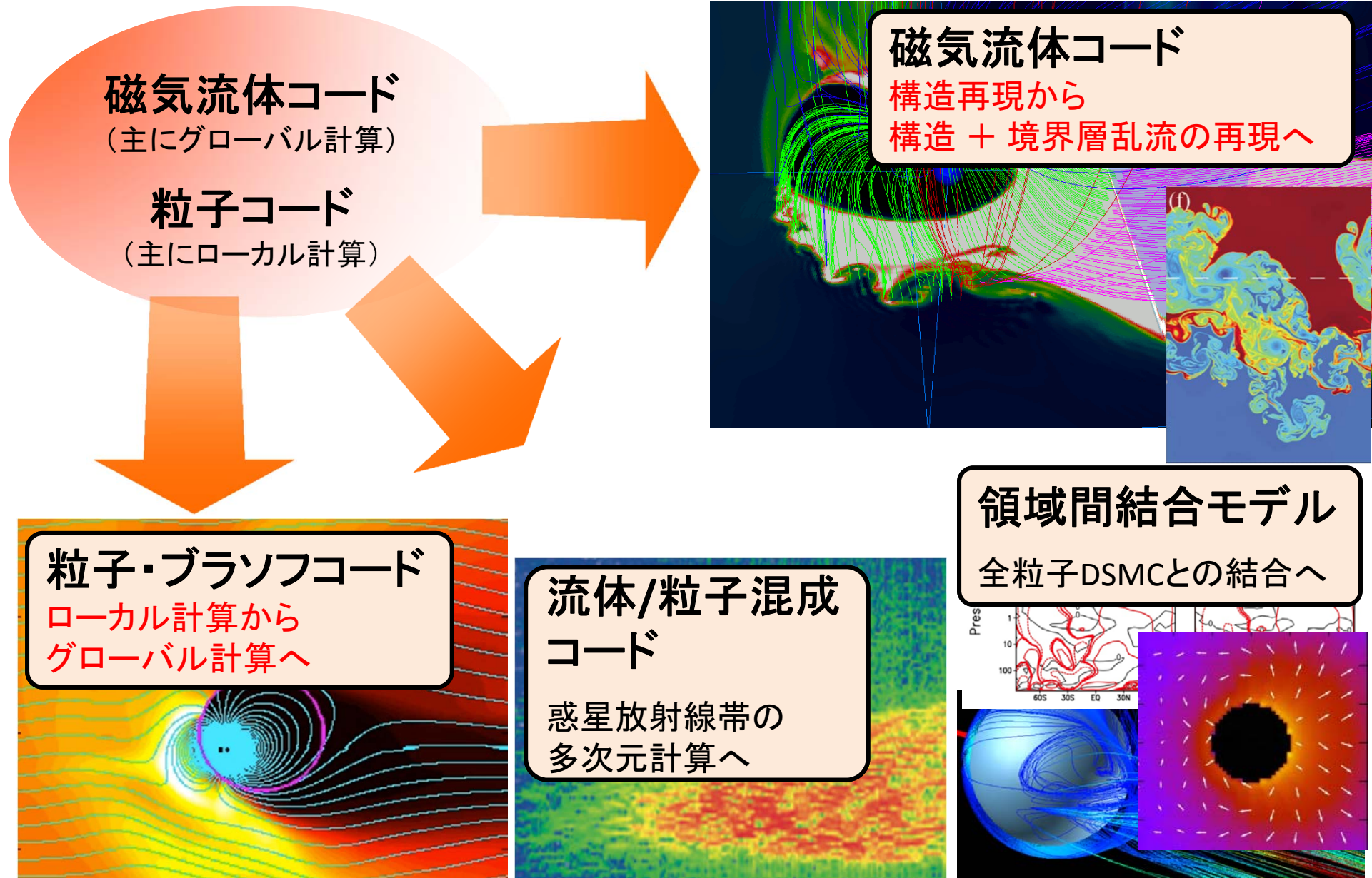
惑星圏研究における計算科学と 計算機

寺田直樹(東北大)、
梅田隆行(名大STEL)

