

計算科学ロードマップの 基礎科学分野の更新状況： 宇宙惑星

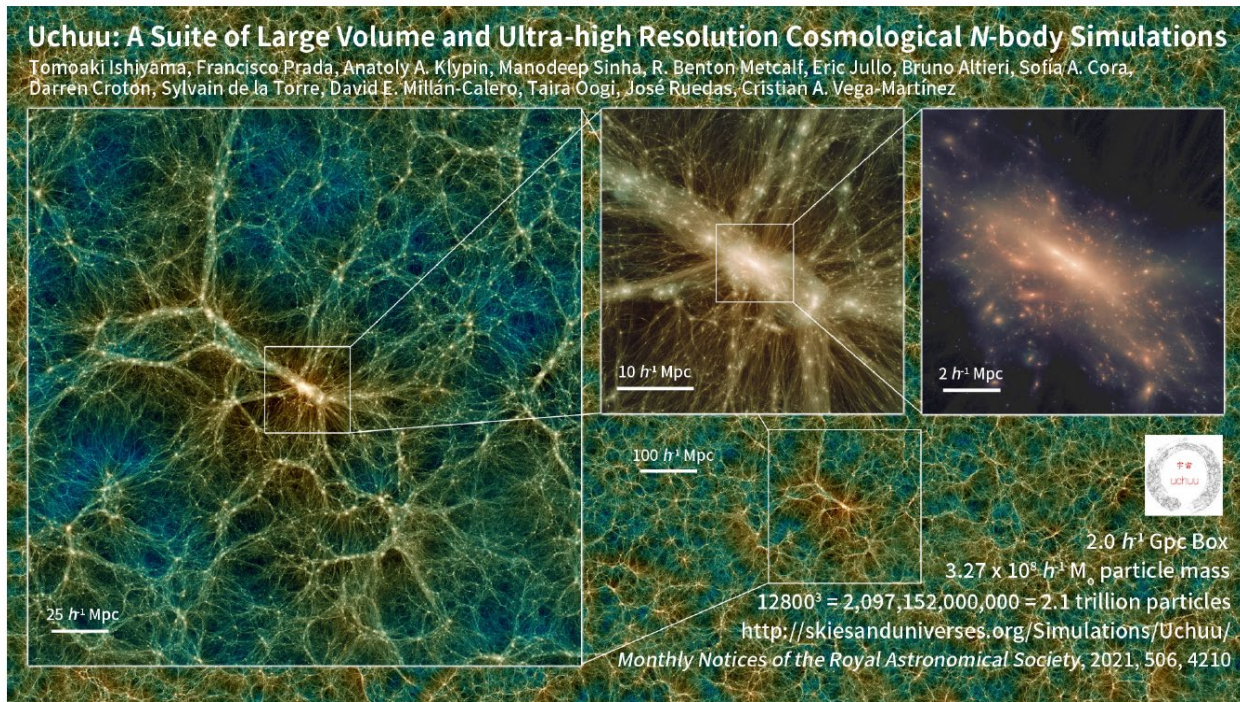
滝脇 知也

研究課題の紹介

1. (ダークマター) 自己重力 N 体シミュレーションによる宇宙構造形成の解明
2. (銀河) 自己重力流体シミュレーションによる銀河形成過程の解明
3. (星団) 球状星団におけるコンパクト連星の形成
4. (超新星) Beyond-Boltzmann: ニュートリノ輻射流体計算による超新星爆発メカニズムの解明
5. (粒子加速) 相対論的粒子計算による超高エネルギー現象と粒子加速機構の探究
6. (分子雲) 分子雲形成・破壊
7. (太陽) 輻射磁気流体計算による太陽恒星ダイナモの探求
8. (プラズマ) プラズマ計算による太陽圏・宇宙空間無衝突衝撃波の研究

