

令和 2 年 6 月 4 日現在

機関番号：14401

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2016～2019

課題番号：16K13786

研究課題名(和文) 先進的手法を用いた宇宙流体シミュレーションの高速化

研究課題名(英文) Accelerating astrophysical magnetohydrodynamic simulations using advanced techniques

研究代表者

富田 賢吾 (Tomida, Kengo)

大阪大学・理学研究科・招へい教員

研究者番号：70772367

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では研究代表者が米国Princeton大学と共同で開発しているAthena++コードの高速化と、自己重力ソルバなど新しい物理過程の実装に取り組んだ。動的スケジューリングによる新しい並列化や、現代的なハードウェアに合わせた最適化を行い、50万スレッド以上の非常に大規模な並列計算であっても高い絶対性能と並列性能を両立することに成功した。またFull Multigrid法に基づく自己重力ソルバを実装し、高速な大規模並列自己重力流体力学計算を可能にした。開発したコードやドキュメントはインターネット上で公開し、これを用いた講習会やユーザーズミーティングも行っている。

研究成果の学術的意義や社会的意義

Athena++は輻射磁気流体シミュレーションコードであり、インターネット上で広く一般に公開している。自己重力ソルバを始めとしてAthena++は宇宙物理学の幅広い問題に共通する基礎物理過程を幅広くサポートしており、コードを公開することでコミュニティに貢献している。また本コードを用いた講習会やユーザーズミーティングも開催しており、若手研究者の育成にも重要な役割を果たしている。また優れたシミュレーションコードは現在の宇宙物理学研究のインフラストラクチャと言えるものであり、国際的な共同研究の基盤ともなる。

研究成果の概要(英文)：Athena++ is a new public magnetohydrodynamic simulation code which I develop in collaboration with Princeton University and others. In this project, I optimized the code to achieve better performance and also implemented new physics modules including self-gravity. The code achieves good performance and scalability even with more than half a million threads thanks to the new parallelization based on dynamical scheduling as well as thorough optimization to modern architectures. I implemented a new self-gravity solver based on the Full Multigrid method, which is very efficient and scalable. The code and documentation are publicly distributed on the Internet, and we held schools on computational astrophysics and a users' meeting.

研究分野：シミュレーション宇宙物理学

キーワード：宇宙物理学 シミュレーション 磁気流体力学 偏微分方程式

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

宇宙物理学のシミュレーションでは磁気流体力学や自己重力、輻射輸送など様々な物理過程を取り入れる必要がある。この中で特に自己重力や輻射輸送は重要な物理過程であるが、これらは情報が局所的ではなく大域的に伝わるため、計算自体に比べて通信のコストが大きく、大規模な並列計算は困難であった。一方、近年、Intel Xeon Phi や GPU 等の従来よりも CPU と異なる新しい技術がスーパーコンピュータに搭載されつつある。また並列計算におけるソフトウェア面においても新しい技術が提唱されている。今後大規模化する数値計算において高い性能を発揮するには、並列化の困難を克服してこのような先進的な技術を積極的に取り入れていく必要がある。今後自己重力や輻射輸送を含む宇宙物理学における大規模シミュレーション研究を進展させるためには、Xeon Phi や GPU のような先進的なハードウェアと新しいソフトウェア技術を組み合わせた新しいシミュレーションコードが必要である。

研究代表者は米国 Princeton 大学のグループと共同で新しい公開磁気流体シミュレーションコード Athena++コードの開発に取り組んできた。このコードは前身である Athena コードを現代的なスーパーコンピュータに合わせて全面的に再設計したものであり、更に新たな物理過程を取り入れることでより幅広い宇宙物理学の問題に適用することを目指している。

2. 研究の目的

本研究では Athena++コードを用いて、より高い絶対性能と大規模並列計算に対応できるスケールビリティを実現するため、新しいハードウェア・ソフトウェア技術を検討・導入する。また、特に自己重力や輻射輸送などの大域的な情報が必要となる問題を高速に計算するため、Multigrid 法に基づく新たな偏微分方程式ソルバを開発する。

3. 研究の方法

本研究では Athena++コードの高速化のため、ハードウェア技術としては特に（本研究計画開始時では有力な次世代技術であり、また日本最速のスーパーコンピュータ Oakforest-PACS にも搭載されていた）Xeon Phi に着目し、大規模計算を行うための最適化を行う。また、Unified Parallel C や XcalableMP 等の並列計算のための新しいソフトウェア技術の比較検討を行い、効果が見込めるものはコードに導入していく。