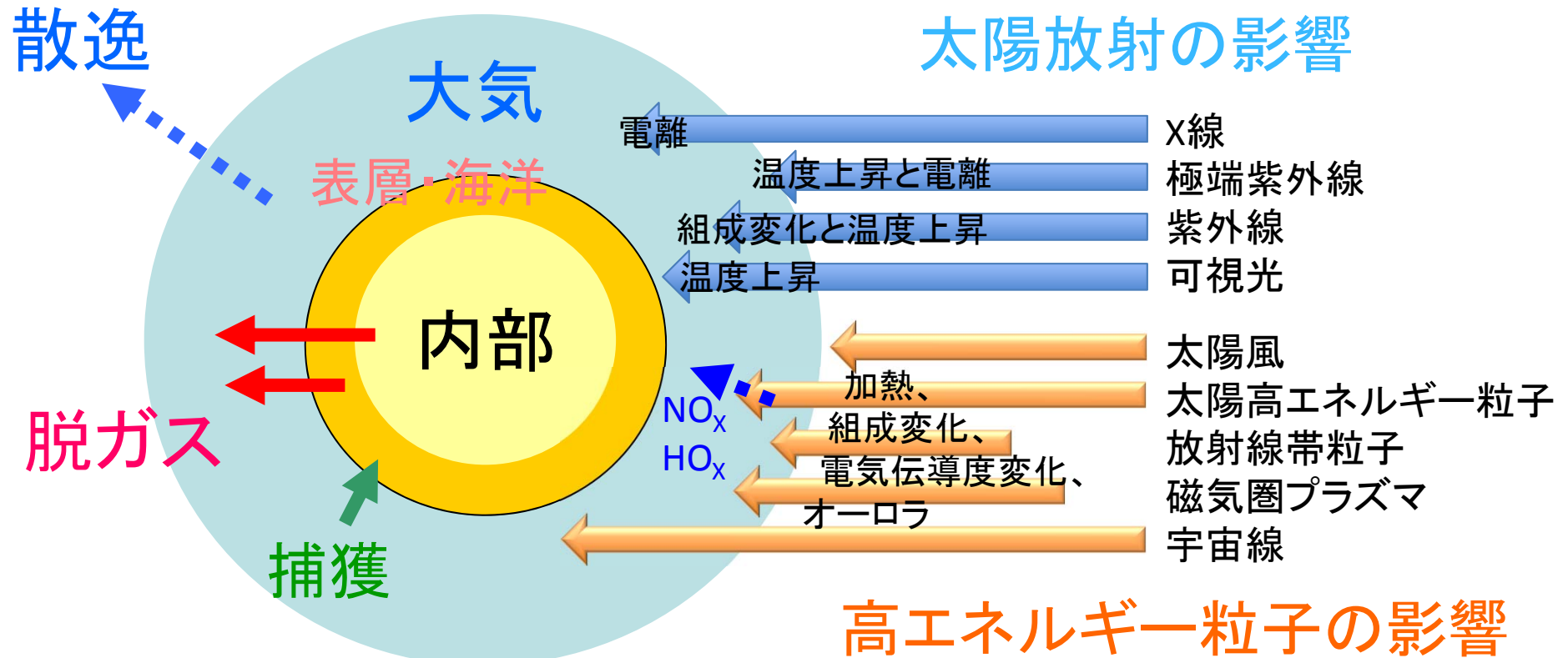
Outline

- 惑星圏シミュレーションの現状と課題
 1. 厚い大気を保有する惑星
 2. 厚い大気を保有しない天体

エクサに向けた惑星圏シミュレーションの課題

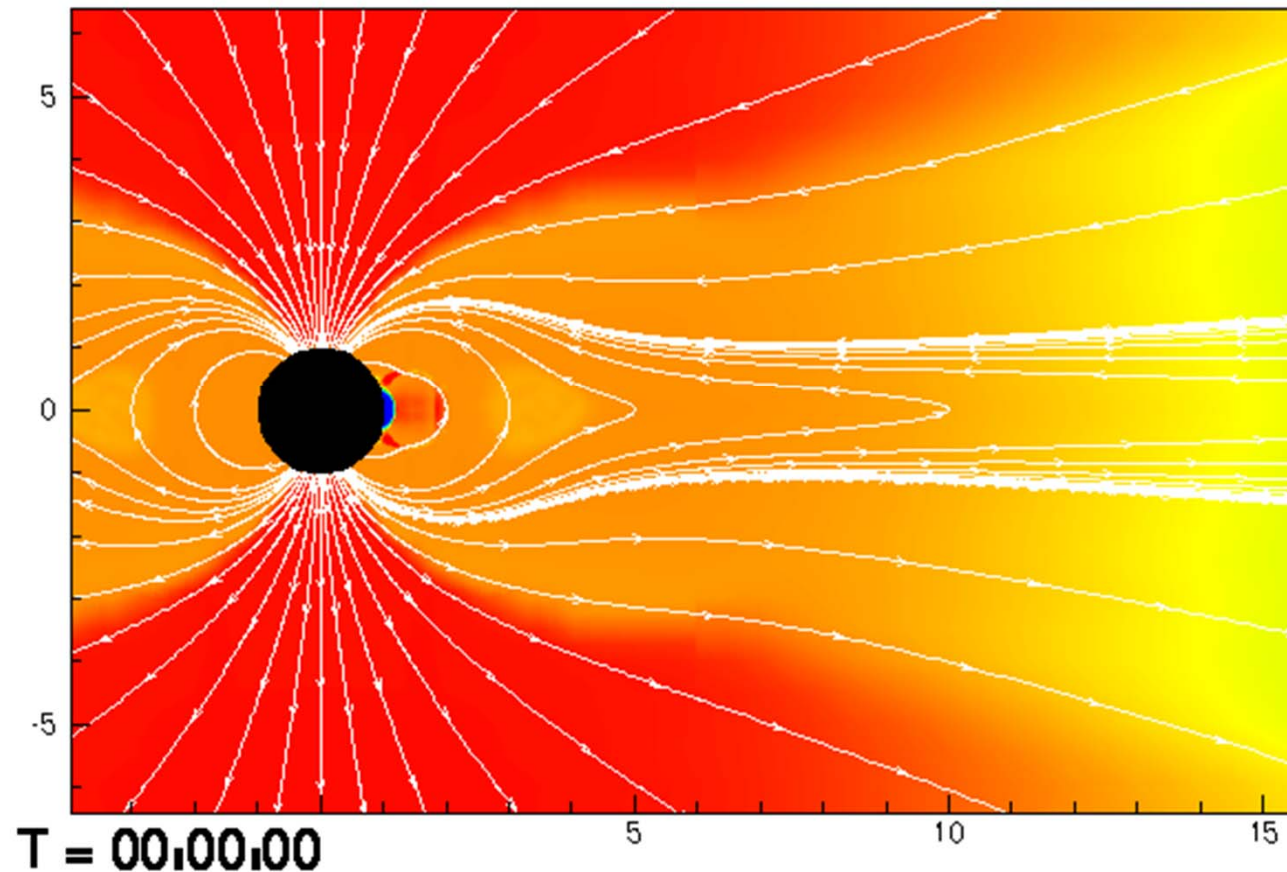


科学目的：大気を保有する惑星



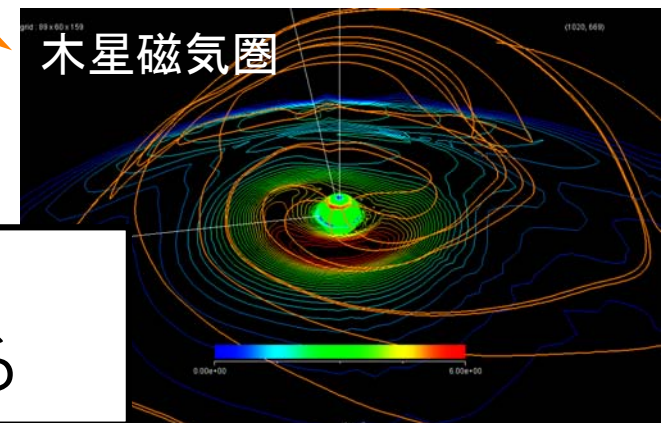
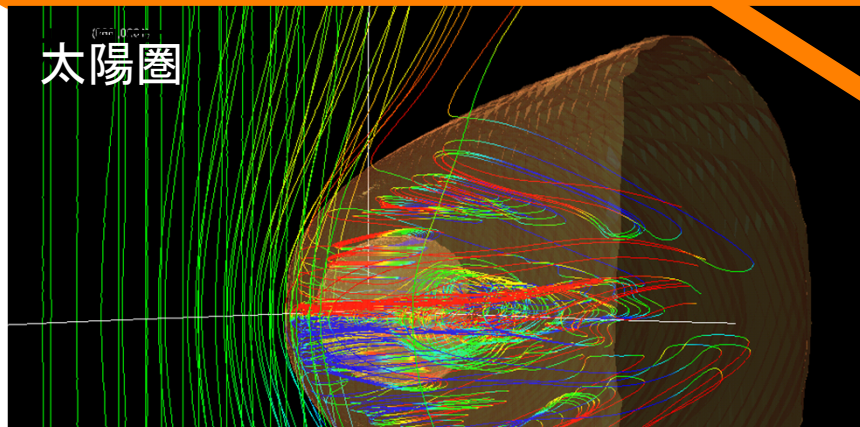
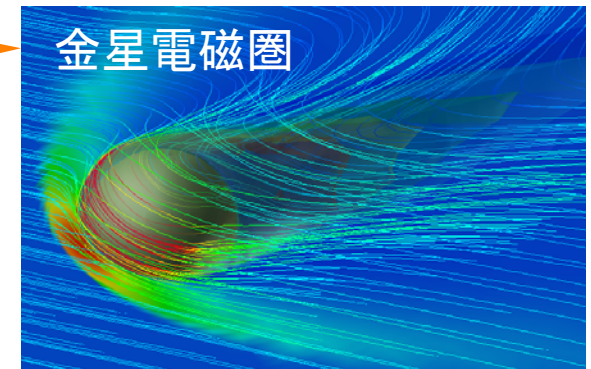
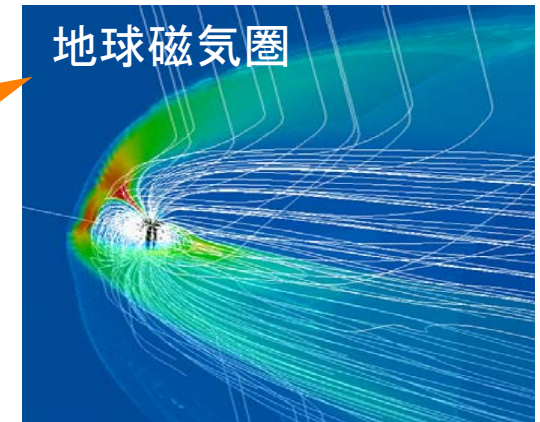
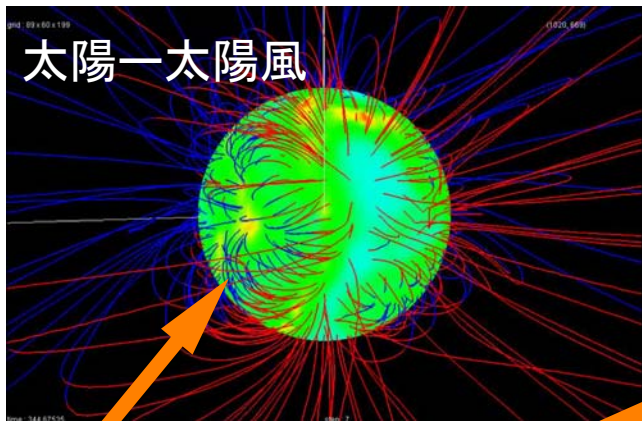
- 惑星大気の状態は、固体部や海洋との相互作用に加えて、宇宙空間(太陽放射、高能粒子)からの影響で決定づけられる