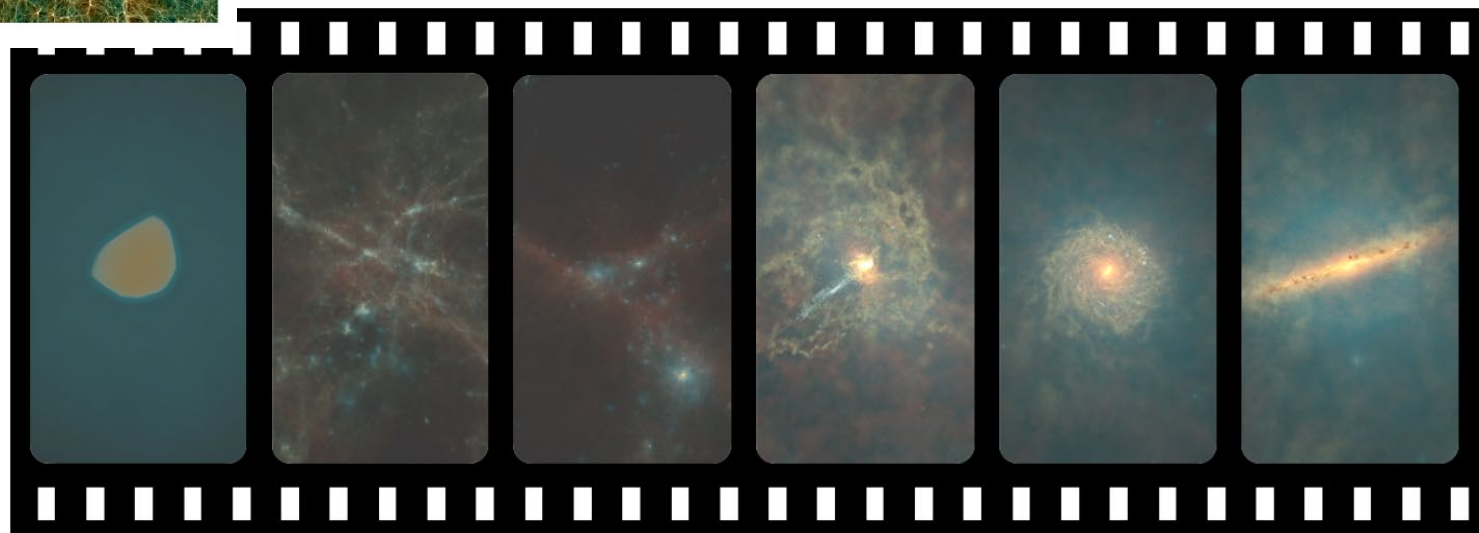
もともとは20課題ほどをまとめる予定であった。もう少し原稿を収集したい。

ギャラリー



ダークマター