また、高速計算の題材として、Athena++の中心部である磁気流体力学部に加え、新たに Multigrid 法に基づく自己重力ソルバを実装する。Multigrid 法は楕円型だけでなく放物型・双曲型の偏微分方程式にも適用可能であり、また格子の分解能を変えながら緩和法を適用するという性質上解適合細分化格子（AMR）との相性も良いため、AMR や他の物理過程への対応にも取り組む。

4. 研究成果

まず Xeon Phi を用いた大規模計算を行うため、Athena++コードの最適化を行った。Athena++はもともと Intel 系の CPU に対して最適化されていたが、Intel Advisor 等の最適化支援ツールを駆使して高速化を行った。特に、OpenMP による共有メモリ並列化について、従来は空間分割したブロック内のループ単位で並列化していたが、これをブロック単位のより粒度の粗い並列化に変更し、スレッド並列の効率を高めた。またこれにより副次的に、コード開発者が個々の物理モジュール内で OpenMP による並列化を実装せずとも自動的に並列化することが可能となった。またメモリアクセスの最適化やブロックの格納・探査方法を変更することにより、大規模計算時の実行性能を大幅に向上させることができた。これらにより Oakforest-PACS 上の Xeon Phi を用いた流体力学及び磁気流体力学シミュレーションについて、2048 ノード（524288 スレッド）という非常に大規模な並列計算においても 84%以上の良好な弱スケールングと、宇宙物理学の同種の公開コードと比べて高い絶対性能を実現することができた（図 1）。

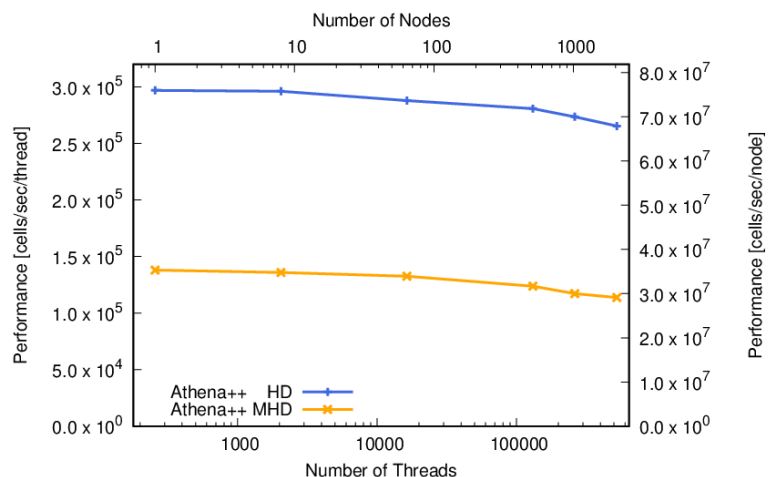


図 1 : Oakforest-PACS 上での流体力学 (青) および磁気流体力学 (黄) の弱スケールングテストの結果。流体力学では 2048 ノードで 87%、磁気流体力学では 84% という高い並列性能を実現した。

次に、Unified Parallel C や Xcalable MP 等の新しいソフトウェア技術の検討を行った。これらは区分大域化アドレス空間 (Partitioned Global Address Space : PGAS) と呼ばれる手法で、従来の MPI による並列化と比べて実装を容易にし、場合によってはより効率的な並列化が行える可能性がある。しかし検討の結果、これらは単純な直方体格子を用いた空間分割による並列化には親和性が高いものの、Athena++ に実装されている AMR のような複雑な通信パターンが必要になる場合には必ずしも適していないことが分かった。また (環境や設定にもよるが) 実際の通信は MPI を用いて行われる場合も多く、大きな速度向上は期待できないということもわかった。そのため当座はこれらの利用は見送ることとした。しかし、その後も調査は継続し、GPU を含めたマルチプラットフォームに対応しつつ高い性能を実現するために、Kokkos ライブラリ (<https://github.com/kokkos/kokkos>) を用いた実装の検討を開始した。

