

# 月周辺プラズマ環境の高並列プラズマ粒子シミュレーション (課題名：月面近傍プラズマ・ダスト環境の高並列プラズマ粒子シミュレーション)

三宅洋平<sup>1</sup>、西野真木<sup>2</sup>、木倉佳祐<sup>1</sup>、臼井英之<sup>1</sup>

1. 神戸大学大学院システム情報学研究科／計算科学教育センター
2. 名古屋大学宇宙地球環境研究所

**概要** 九州大学 HA8000-tc/HT210 を用いた大規模高並列プラズマ粒子シミュレーションにより、月などの非磁化「小型天体」表面とプラズマ間の相互作用を解明する。具体的には、月面に相当する固体表面境界をプラズマ空間内部に設定できる衛星プラズマ環境シミュレーターEMSES を用いて、月縦孔地形や、月面磁気異常と太陽風プラズマの間の相互作用を解析する。これに加えて、独自の動的負荷分散手法 OhHelp を適用した EMSES コードに関して、SIMD-aware なプラズマ粒子計算実装法を探索することで、メニーコアプロセッサ上での高効率計算が可能なシミュレーションコードの開発を目指す。これらの取り組みを通してプラズマ粒子シミュレーション計算のさらなる高度化に向けた技術的知見を得ることを目標とする。

## 1. 研究の目的と意義

本研究の目的は、九州大学 HITACHI HA8000-tc/HT210 を用いた大規模高並列プラズマ粒子シミュレーションにより、人工衛星や月などの「小型天体」と太陽風プラズマ間の相互作用を解明することである。人工衛星や月面などの非プラズマ物体周辺のプラズマは境界領域プラズマと呼ばれ、シーブスや光電子層、電位バリア形成といった著しい空間非一様性を有するため、その全容はいまだに理解されていない。本研究では、近年「かぐや」衛星観測で発見され、将来の着陸探査対象や月面基地建設候補地として注目が集まっている月面上の縦孔に着目し、複雑な形状を有する月固体表面と太陽風プラズマとの電気力学的相互作用を自己無動着に解き進め、縦孔周辺静電環境の 3 次元の描像を明らかにする。また月面の磁気異常と太陽風プラズマの相互作用によって、上空に形成される小型磁気圏境界面付近での電子のダイナミクスを解き明かす。

これに加えて、数値シミュレーション手法としてのプラズマ粒子 (Particle-In-Cell) 計算の高度化にも取り組む。次節に紹介するように、本課題で用いている衛星プラズマ環境シミュレーターEMSES は領域分割に基づく Flat-MPI 並列化が施されており、分散メモリ型並列計算機による大規模計算が可能である。また単純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常に問題となるが、EMSES にはこれを解決するための動的負荷分散技法 OhHelp が実装されており、これまでに「京」コンピューター、九州大学、京都大学、名古屋大学の大規模並列計算機システム上で高効率の並列計算を行ってきた実績がある。当該シミュレーションコードのさらなる性能向上のために、共有メモリ並列化や SIMD-aware な計算アルゴリズムの開発などアーキテクチャ階層を意識した最適化が必要である。本レポートではプラズマ粒子計算のカーネル演算である電流計算ルーチンの SIMD 最適化の取り組みも紹介する。

## 2. 計算手法の概要

衛星プラズマ環境シミュレーターEMSES は 3 次元電磁粒子シミュレーション法を基本とし、これに固体表面の内部境界の扱いを導入したものとなっている[1]。計算空間は格子によって離散化されており、電磁場と電流／電荷密度場はオイラー量として格子点上に定義される。一方、プラズマ分布関数は連続的な位置座標を取りうる代表粒子によって記述される。そしてこれらの粒子と場の量は Particle-In-Cell と呼ばれる手法により互いに結び付けられる。基礎方程式としては、電磁場発展を記述する Maxwell 式と荷電粒子ダイナミクスを記述する運動方程式が用いられ、これらを