銀河



ギャラリー

太陽

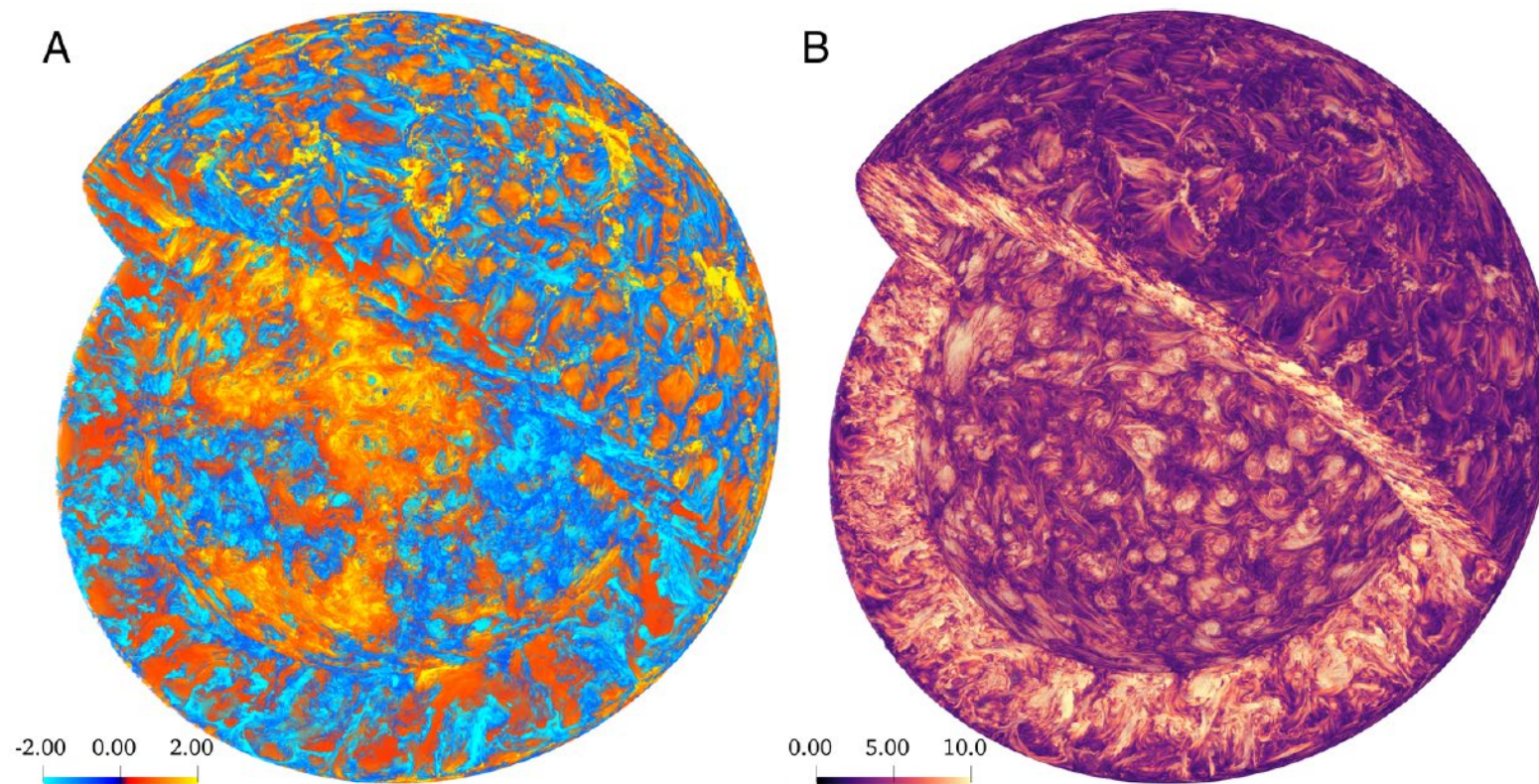
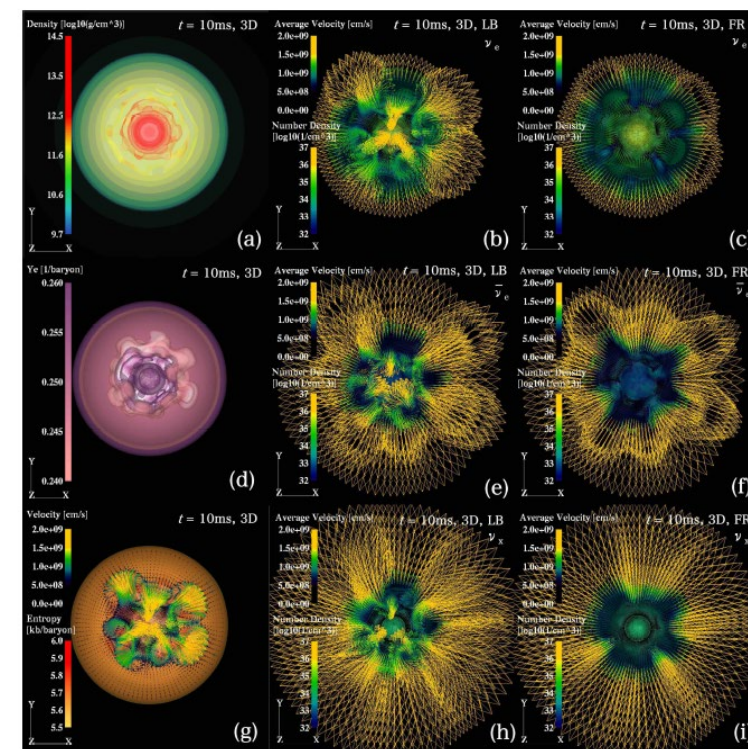