自己重力について、まず一様格子上での Multigrid ソルバを実装した。Jacobi 法や Gauss-Seidel 法などの緩和法は短波長のエラーはすぐに減衰するが、長波長のエラーを減衰させるには多くの回数のイテレーションが必要になる。これに対し Multigrid 法は格子の分解能を変えながら緩和法を適用することで、全ての波長に対して一様にエラーを減衰させることができ、非常に高速に収束することが知られている。通常の Multigrid 法は初期推定値を与えて複数回イテレーションを行うことで解を得るが、本研究では Full Multigrid 法を実装した。この手法は初期推定値を必要とせず、また一度のイテレーションでほぼ打ち切り誤差にまで到達するという非常に強力な手法である。これらを実装した結果、数千並列でも磁気流体部の 10-20% 程度の時間で自己重力が計算できる非常に高速なソルバを実現することができた (図 2)。

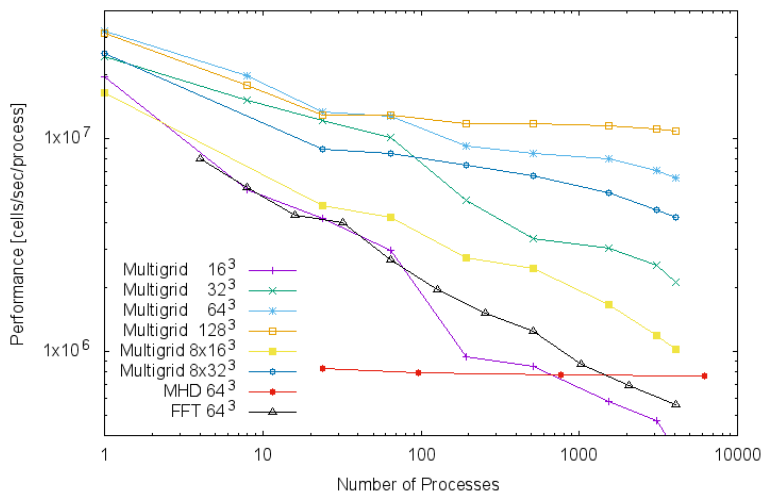


図 2 : 様々な問題サイズに対する自己重力ソルバの弱スケール性能。赤線がプロセスあたり 64³ セル割り当てた磁気流体部の性能に対し、同サイズの自己重力計算 (水色) は 4000 並列でも約 8 倍の高性能を発揮している。言い換えれば、磁気流体計算の 10-20% の追加コストで自己重力を計算に導入することができる。

更に、このソルバの AMR への拡張も行い、AMR 上でも非物理的な構造が生じない mass-conservation formula による離散化を取り入れて正確に計算できるコードを実装した。AMR でも Full Multigrid 法を実装したが、AMR 上では一回では期待する精度には達しないことが分かった。これは異なる解像度のレベル間の境界において、どうしても離散化に起因するエラーが生じることが原因である。同種の問題は他のコードでも報告されており、これは手法の限界であると考えて複数回のイテレーションによって精度を改善することとした。これにより多少計算コストはかかるものの安定した計算を実現した (図 3)。

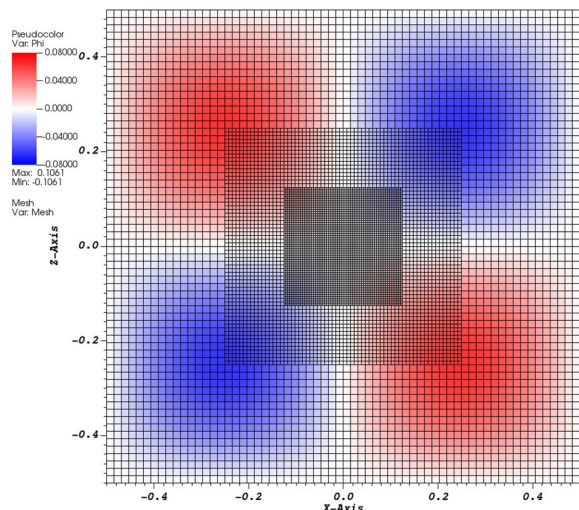


図 3 : AMR 上での自己重力ソルバによる計算結果。異なる解像度の格子間でも滑らかに解が接続されている。

Athena++ を用いたコミュニティへの数値シミュレーション研究の教育・普及活動も行っている。国立天文台や中国上海天文台、インド・ハイデラバードでのウィンタースクールで Athena++ を用いた講習会を実施し、参加者から好評を得た。また、2019 年 3 月にははじめての Athena++ のユーザー・開発者ミーティングを米国ラスベガスで開催し、約 70 人も参加者を得た。