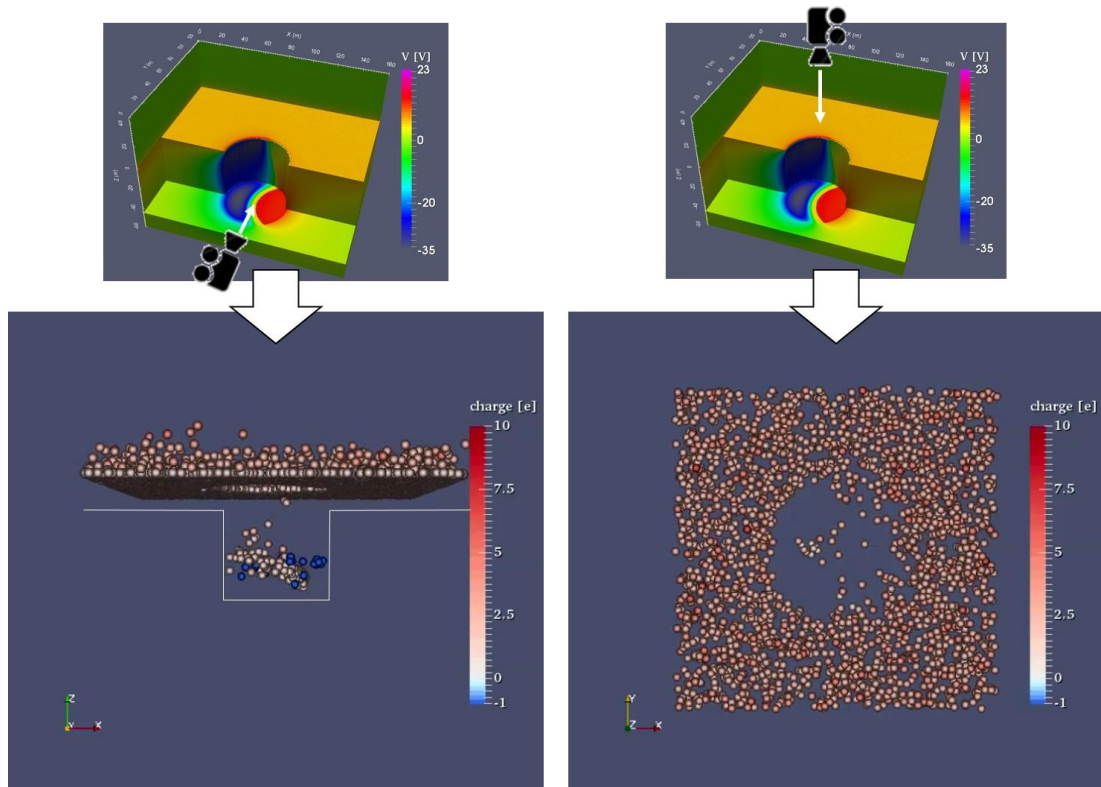


図 1: 月縦孔近傍の帯電ダスト挙動のテスト粒子解析シミュレーション。

相互に解き進めることによりプラズマと電磁場間の相互作用を自己無動着に再現する。

EMSES の分散メモリ並列は、均等領域分割に基づいており、各 MPI プロセスは分割された各部分領域とそこに含まれる粒子に関する処理を担当する。しかしこの単純な領域分割法のみ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。そこで 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 [2]。これに加えて、OhHelp 特有の粒子移送パターンを考慮して低コストな MPI 通信方式を考案し、さらなる最適化を行った [3]。

### 3. シミュレーション成果

#### (1) 月縦孔周辺プラズマ・ダスト環境の大規模全粒子シミュレーション

「かぐや」衛星による地形カメラ観測により、月面に特徴的な縦孔構造が発見されている。この

縦孔構造や地下空洞を直接探査する UZUME 計画が立案されている中、将来の着陸探査への影響を知る上でも縦孔周辺プラズマおよび帯電ダスト環境を事前評価することは重要である。そこで OhHelp 適用済の全粒子プラズマシミュレーションコード EMSES を、月面昼側の月縦孔周辺プラズマ環境の定量評価に適用した。

本解析では、Marius の丘に発見されている縦孔のデータを参考に、そのサイズを直径 50 m、深さ 45 m と定め、その上空も含めて、おおよそ 200 m×200 m×1 km の空間を計算領域とし、最大で HA8000-tc の 128 ノードを利用した計算により、①縦孔近傍のプラズマ分布および電気環境、②その中での帯電ダストの挙動を明らかにした。

一般的にプラズマに固体表面が接している状態では、プラズマ荷電粒子が表面に捕捉されることにより、帯電が生じる。縦孔内部では、日向と日陰で帯電値が大きく異なり、大きな電位差 (40 V 程度) が生じている。これは、日照面では先述した光電子放出により、正に帯電するのに対し、日陰面からは光電子は放出されず、周辺を浮遊する