図6 富岳で達成した太陽内部熱対流の様子。A. 各高さで規格化したエントロピー B. 磁場強度 [G] を表す (Hotta & Kusano, 2021, Nature Astronomy, 5, 1100 より引用)

超新星



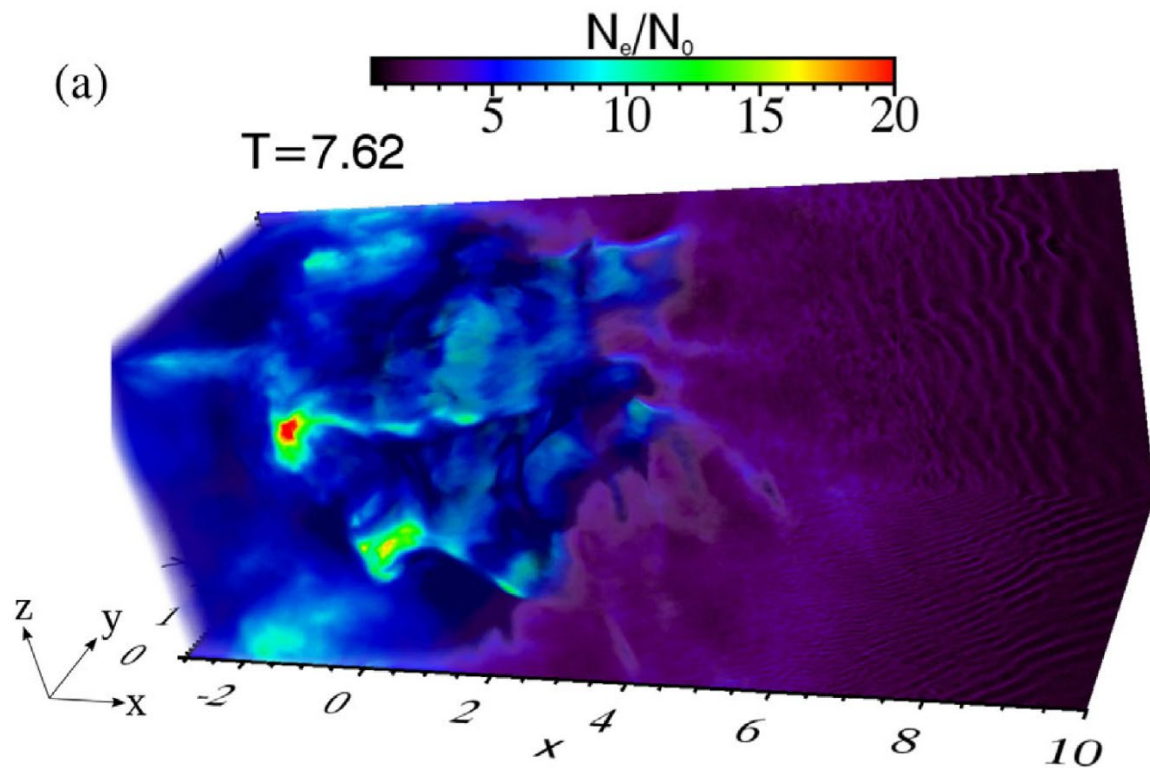


図5 非相対論的高マッハ数衝撃波の3次元PICシミュレーション。色は電子密度分布を表す。
Matsumoto et al., PRL (2017) より。

衝撃波

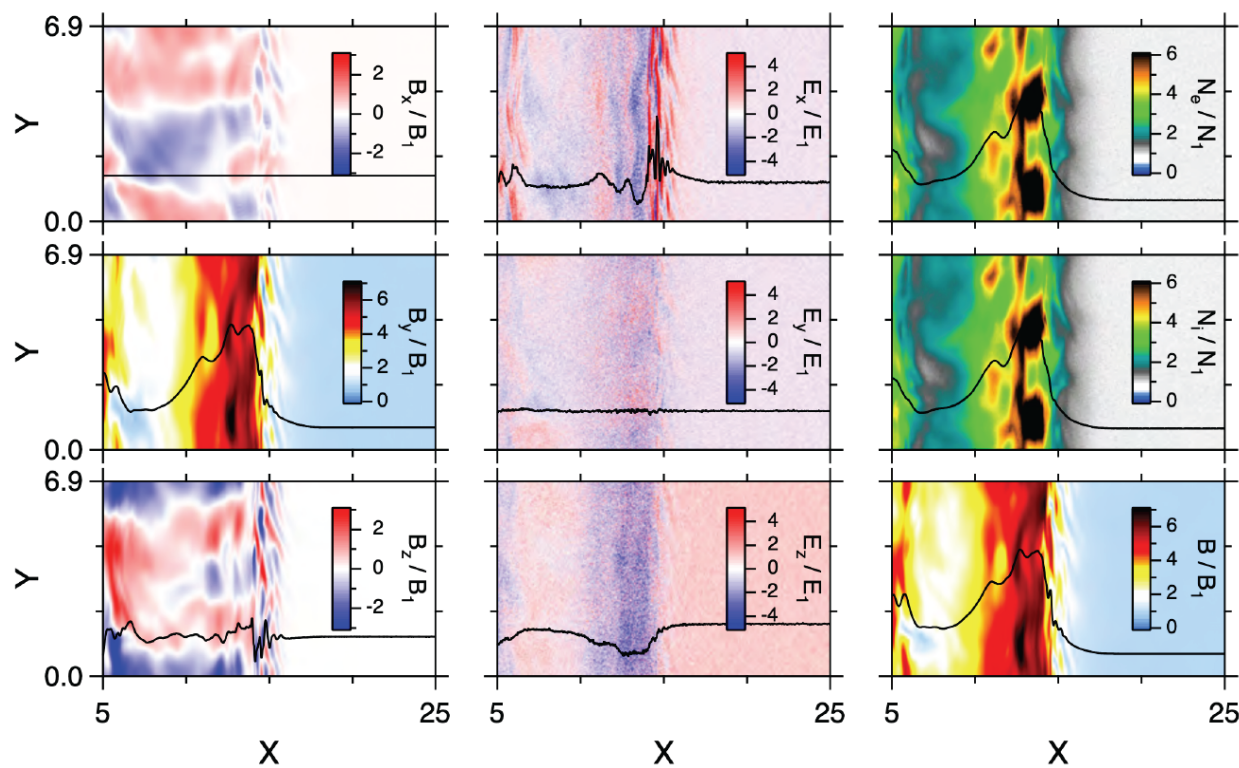


図7 現実的な電子・陽子質量比 ($m_i/m_e = 1836$) を用いた2次元のPIC法による無衝突衝撃波の数値シミュレーション例。磁場3成分(左)、電場3成分(中央)、密度および磁場強度(右)を示す。複雑なマルチスケールのプラズマ波動が同定されている。[Matsukiyo & Matsumoto (2015)]