現状(少し前): 太陽風(CME)-地球相互作用の 磁気流体力学(MHD)シミュレーション



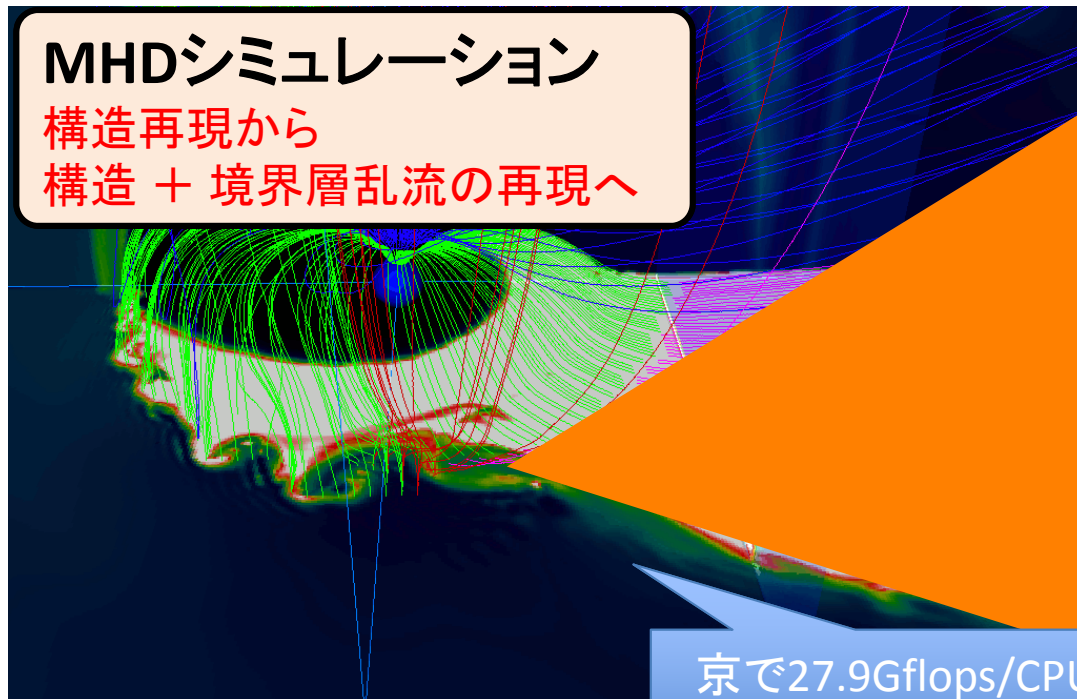
BATSRUSコード(ミシガン大学)
大局的な「構造」は良く再現されている

現状(少し前): 太陽系のMHDシミュレーション

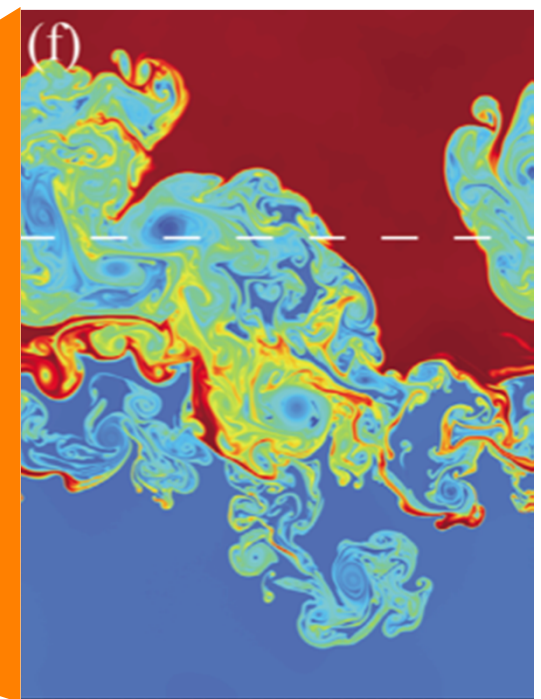


3rd order TVD code (九大、NICT、東北大)
同じく、大局的な「構造」は良く再現されている

今後の課題： MHDシミュレーションで 「構造」及び「境界層乱流」の再現へ



京で27.9Gflops/CPU
(実行効率22%)
@262,144コアの実績



- 格子点数
 - 京では $\sim 10,000^3$ 程度 ($\Delta x \sim 100\text{km}$)
 - Δx は境界層厚みに到達、かつ、MHD近似の限界に到達
- 「境界層乱流」及びそれに伴う運動量・物質輸送を再現する為には、非MHD項を加えて、各次元に10倍以上の格子点数が必要

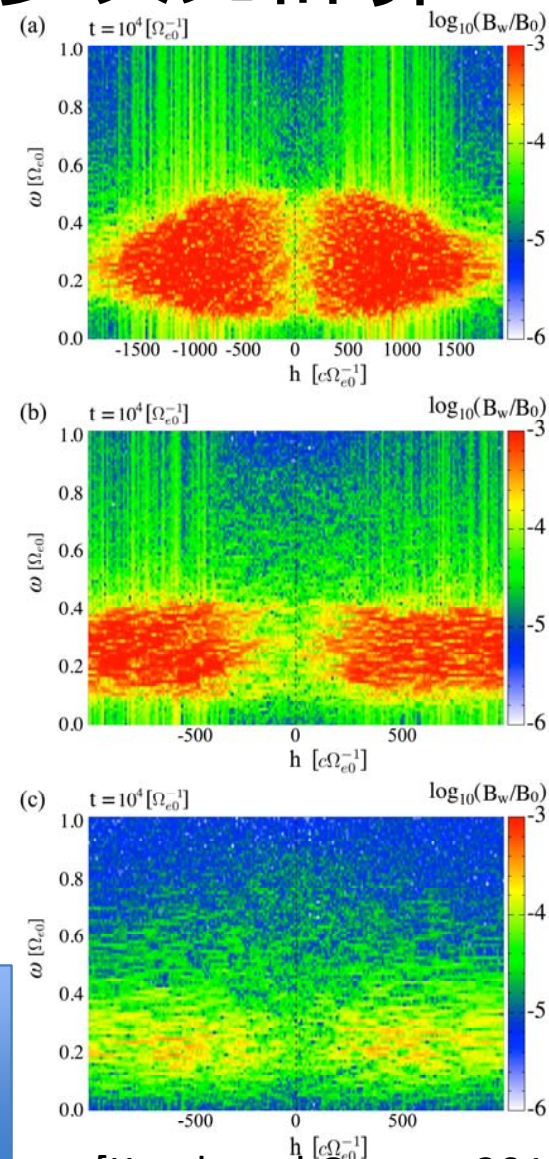
今後の課題： 流体/粒子混成シミュレーションは 相対論的電子加速過程の多次元計算へ

- 木星磁気圏赤道域で発生するコーラス放射の励起過程ならびに相対論的電子の加速過程を再現 (HPCI課題で採択)
- 九大FX10で3072コア計算の実績 (ただし空間1次元計算, 2週間/ジョブ)
- 今後は、ダクト伝搬を再現する、より現実的な背景場における多次元計算を目指す

流体/粒子混成シミュレーション

より現実的な背景場における
多次元計算へ

FX10で192ノード・
3072コア、
超粒子27億個



磁気圏の空間スケール

[Katoh and Omura, 2013]

今後の課題：大規模領域間結合モデル



大気重力波が惑星大気流出に及ぼす影響を評価

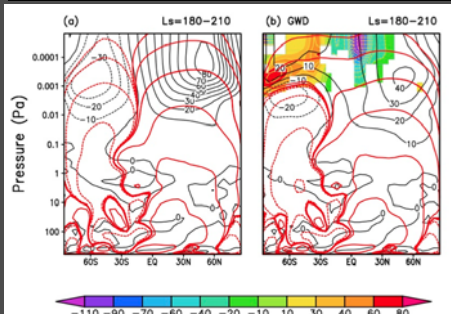


連続体近似が成立しない

衝突が稀

境界条件
(n, v, T)

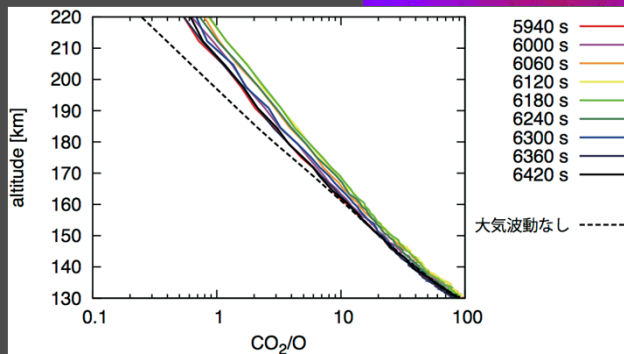
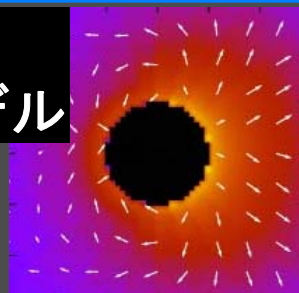
大気大循環モデル



GCM runs without & with GWs

[Medvedev et al., 2011]

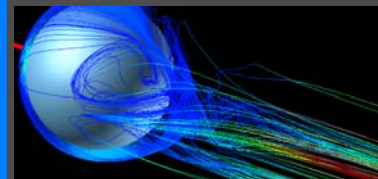
全粒子DSMC
熱圏・外圏モデル



Simulated vertical profiles of CO_2/O with & without GWs. Effect of GWs cause the enhancement of CO_2/O in the upper atmosphere

125km-several
 R_m alt.
 n, v, T

電離圏MHD
モデル



3D distributions of neutral species obtained from GCM and DSMC will be used as inputs to the MHD simulations of solar wind-ionosphere interaction. We conduct two sets of the GCM, DSMC, and MHD simulations, i.e., "without" and "with" GWs.