電子の一部が表面に付着することで負に帯電するためである[4]。

この帯電現象は月面のみならず、月表層に堆積している微小な塵であるダストに対しても発生する。帯電したダストは、月縦孔周辺の特異な電気環境のもとで浮遊し、特徴的なダイナミクスを示すことが予想されるが、こうした帯電ダストが月面探査用のローバーに付着することにより、機器の故障などの障害を引き起こす恐れがある。そこでダストの挙動を明らかにすることを目的に、テスト粒子シミュレーション解析を実施した。

図 1 に縦孔周辺でのダスト分布のスナップショットを示す。初期状態ではダストは月面上に堆積しているという仮定の下での計算であるが、静電気力の作用により、ダストが浮遊していることが図から確認できる。ダストの持つ電荷は日向では正、日陰では負であるが、一方で日向および日陰の月面からはそれぞれ上向きおよび下向きの電場が発生しているため、ダストが浮かび上がる向きに静電気力が作用する。図からは判断できないが、この静電気力と下向きの重力との釣り合いにより、ダストが上下に振動する運動が確認されている。現在はダストの直径と質量をある一定値に固定した計算であるが、今後はダストの直径に分布があることを想定した計算を実施し、平均的なダスト密度分布を算出することを目指す。

## (2) 月磁気異常 - 太陽風プラズマ相互作用の大規模全粒子シミュレーション

上述の解析は、月面上空およそ 1 km までの描像であるが、より上空では太陽風プラズマと月に局所的に存在する磁気異常の間の電磁的相互作用が電気環境の決定に大きな役割を果たす。そこで、Reiner Gamma と呼ばれる月磁気異常をモデルケースとして採用し、プラズマ粒子シミュレーションによる解析を実施した。ダイポール中心から磁気圧と太陽風動圧が釣り合う点までの距離を磁気異常の代表長  $L$  とすると、磁気異常ではその代表長  $L$  が太陽風電子のジャイロ半径よりも十分大きく、イオンのジャイロ半径より小さい。このよう

な条件下では、太陽風プラズマと磁気異常磁場間の相互作用により小型磁気圏が形成される。また磁気圏境界層における太陽風電子とイオンの磁場に対する応答差に起因する静電界が磁気圏形成に重要な役割を果たす。

本シミュレーションでは、特に磁気圏境界層における電子ダイナミクスによって決定づけられる電流構造に着目して、詳細解析を実施した。シミュレーション結果から、境界層低緯度領域においては朝側から夕方側に向かう電子ドリフト運動が顕著であるが、中高緯度領域においては逆に夕方側から朝側に向かう電子の流れが主に見えた。このような二層の電子ドリフト運動の構造により磁気圏層間側、すなわち磁気異常上空の南北両半球において電子電流の渦的構造が見られた。特に赤道面における電子電流には、電子-イオン間の荷電分離によって発生する電場と磁気異常磁場による  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  ドリフトと、磁気圏境界層付近での電子圧力の急速な減少に伴う反磁性ドリフト電流が大きな役割を果たしていることが明らかとなった。これらの結果は小型磁気圏の構造、ひいてはその周辺でのイオンのダイナミクスにも大きく影響を及ぼすという点で、月プラズマ科学上、きわめて重要な成果といえることができる[5]。

## 4. 計算コードの高度化および性能評価

OhHelp 適用済プラズマ粒子コードのさらなる高度化に向けた検討として、計算負荷の大部分を占める電流計算に着目し、SIMD ベクトル化を促進する実装法を探求した。Xeon Phi など近年、普及が進むメニーコアプロセッサにおける SIMD 演算機構は、NEC SX シリーズに代表されるようなベクトル計算機におけるパイプライン処理に概念上は類似しているが、リストベクトルのような強力な機構を持たないことや、ベクトルレジスタの数が少ないなどの理由により、複雑なデータアクセスパターンを有するアプリケーションへの適用性は必ずしも高くない。また SIMD 命令発行の可否は最終的にはコンパイラの判断に委ねるしかないので、カーネル計算部のプログラム構造やデー