アプリの特徴

時間発展の方程式を解くものがほとんど。楕円方程式で平衡状態を求めるようなアプリの需要はあるはずだが、スパコンでは行われていない。

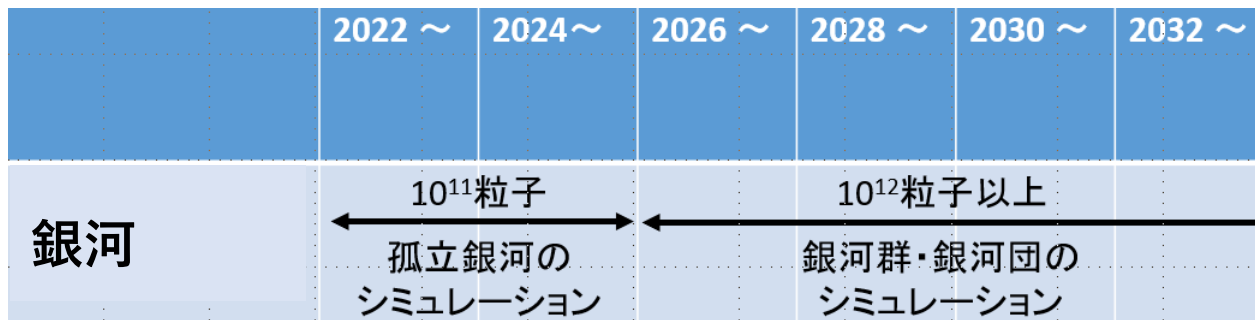
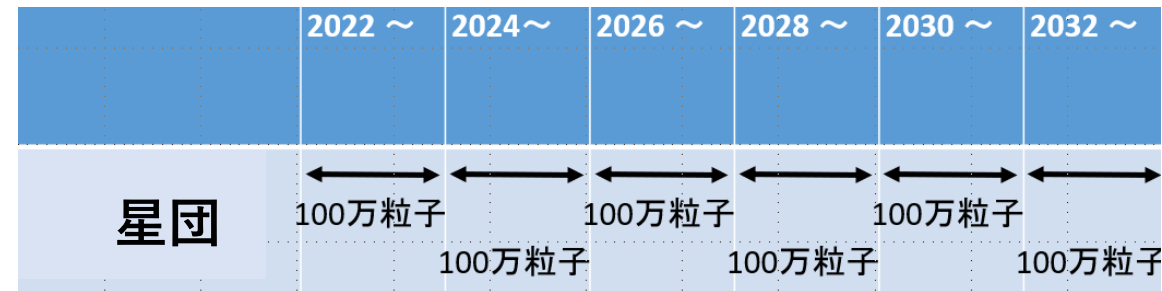
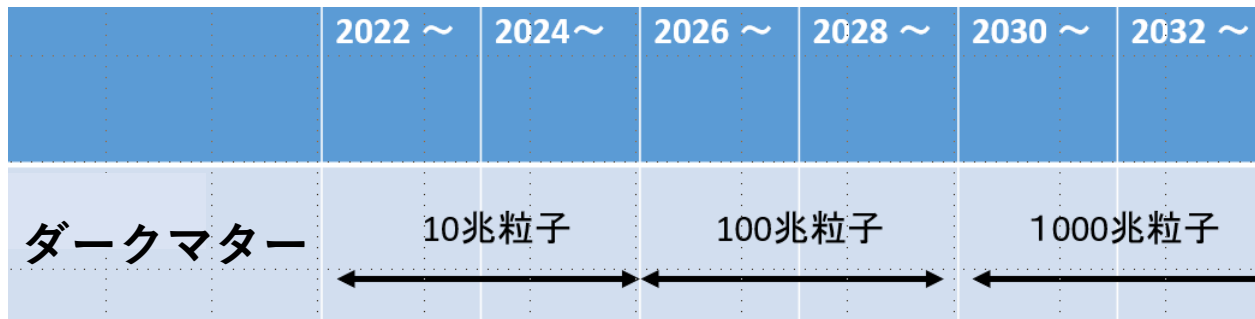
およそ、4タイプある。