100-125km alt. n, v, T

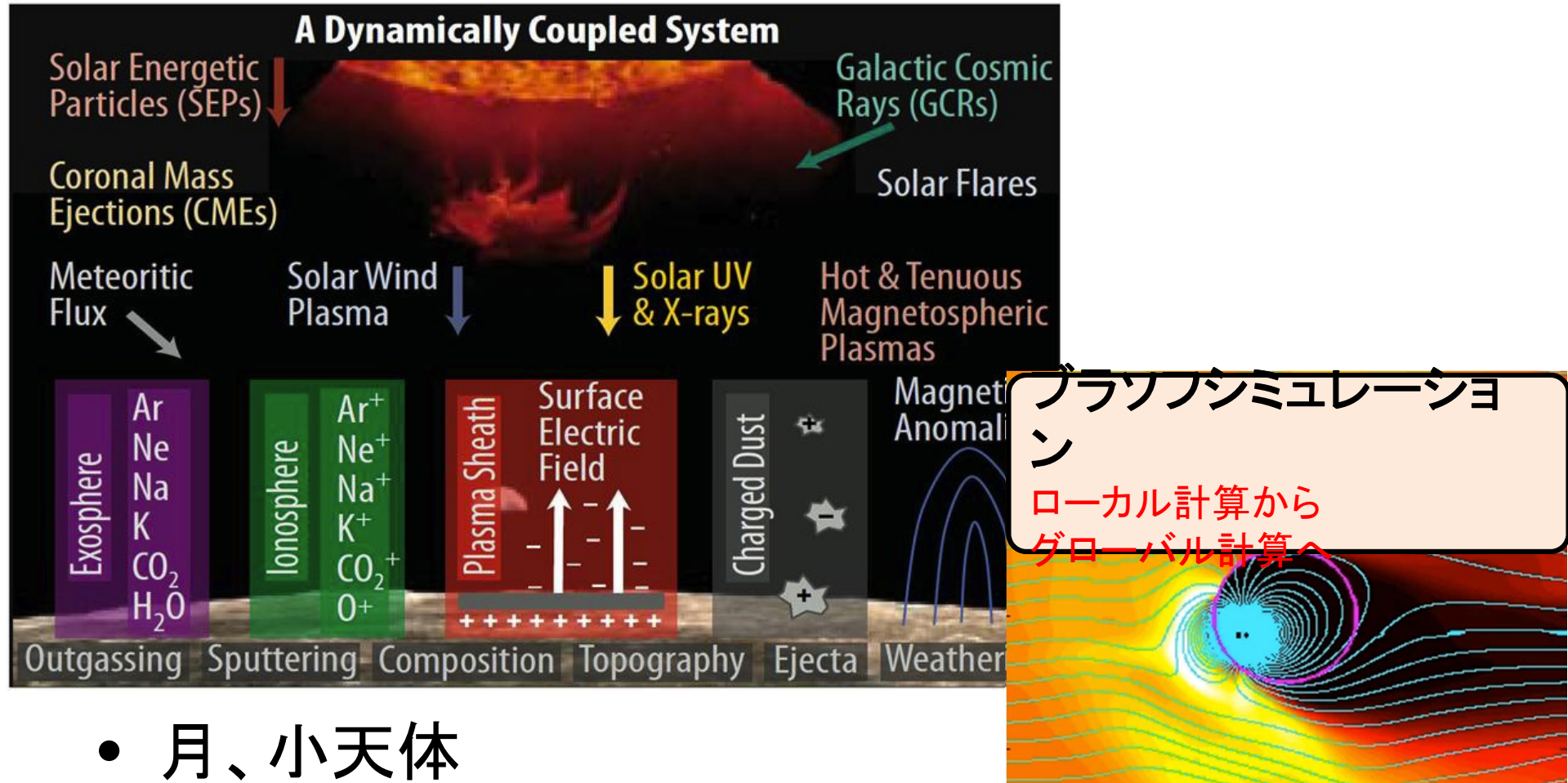
領域間結合モデル

全粒子DSMC熱圏・外圏モデル (全球の場合は 10^8 コア規模の計算)との結合へ

大気重力波の伝搬

大気を保有しない天体

The Solar-Lunar Connection

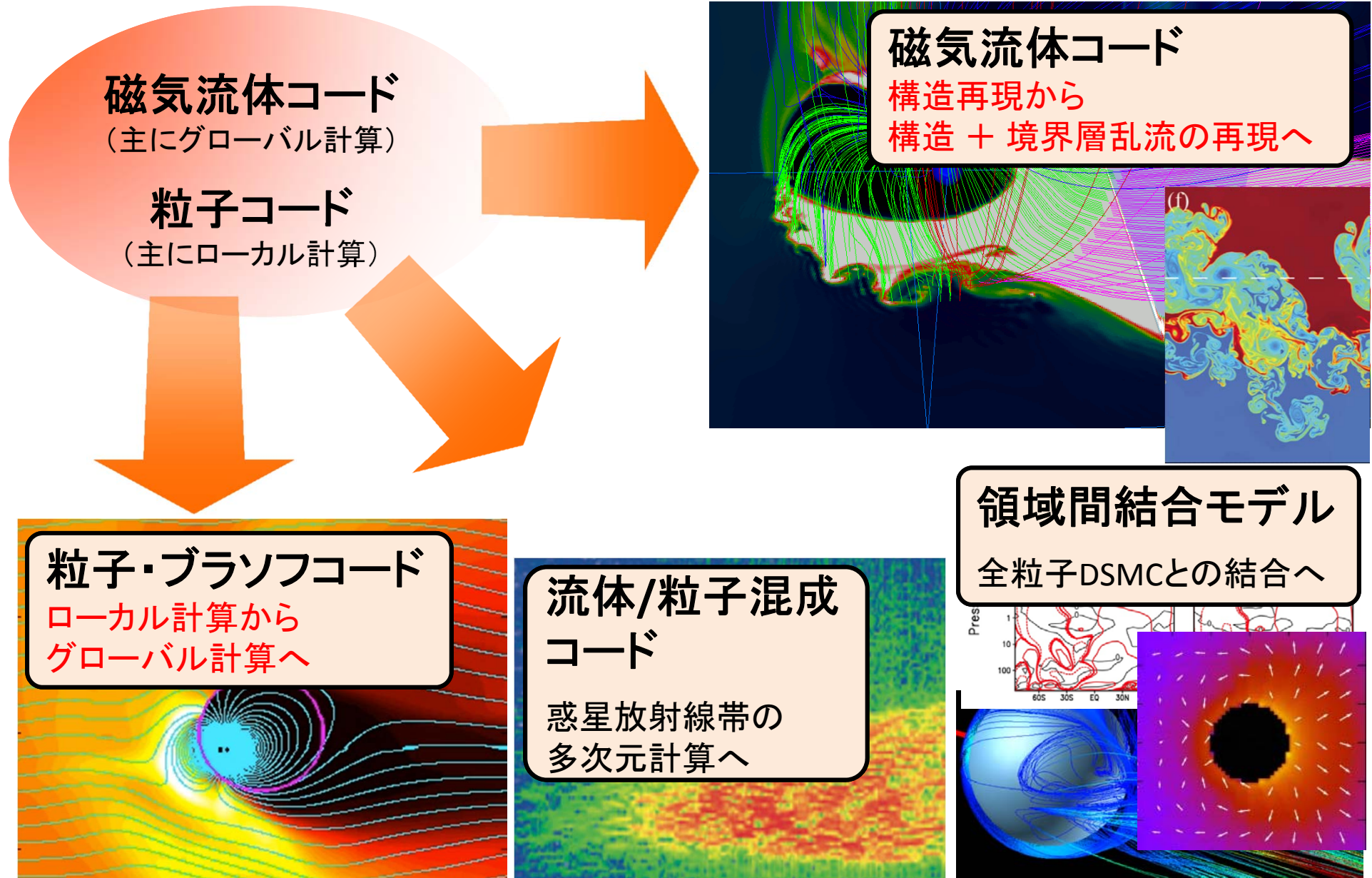


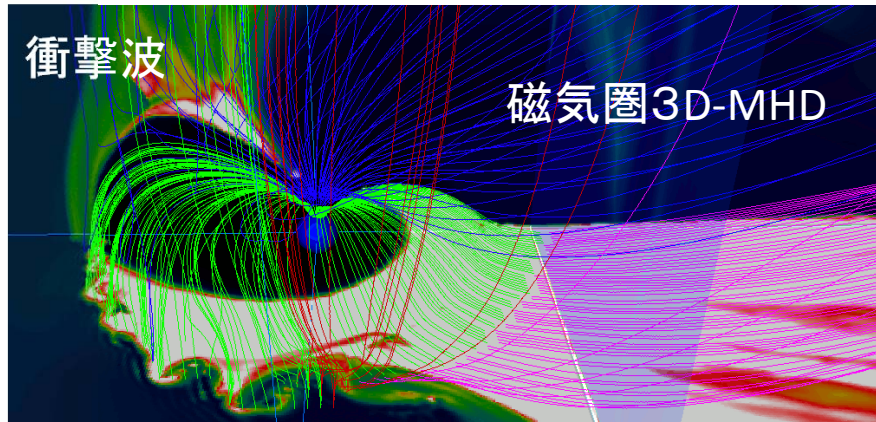
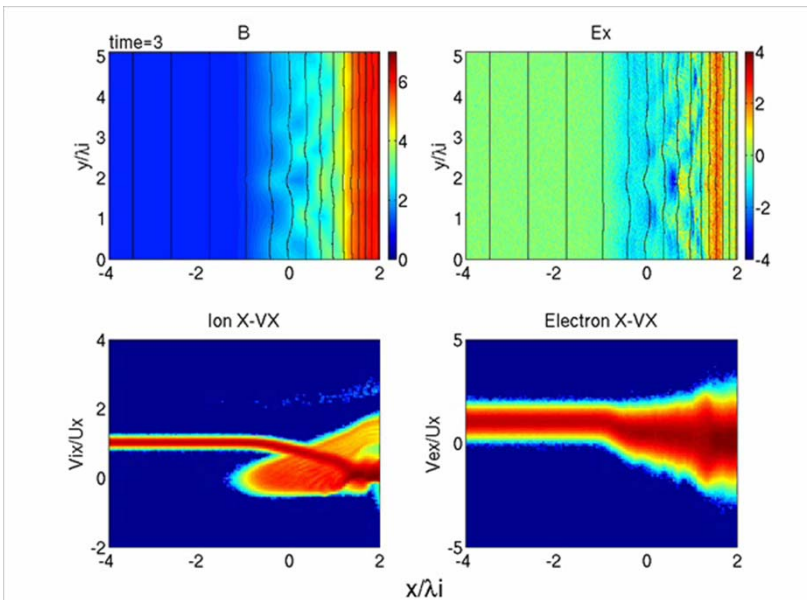
- 月、小天体
プラズマ環境の理解が、表層環境の理解の鍵に
→ 梅田氏によるブラソフシミュレーション