タ構造を変更しながら、SIMD 命令が発行可能な実装を見つけ出す、といった試行錯誤を繰り返すこととなる。

電流計算では、各粒子がつくる電流要素を、それらの位置座標に隣接する格子点上の電流格子点配列に配分する。この粒子位置は実行時まで未知数であるため、格子点配列へのアクセスはしばしばランダムになる。

Xeon Phi は 512 bit 幅の SIMD ベクトルを持つため、原理上は 8 つの粒子を同時に処理することが当面の目標であるが、従来のプログラムにおいては、ループ内のプログラム構造が複雑すぎるとして、Intel コンパイラによる SIMD 命令発行がなされていなかった。この主な要因は、電磁場や電流配列に対する間接的なアクセスにある。粒子ループの各繰り返しにおいて、速度更新の際には粒子に隣接する 8 格子点分の電磁場ベクトル (6 成分)、すなわち 48 成分の  $E(\delta(x_p))$  や  $B(\delta(x_p))$  を参照する。ここで  $x_p$  は浮動小数点であらわされた粒子位置、関数  $\delta$  はそれを周辺の 8 格子点に整数化する処理を表す。同様に電流計算においては、粒子が存在するセルの辺上に定義される電流ベクトル 12 成分に参照書き込みが行われるが、それを粒子移動前後それぞれについて行う必要があるため、計 24 成分の  $J(\delta(x_p - v_p \Delta t))$  および  $J(\delta(x_p))$  にアクセスする必要がある。ここで  $v_p$  と  $\Delta t$  はそれぞれ粒子速度と時間ステップ幅を表し、 $(x_p - v_p \Delta t)$  により粒子移動前の位置を示している。ここでコンパイラは関数  $\delta$  によって計算されるインデックスに規則性を見つけることができないため、8 つの粒子それぞれに対する  $E(\delta(x_p))$ 、 $B(\delta(x_p))$ 、 $J(\delta(x_p - v_p \Delta t))$ 、そして  $J(\delta(x_p))$  から構成される SIMD ベクトル  $48 + 24 = 72$  本をレジスタに登録することで SIMD 命令発行を試みる。しかし、現実には Xeon Phi で登録可能な最大ベクトル数は 32 であるため最終的には SIMD 命令発行が不可であると判断されてしまうのである。

この問題を解決するためには、次の 2 つの対策をとればよいと考えられる [6]。

A) 参照書き込みを行う格子点を 8 つの粒子の間

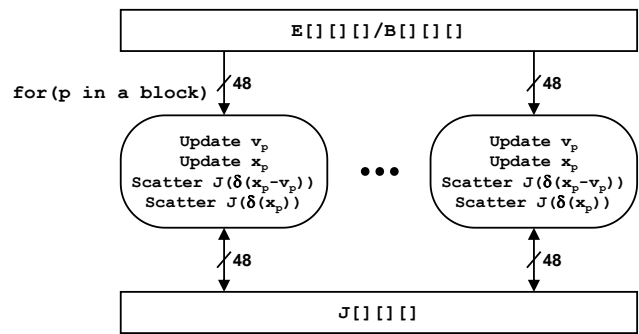


図 2: SIMD 最適化前の PIC カーネルループ。

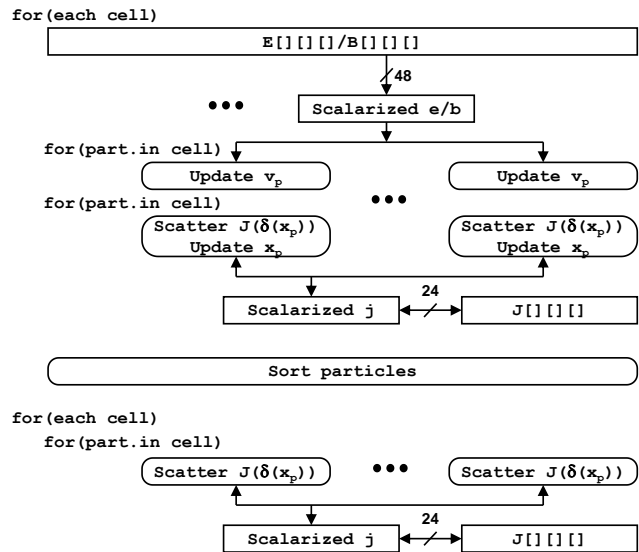


図 3: SIMD 最適化後の PIC カーネルループ。

で共通化する。

B) A がコンパイラにとって明らかになるよう、電磁場や電流の参照書き込みにスカラー変数を用いる。

A の対策は、粒子の所属セルをキーとしたソーティングで実現される。ここで、粒子ループ中では粒子位置更新が行われるため、その際に所属セルが変化する可能性があり、その場合は A が満たされなくなる点に注意する必要がある。そこで従来の長大な粒子ループを、速度更新、位置更新前の電流計算、位置更新後の電流計算という 3 つのループに分割することで、各ループの中で常に A を満たすことが保証される。