- 粒子法（ダークマター、銀河、星団）
- メッシュ法（分子雲、太陽）
- 粒子法＋メッシュ法（粒子加速、プラズマ）
- サブグリッドモデル（超新星）

超新星爆発はメッシュ法であるが、ソースタームの1メッシュ内でニュートリノ相互作用を計算するパートが一番計算時間を必要とする。

粒子法の課題

- ダークマターや銀河は粒子数を増やす方向
- 星団は粒子数を増やす必要がないが、長時間（ステップ数の大きい）計算をする必要あり



メッシュ法の課題

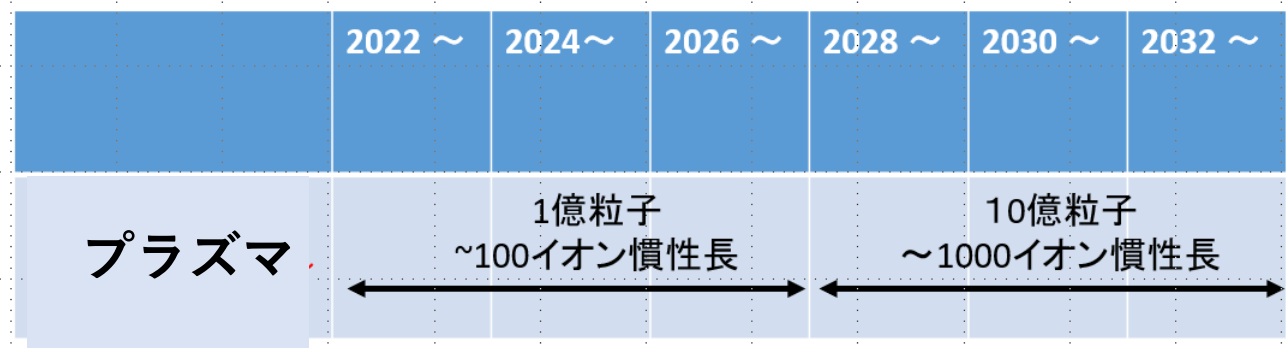
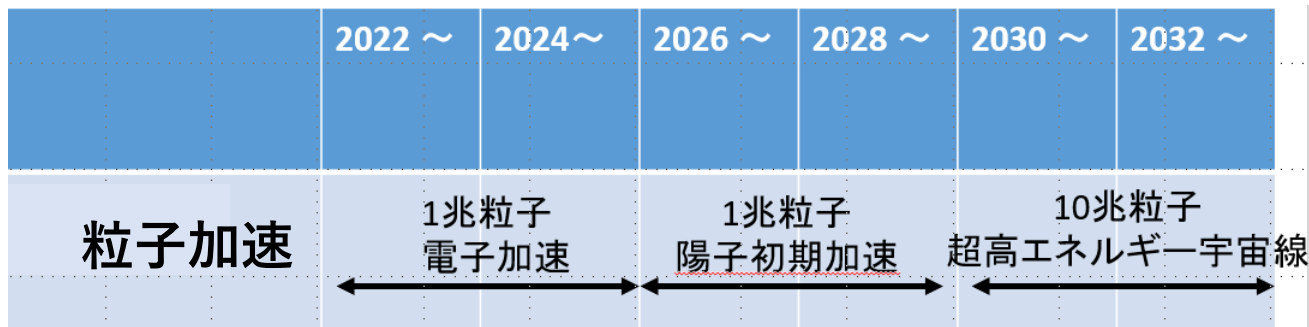
- 分子雲は観測精度に迫る高解像度計算が必要
- 太陽では解像度を変えるごとに計算結果が異なる問題があり、数値的な収束を目指す

	2022 ~	2024 ~	2026 ~	2028 ~	2030 ~	2032 ~
分子雲	多様な銀河環境を想定した 0.1 pc分解能の 分子雲形成・破壊シミュレーション (4096) ³		フィラメント構造(0.1 pc)を 分解した分子雲形成・破壊 シミュレーション (16384) ³			分子雲コアの 微細構造を分解 したシミュレーション

	2022 ~	2024 ~	2026 ~	2028 ~	2030 ~	2032 ~
太陽	200億格子点 3000万時間ステップ				2000億格子点 6億時間ステップ	

粒子法 + メッシュ法

- 粒子加速、個数分布がpower law。高エネルギー粒子をとらえるため粒子数を増やす。
- プラズマ、イオンの慣性長は空間解像度にあたる。領域の広い計算をする。



サブグリッドモデルの課題

- 超新星：エネルギービンに切られたニュートリノ同士と物質の相互作用を陰解放で解く（CG法）。さらに量子力学に基づいたサブグリッドモデルを導入する（詳細は未定）。