実施体制について

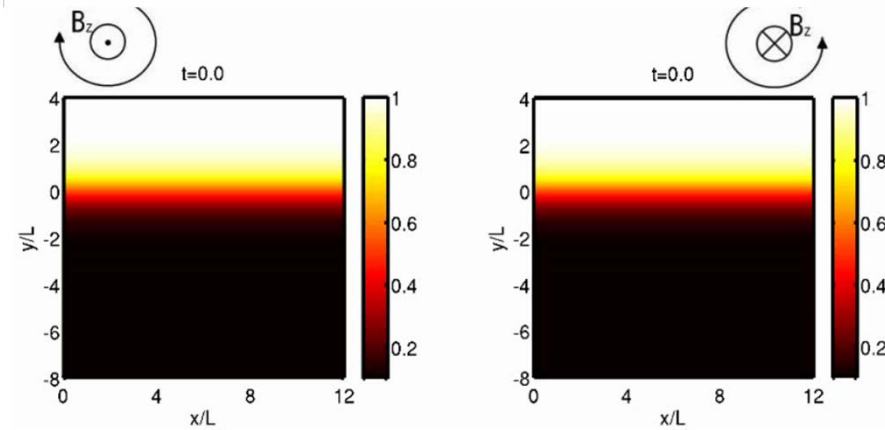
- 惑星圏シミュレーションは、若手を中心として、多様なコードによる大規模計算を行っている
- しかし、HPCI課題ではゲリラ的に活動中
 - 「京」一般利用
 - 篠原さん、(以下条件付き)草野先生、臼井先生、陰山先生、松本さん、深沢さん
 - 「京」若手利用
 - 梅田さん
 - 「京」以外一般利用
 - 草野先生(東大、名大)、寺田・加藤さん・深沢さん(東北大、九大、名大)
- 惑星科学や戦略分野5などと協力していけると有り難い

エクサに向けた惑星圏シミュレーションの課題

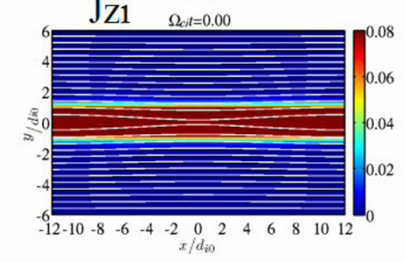
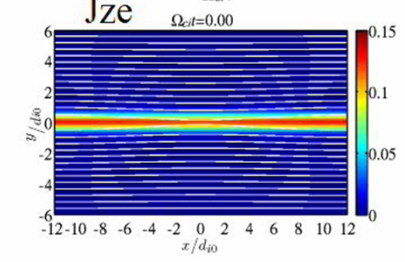
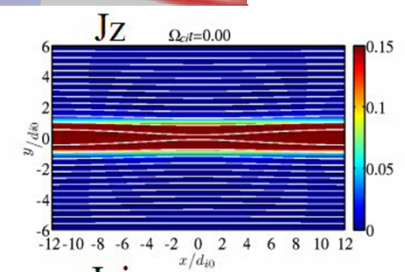
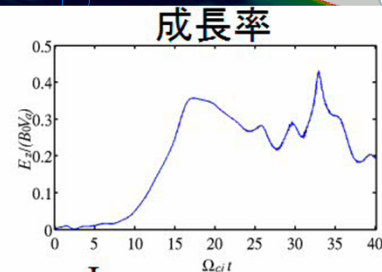




磁力線
繋ぎ変え



KH渦(磁場の向きが $-z, +z$)



イオン慣性
イオンジャイロ

プラズマ振動



「京」でできること

- MHD近似の限界を超える高解像度での3次元グローバルMHDシミュレーション

$\Delta < 100\text{km}$ はイオン慣性長・ジャイロ半径オーダー
格子数 $\sim 10,000^3$

- 小天体の低解像度6次元グローバルブラソフシミュレーション

– ただし、ノードあたりのメモリが少ない「京」では、(16GB/node)
6次元コードは動作しない: $30^6 \sim 40\text{GB}$

- 小天体の5次元 (実空間2次元・速度空間3次元) 高解像度グローバルブラソフシミュレーション

- 小天体(月とか)のほぼ実物大5次元低解像度グローバルブラソフシミュレーション

「京」による弱磁化小天体の5次元 “グローバル”ブラソフシミュレーション

	本研究	月
天体半径	2.72km	1738km
イオンジャイロ半径	1.36km	85km
イオンジャイロ周波数	9.36Hz	0.15Hz
マス比 m_i/m_e	25	1836

◎計算サイズ: ~50TB ⇒ ~8GB/node

▪ Spatial grids: 1920×2560 ⇒ 20×40 /node

▪ Velocity grids : $60 \times 60 \times 60$ ⇒ $60 \times 60 \times 60$ /node

◎ノード数: **6144** (96×64) ⇒ 全体の約14分の1

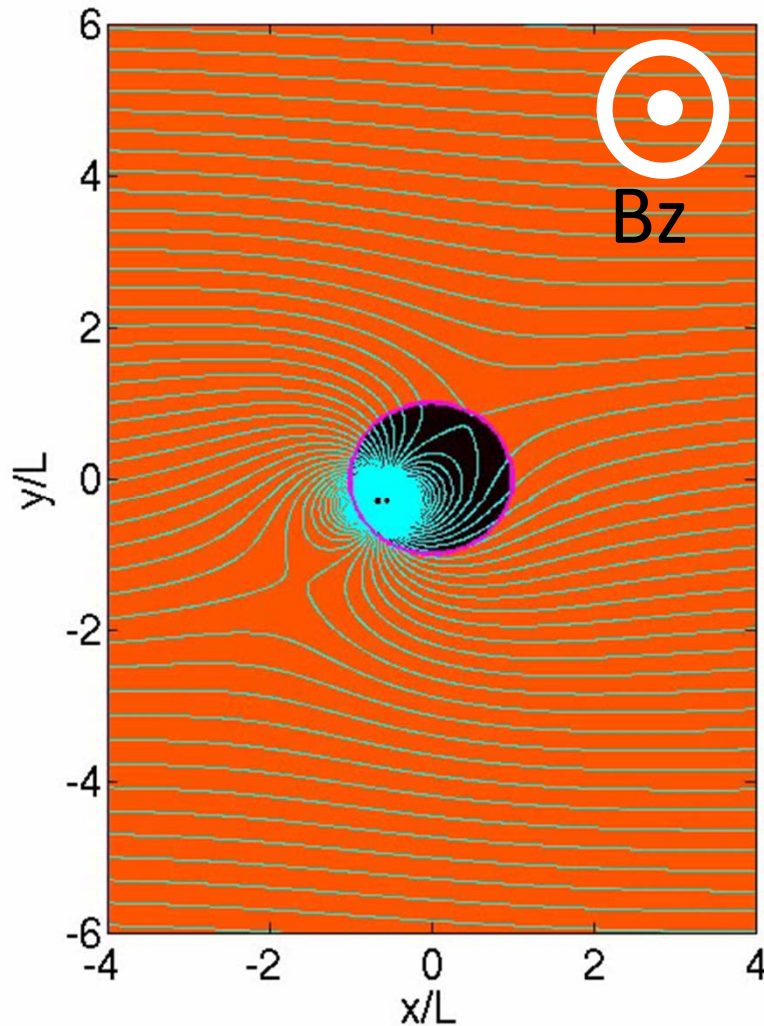
⇒ FX10@東大では3072ノード必要 「京」でしかできない

◎時間ステップ数: $100,000$ ($10/\Omega_{ci}$) ⇒ **約100日**

計算の途中結果

磁力線とイオン密度

$t = 0.0$



- 昼側(左側)境界から太陽風プラズマが入射
- 昼側に弱いダイポール磁場を配置
- プラズマは天体表面に吸着、電磁波は透過
- 天体半径 = イオンジャイロ半径の2倍
- 昼側に、イオンジャイロ半径スケールの磁気圏(磁力線の閉じた領域)がある
- 夜側の磁力線は、基本的には開いている

「一般ユーザ」として京を使ってみて...

- 待ち時間が長い...
 - 他のシステムだと、全リソースの10分の1以下なら1日待ちぐらいで走るのに...
 - 「(予想)ジョブ開始時間」がどんどん後ろにずれていく
- 大量ファイル操作のストレス
 - ⇒ 6万個のデータファイルと2万個のリスタート用ファイル
フロントエンドがlsで固まる...
- 市販の(非並列)ソフトウェアを用いると、図を描くだけでかなり時間がかかる
(ある物理量+磁力線の図で3時間)
 - 一個人で扱えるノード数の限界...