B については、これまで 1 重の粒子ループであったものを、セルに関する外側ループとそのセルに所属する粒子の内側ループから成る、2 重ループ構造に変更する。これによりセルループの内側では、 $\delta(x_p)$  は共通であるから、 $E(\delta(x_p))$ 、 $B(\delta(x_p))$

を  $e$  や  $b$ 、 $J(\delta(x_p))$  を  $j$  といったスカラー変数にコピーすることが可能である。内側での粒子ループでは、元の配列ではなく、 $e$ 、 $b$ 、そして  $j$  を対象に計算を実施する。これらを踏まえ、変更前後のループ構造を表したのが、図 2 および 3 である。このような変更を施すことにより、PIC 計算のカーネル部分である粒子速度位置更新、電流計算について、コンパイルによる SIMD 命令発行が可能となることを確認した。

現在、上述の最適化法の鍵となる、厳密な粒子ソーティング部分について、実装を進めている。これが完了し、正しい動作が確認され次第、性能測定によって SIMD 最適化の効果を評価する予定である。実際には、ソーティングはその原理上、完全な SIMD 最適化実装が極めて困難な処理であり、性能のボトルネックになり得る点を十分に認識している。このため、ソーティングを SIMD 処理可能な部分（粒子へのラベリング）と不可能な部分（メモリ上でのデータの並べ替え）を仕分けし、SIMD 実行可能部分の割合を最大化するような実装を検討中である[7]。

## 5. まとめと今後の展望

先端的計算科学研究プロジェクトによる九州大学 HA8000-tc/HT210 計算機資源を活用して、月周辺のプラズマ環境、より具体的には①月縦孔周辺の特徴的な電気環境、②縦孔電気環境下での帯電ダストの挙動、③月磁気異常と太陽風プラズマの相互作用によって形成される小型磁気圏境界における電子ダイナミクスの役割、に関して、重要な知見を得られた。今後、月上空 1 km までの物理描像である①および②の知見と、上空数 10~100 km で生起する③の物理描像の間の関連性を解明することにより、月プラズマ科学の包括的な理解が得られることが期待される。

また計算科学的観点からは、OhHelp 技法により既に分散メモリ並列に対応した EMSES シミュレーターについて、さらなる計算コードの高度化を目指して SIMD 最適化の検討を行った。プラズマ粒子シミュレーション特有の演算フローとデー

タアクセスパターンを考慮することにより、カーネル計算部分の SIMD ベクトル化を促進できることが明らかとなった。今後は、これまでに蓄積したノード間並列、ノード内並列、SIMD ベクトル化の各技術要素を有機的に統合することで、エクサスケール時代のメニーコア型スーパーコンピュータに対応可能なプラズマ粒子シミュレーション手法を確立していきたい。

## 6. 文献

### (1) 参考文献

- [1] Miyake and Usui, Phys. Plasmas, 16, 062904, 2009.
- [2] Nakashima et al., Proc. 23rd ICS, 90-99, 2009.
- [3] Miyake and Nakashima, Proc. 11th IEEE ISPA, 2013.
- [6] Nakashima, Computers & Electrical Engineering, 46, 81-94, 2015.

### (2) 当該プロジェクトによる研究成果

- [4] Miyake, Y. and M. N. Nishino, Electrostatic environment near lunar vertical hole: 3D plasma particle simulations, Icarus, Vol. 260, pp. 301-307, 2015.
- [5] Usui, H., T. Matsubara, Y. Miyake, M. N. Nishino, and J. Wang, Electron dynamics in the boundary current of a mini-magnetosphere above a lunar magnetic anomaly, to be submitted.
- [7] Nakashima, H., K. Kikura, Y. Summura, and Y. Miyake, Large Scale Manycore-Aware PIC Simulation with Efficient Particle Binning, submitted.