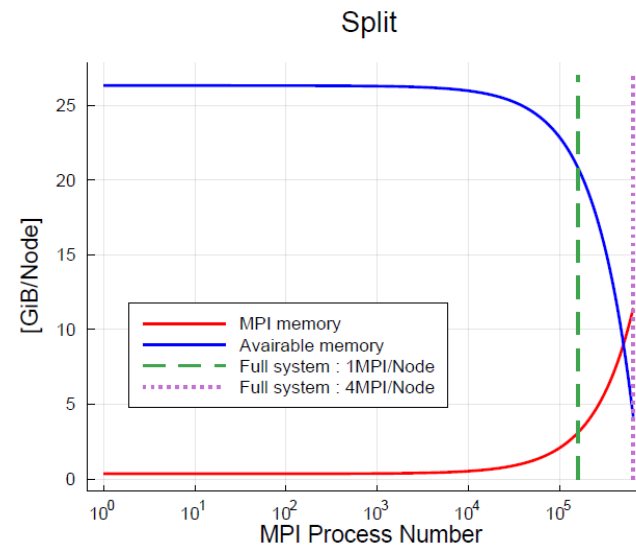
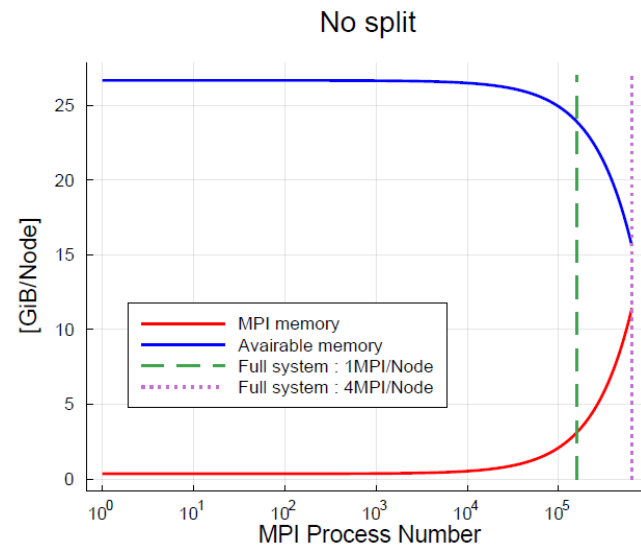
	2022 ~	2024 ~	2026 ~	2028 ~	2030 ~	2032 ~
Beyond-Boltzmann: ニュートリノ 輻射流体計 算による超 新星爆発メカ ニズムの解 明	一般相対論的 ボルツマン輻射流体 超新星シミュレーション			一般相対論的 量子運動論輻射流体 超新星シミュレーション		
	量子運動論方程式 サブグリッドモデルの構築					

富岳の経験活かして、ポスト富岳の計画へ

- 計算で困ったことなどを列挙

粒子法

- 銀河：MPIプロセスが多くなったときに使用可能メモリがたりなくなかった。



粒子 + メ ッ シ ュ

計算科学的な特徴、特にメモリアクセスの特徴。富岳を使ってみて気づいたことなど。

PIC シミュレーションは、ラグランジュ的手法とオイラー的手法のアルゴリズムが組み合わさった手法である。計算コストの大部分は粒子の空間分布からグリッド上での電流密度を計算する部分にある。電磁場配列への局所的なアクセスのため、粒子ソート、キャッシュチューニングが必要である。これら工夫が電流計算ルーチンの SIMD 化の促進を決めるため、計算実行効率に大きく影響する。これら最適化は「京」で有効であったが、「富岳」においてはレジスタスピルが大量に発生するため、そのためのデータのメモリ間の移動がボトルネックとなっている。その結果、実行性能が「京」で 15 %程度あったものが、「富岳」では数%までに低下した。ループを分割するなどの工夫によって 6 %程度まで改善できたが、キャッシュを有効に使えないためか、それ以上の向上が見込めなかった。レジスタが少ないという設計が一般ユーザーに対して最適化を困難にしている。

粒子 + メ ッ シ ュ

位相空間を連続的に運動する粒子と格子点上で定義された電磁場が相互に情報をやり取りするため、必然的にランダムなメモリアクセスが必要になる。粒子配列を空間座標でソートすることによってある程度は問題を軽減できるが、ソート時間とメモリアクセスの高速化とのトレードオフを考慮しなくてはならない。また、並列化においては粒子数が少数のプロセスに集中しないような動的な負荷分散が大規模数値シミュレーションでは必須である。現在用いているアルゴリズムの高速化・洗練化、またアーキテクチャに合わせた最適化などが今後必要になってくる可能性が高い。

メッシュ法

分子雲

「富岳」では、HBM が高いバンド幅を持っている反面、キャッシュのレイテンシが大きく、バンド幅も大きくはないため、メモリ律速の磁気流体計算では性能を出すのが難しい。また、レジスタ数が少ないため命令レベルでの並列性が低いのも性能低下に影響している。さらに、コンパイラの最適化性能が悪く、SIMD を有効にするために手動でのインライン展開やループ成形を余儀なくされている。