計算機について

コードによって求めている計算機が異なる

- 流体コード
 - 基本的には何でも御座れ
 - メモリバンド幅が大きいとうれしい
- 粒子コード
 - 超並列機はきつい。メニーコアはOK。
 - 共有メモリが大きいとうれしい(SGI NUMA, vSMP?)
- ボルツマンコード
 - 超並列機でもOK。メニーコアはきつい？
 - ただし、共有メモリはそこそこあったほうがよい

MHDコードの性能

(深沢さん@九大基盤センター提供)

	Core/CPU	Rpeak [TFlops]	Rmax [TFlops]	Rpeak /CPU [Gflops]	Efficiency [%]	Suitable domain decomposition	CPU architecture
SX-9	64/64	2.19	6.55	34.2	33	2D	Vector
HA8000	8192/1024	10.04	75.37	9.8	13	3D_A	Opteron (Barcelona)
HX600	1024/256	2.17	10.24	8.5	21	3D_A	Opteron (Shanghai)
XE6	8192/512	14.16	81.92	27.7	17	1D or 2D	Opteron (Interlagos)
RX200S3	1536/768	2.54	18.43	3.3	14	3D_A	Xeon (Woodcrest)
RX200S6	864/144	3.51	10.13	24.4	35	3D_A	Xeon (Westmere)
CX400	23616/2952	104.23	510.11	35.3	20	3D_A	Xeon (Sandy Bridge)
FX1	1024/256	2.08	10.24	8.1	21	3D_B	SPARC64VII
K	262144/32768	914.12	4194.30	27.9	22	3D_B	SPARC64 VIIIfx
FX10	76800/4800	234.59	1135.41	48.9	21	3D_B	SPARC64 IXfx
SR16000/L2	1344/672	5.38	25.27	8.0	21	3D_B	POWER6
Xeon Phi 5110P	60/1	0.049	1.01	19.0	5	3D_A	Knights Corner

メモリバンド(BF値)依存 => 演算を増やす(精度を上げる)

Particle-In-Cell計算の並列化の問題点

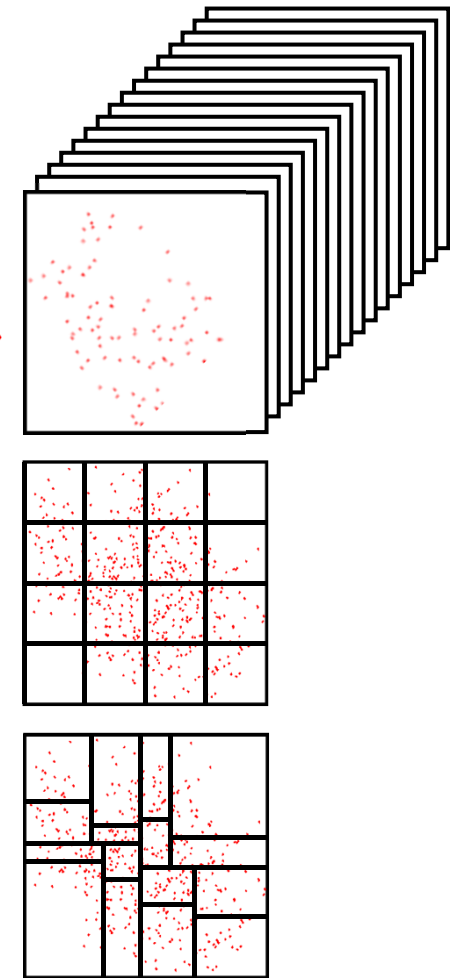
三宅さん@神戸大提供

- **粒子分割** (場は冗長に計算) : cannot sustain large space domain and global operations on it.

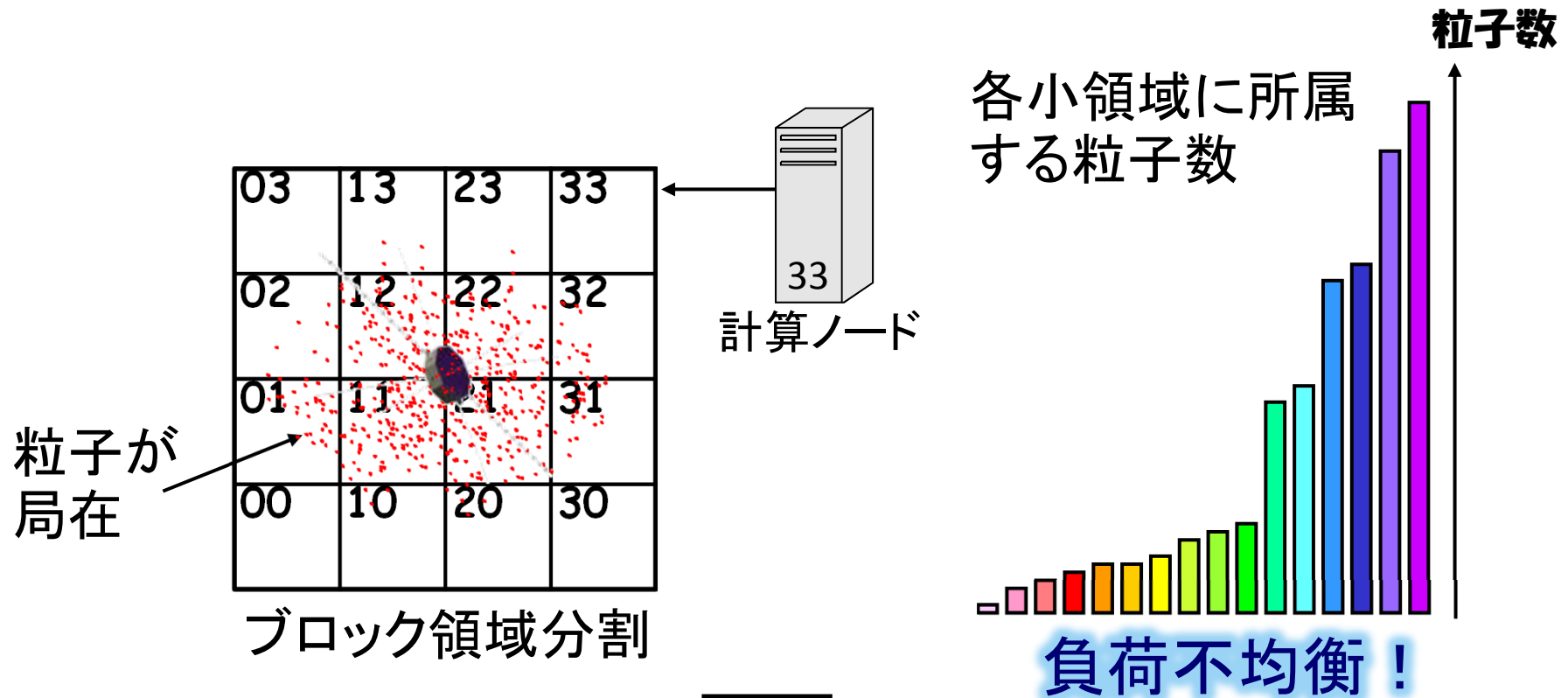
スレッド並列はこれ。粒子数が多いとスケール

- **領域分割** : cannot work when particles are distributed non-uniformly.
- **動的領域分割** : also has pitfalls for particles populating a small subdomain too densely.

→ 別の方法が必要

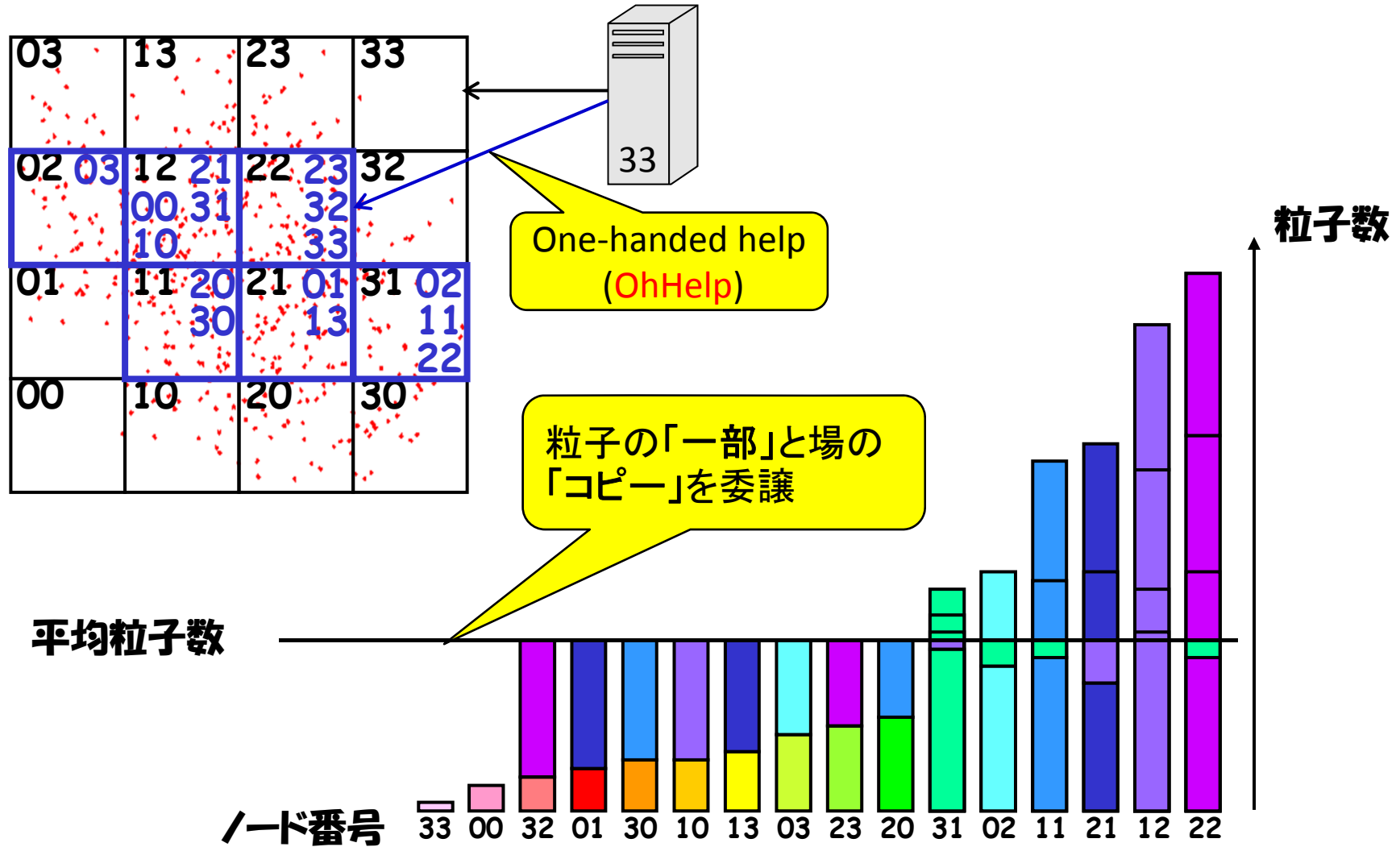


領域分割方式PICシミュレーションにおける 粒子負荷不均衡の問題



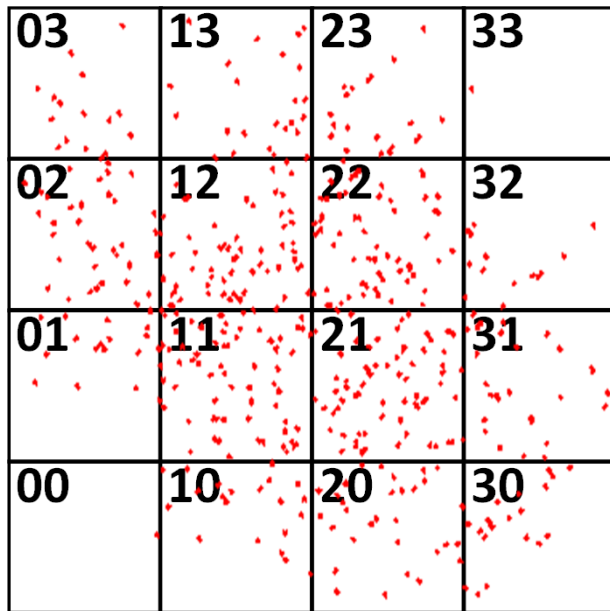
動的負荷分散アルゴリズムの必要性

OhHelp(中島@京大メディアセンター): 負荷分散戦略

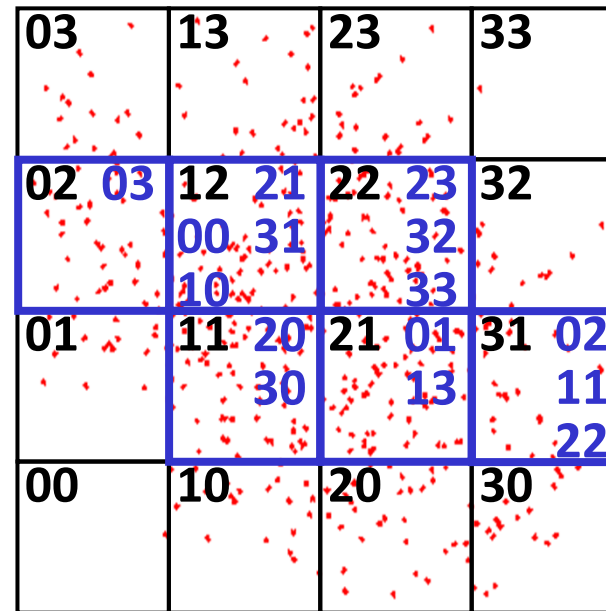


「粒子数」と「小領域サイズ」双方の観点で負荷均衡化

OhHelp: 小領域の1次および2次割り当て



1次割り当て



2次割り当て

- **均一ブロック分割**
- **粒子負荷均衡条件：**
 $\forall \# \text{particle-in-subdomain} \leq \Sigma \# p / \# \text{nodes} \times (1 + \alpha)$
 → 1次割当のみで計算
 → 隣接通信のみ

- **各ノードが他の高負荷ノードを一つだけ手助け**
- **粒子数均衡化&各ノードが担当する領域サイズも均衡**
- **負荷バランスが崩れるまで割当を維持**

ただし、毎ステップ呼ぶと性能が低下

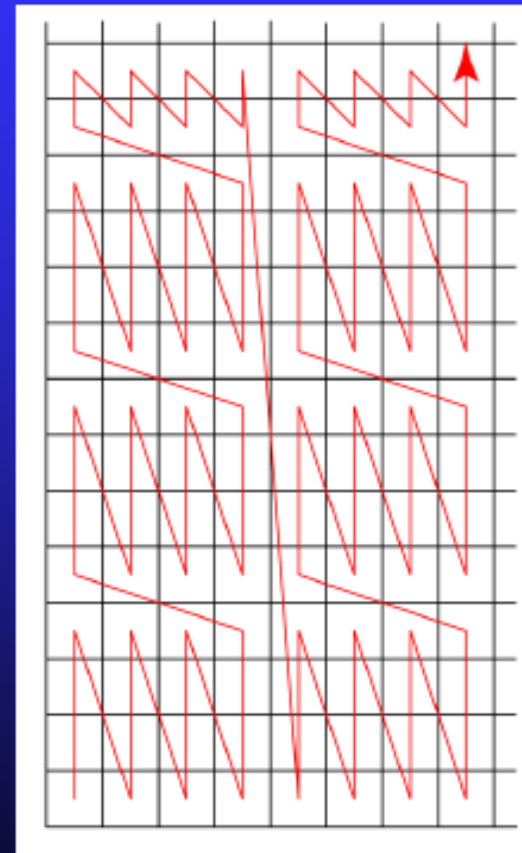
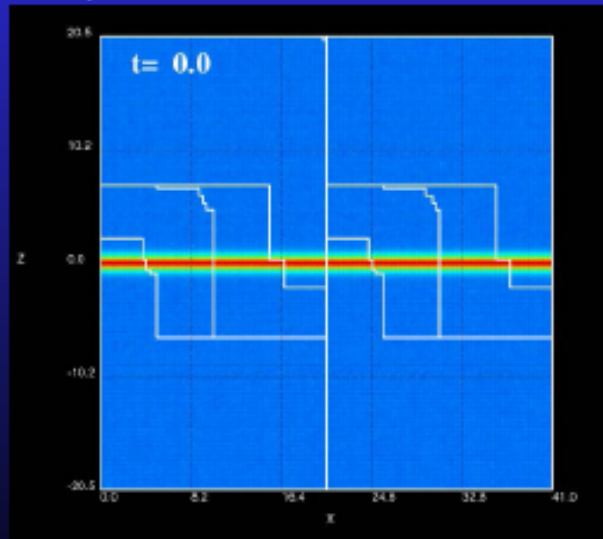
動的負荷分散①(藤本@天文台)

AMRだからうまくいっている?

Adaptive Block Technique [Fujimoto, JCP, 2011]

Base-level cells in the entire domain are sorted in an appropriate order:

- That is similar to Morton order,
- So that the block surface is as small as possible,
- Especially in the central current sheet, the surface must be small.

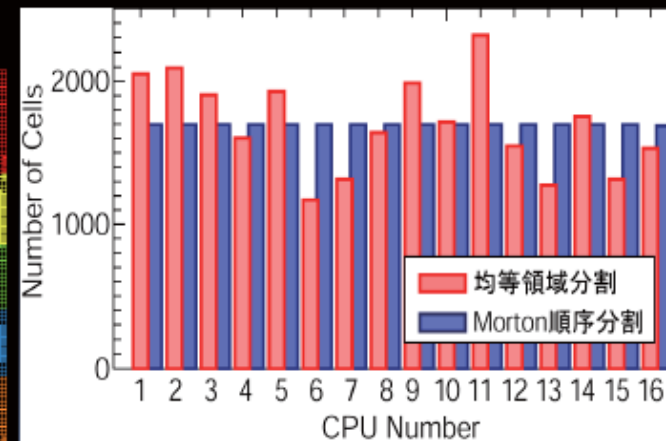
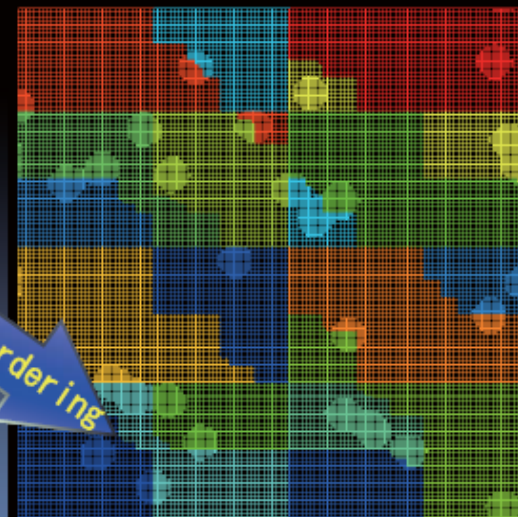
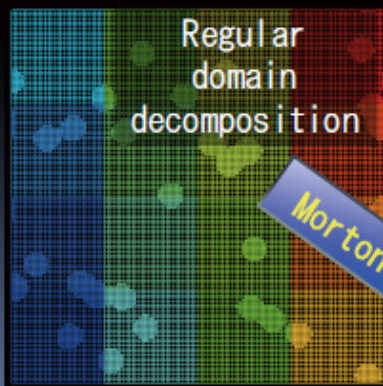
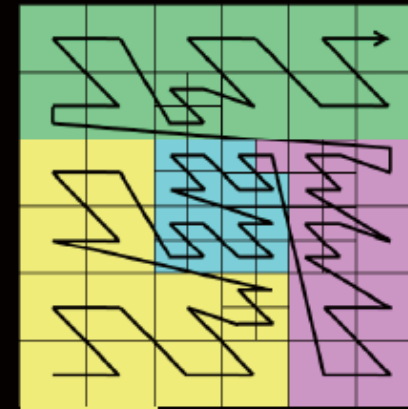