太陽

現代の計算機を使う上での困難もある。富岳のように少ないレジスタ・比較的小さい L1、L2 キャッシュのシステムでは磁気流体力学のシミュレーションは性能を出すことが難しい傾向にある。磁気流体力学では単純な流体力学やブラソフ方程式などよりも取り扱う変数が多いことがネックになっている。小さなキャッシュには、多くの変数の三次元データを格納しておくことは困難であるが、磁気流体力学の方程式では様々な方程式に複雑に変数が登場するためにメモリのアクセスを適切に整理する必要がある。ソフトウェアパイプラインを使って、キャッシュアクセスを隠蔽することが肝要であるが、少ないレジスタのために一筋縄ではいかない。富岳のようなシステムでの磁気流体力学方程式のプログラミング方法を業界全体として考案していくことは重要であると考えられる。

サブグリッドモデル

- 基本的にはCG法のような疎行列反転が遅いと困る。ただし、 $B/F = 4$ が欲しいというレベルのものではない。流体計算の問題のように、レジスタの大きさやレイテンシが問題になる。
- 宇宙の計算は密度や温度の桁の幅が広く、どうしてもif文がたくさん必要になる。計算の大部分は単純な計算だが、if文が気軽に使えるとプログラムが容易になる。

スペックテーブルから

			(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)	(h)	(i)	(j)	(k)	(l)	(m)	(n)
課題	アプリケーションの名称	概要と計算手法	問題規模	ケース数	計算時間/ ケース (hour)	演算量/ ケース (EFLOP)	メモリ量/ ケース (PB)	メモリ転送 量/ケー ス(EB)	ストレージ 量/ケー ス(PB)	総演算量 (EFLOP)	要求性能 (PFLOPS)	要求メモリ バンド幅 (PB/s)	要求ファイルI/O性能 (TB/s)	想定する ノード数	通信にか けてよい 時間 (%)	主要な通信 パターン (ブルダウンより選択)
自己重力N体シミュレーションによる宇宙構造形成の解明	GreeM	ツリーと階層的PMのハイブリッド。独立時間刻み	10 ¹⁵ 粒子	1	100	2500000	80	8000	1000	2500000	6944.444	22.22222	50	100万	10	all_to_all
自己重力流体シミュレーションによる銀河形成過程の解明	ASURA-FDPS	ガス、星、暗黒物質からなる系を、N体法による重力計算と流体粒子法による圧縮性流体で解く	恒星スケールを分解する10 ¹¹ 粒子の計算	10	100	1.00E+07	0.1	100	1000	1E+08	27777.78	0.277778	10-100	10000000	10	all_to_all
球状星団におけるコンパクト連星の形成	PeTar	高精度重力N体シミュレーション	恒星100万個、平均質量密度100Msun/pc ³ 、物理時間100億年	6	17000	6200	2.0E-07	1.1	0.009	37200	0.101307	1.8E-05	1	100	10	all_to_all
Beyond-Boltzmann: ニュートリノ輻射流体計算による超新星爆発メカニズムの	一般相対論的量子運動論方程式ニュートリノ輻射流体	超新星爆発メカニズムの解明: 一般相対論的量子運動論方程式によるニュートリノ輻射流体計	配位空間512x192x384、運動量空間24x24x24で1秒の時間発展を計算	3	8700	2.00E+07	4.00E+07	90	60000000	638.5696	1277.139	10	100000	0.3	隣接通信	
相対論的粒子計算による	WumingPIC	particle-in-cell法、差分法、CG法	100000x1000x1000, 10兆個粒子、500万時間ステップ	5	240	10368	1	5000	50	51840	5.787037	5	10000	5	隣接通信	
プラズマ計算による太陽圏・宇宙空間無衝突衝撃波の研究	WumingPIC	particle-in-cell法、差分法、CG法	40000x1000x1000, 1兆個粒子、100万時間ステップ	16	12	500	0.1	500	5	8000	11.57407	11.57407	5	5000	5	隣接通信
銀河構造を考慮した高解像度星間媒質進化シミュレーションによる星形成過程	Athena++	時間空間2次精度磁気流体計算(近似リーマン解法HLLD+CT法)。自己重力(多重格子法)。	1ケースあたり、(16384) ³ の格子数で、10 ⁷ 時間ステップの計算を想定	4	720	3.0E+06	4.4	3.0E+06	100	12000000	1157.407	1157.407	2	4.4E+05	1	隣接通信
輻射磁気流体計算による太陽恒星ダイナモの探求	R2D2	太陽対流層の底から表面までを包括した計算。音速抑制法を用いた圧縮性磁気流体方程式を	2300億格子点について6億時間ステップの積分を行う	1	550	1000000	1.5	500000	3	1000000	505.0505	252.5253	0.2			隣接通信

この表は未チェックです

スペックテールから

- N体はall-to-allが問題になる
- メッシュ法は隣接通信が問題