動的負荷分散②(臼井@神戸大)

実際の仕事は沼波さん@核融合研

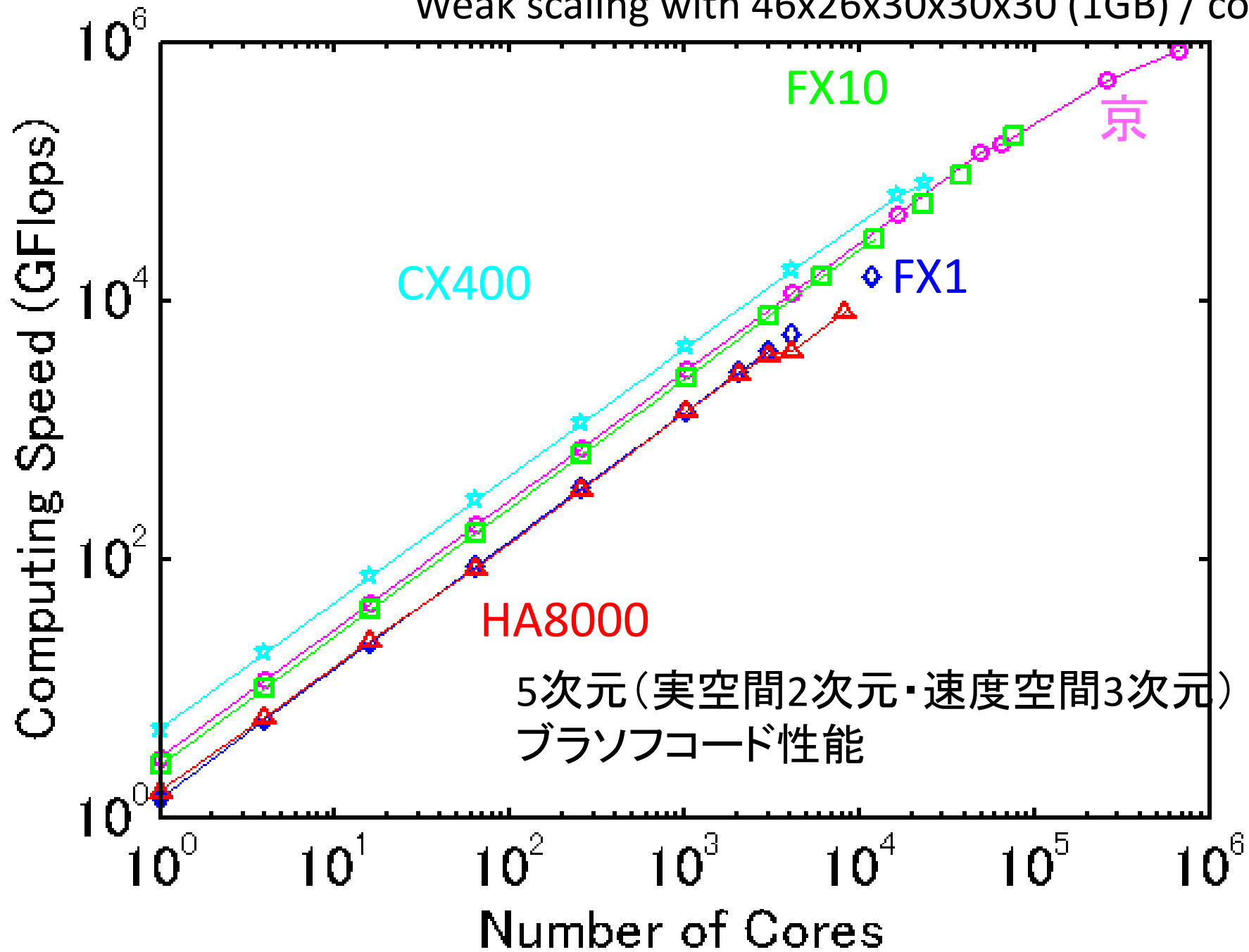
Domain decomposition with Morton ordering method

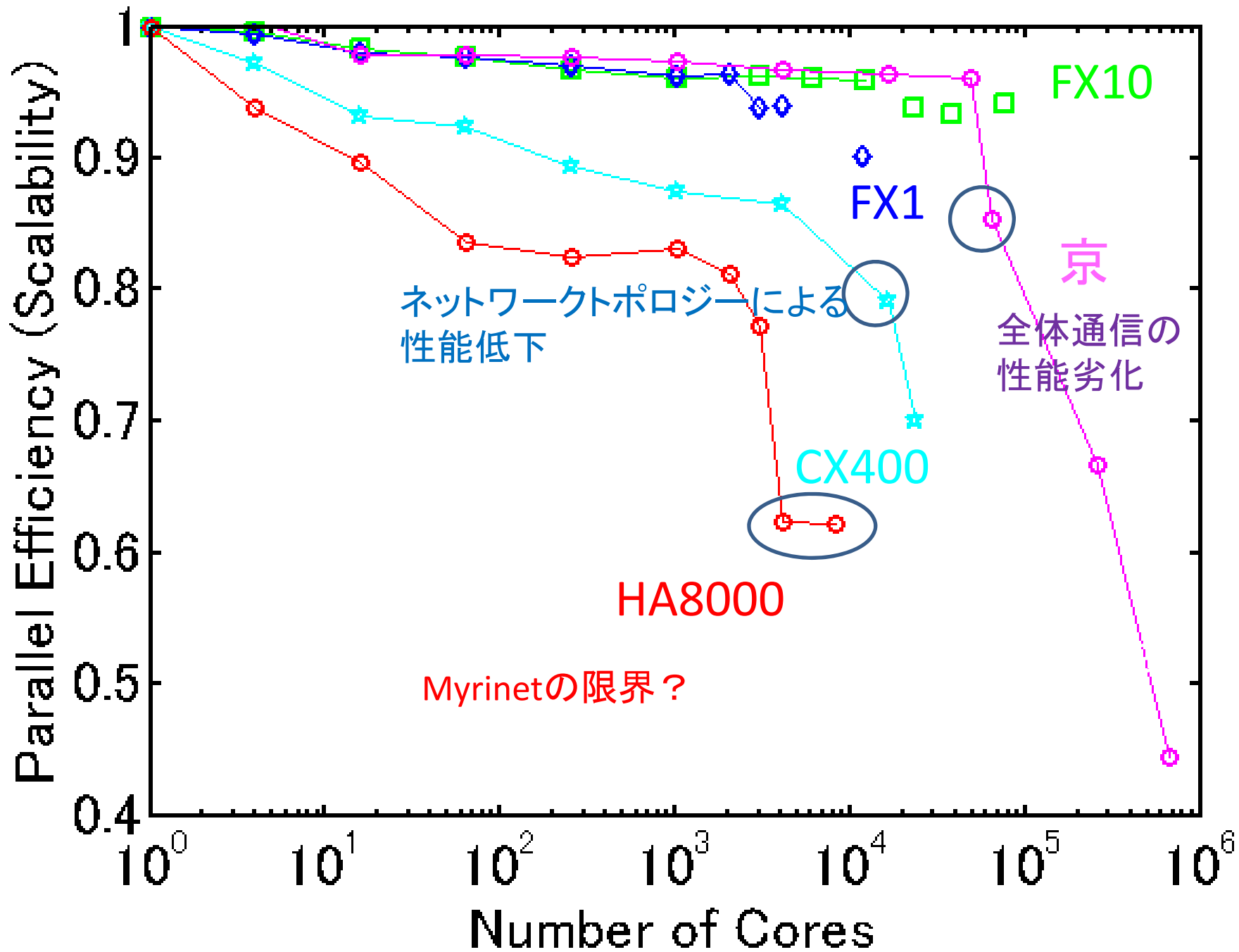
- By using the Morton ordering method (one of the space-filling curves) neighboring cells are related in order
- And by dividing the order so that the same number of cells is assigned to each sub-domain, load balance is supposed to be achieved. (blue case in the figure)
- However, in particle model, the load for particle solver is dominant and it should be taken into account



オーダリングは
毎ステップやってない 13

Weak scaling with 46x26x30x30x30 (1GB) / core





ボルツマン(ブラソフ)コードと計算機

超多重ループだが、ループ長自体は短い

- $40^3 \times 40^3 \sim 160\text{GB}$
- $30^3 \times 30^3 \sim 40\text{GB}$
- $20^3 \times 40^3 \sim 20\text{GB} - 32\text{GB}$ で動くサイズ

⇒ このサイズをどうノード内並列するか??

– OMP DO COLLAPSE(5) 最内側ループはベクトル化
⇒ メニーコア環境ではきついかも...

$2^2 \times 4^3 = 256$ スレッド : ループ長10

– ループの1次元化

⇒ かなり面倒。テーブル用の配列もメモリを食う

まとめ

コードによって求めている計算機が異なる

- 流体コード
 - 超並列機OK、アクセラレータOK
 - 性能はBF値に依存、演算を増やす(計算精度を上げる)
- 粒子コード
 - 巨大共有メモリ(SMP)がベター、アクセラレータはOK
 - 超並列時のロードバランスに課題
- ボルツマンコード
 - 超並列機OK、アクセラレータはきつい?
 - ある程度の共有メモリ(64–200GB)は欲しい

ファイル数の増加、全体通信の性能低下など、
「ノードが増える」のはそろそろきつい...