更に、Athena++ コードを総括するまとめの論文も執筆し、The Astrophysical Journal Supplement 誌に投稿した (2020 年 5 月にアクセプトされた)。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 3件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Iwasaki Kazunari, Tomida Kengo, Inoue Tsuyoshi, Inutsuka Shu-ichiro	4. 巻 873
2. 論文標題 The Early Stage of Molecular Cloud Formation by Compression of Two-phase Atomic Gases	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Astrophysical Journal	6. 最初と最後の頁 6~6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3847/1538-4357/ab02ff	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kimura Shigeo S, Tomida Kengo, Murase Kohta	4. 巻 485
2. 論文標題 Acceleration and escape processes of high-energy particles in turbulence inside hot accretion flows	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Monthly Notices of the Royal Astronomical Society	6. 最初と最後の頁 163~178
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1093/mnras/stz329	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Takasao Shinsuke, Tomida Kengo, Iwasaki Kazunari, Suzuki Takeru K.	4. 巻 857
2. 論文標題 A Three-dimensional Simulation of a Magnetized Accretion Disk: Fast Funnel Accretion onto a Weakly Magnetized Star	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Astrophysical Journal	6. 最初と最後の頁 4~4
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3847/1538-4357/aab5b3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ono Tomohiro, Muto Takayuki, Tomida Kengo, Zhu Zhaohuan	4. 巻 864
2. 論文標題 Parametric Study of the Rossby Wave Instability in a Two-dimensional Barotropic Disk. II. Nonlinear Calculations	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Astrophysical Journal	6. 最初と最後の頁 70~70
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3847/1538-4357/aad54d	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Takasao Shinsuke, Tomida Kengo, Iwasaki Kazunari, Suzuki Takeru K.	4. 巻 878
2. 論文標題 Giant Protostellar Flares: Accretion-driven Accumulation and Reconnection-driven Ejection of Magnetic Flux in Protostars	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Astrophysical Journal	6. 最初と最後の頁 L10 ~ L10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3847/2041-8213/ab22bb	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hu Xiao, Zhu Zhaohuan, Okuzumi Satoshi, Bai Xue-Ning, Wang Lile, Tomida Kengo, Stone James M.	4. 巻 885
2. 論文標題 Nonideal MHD Simulation of HL Tau Disk: Formation of Rings	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Astrophysical Journal	6. 最初と最後の頁 36 ~ 36
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3847/1538-4357/ab44cb	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計17件 (うち招待講演 10件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 Kengo Tomida
2. 発表標題 Formation of Protostars and Protoplanetary Disks- theoretical aspects of Core2Disk
3. 学会等名 FROM PRESTELLAR CORES TO SOLAR NEBULAE (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kengo Tomida
2. 発表標題 Formation of circumstellar disks and non-ideal magnetohydrodynamic effects
3. 学会等名 High Energy Density Laboratory Astrophysics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kengo Tomida
2. 発表標題 Athena++: a New MHD Simulation Code with Adaptive Mesh Refinement
3. 学会等名 The 8th East Asian Numerical Astrophysics Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kengo Tomida
2. 発表標題 MHD Simulations with Athena++: from Molecular Clouds to Protoplanetary Disks
3. 学会等名 Max Planck Princeton Center Workshop 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kengo Tomida
2. 発表標題 Inside Athena++
3. 学会等名 Athena++ Users and Developers Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kengo Tomida
2. 発表標題 Global Non-ideal MHD Simulations of Protoplanetary Disks with Athena++
3. 学会等名 国立天文台CfCAユーザーズミーティング
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 富田賢吾、岩崎一成、高棹真介、奥住聡、James M. Stone
2. 発表標題 Athena++による磁気流体シミュレーション
3. 学会等名 ポスト「京」時代の天体形成シミュレーション研究会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 富田賢吾
2. 発表標題 原始惑星系円盤の形成と初期進化
3. 学会等名 宇宙生命計算科学連携拠点第3回ワークショップ(招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 富田賢吾、James M. Stone
2. 発表標題 Athena++による大規模宇宙磁気流体シミュレーション
3. 学会等名 PLASMA2017(招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 富田賢吾
2. 発表標題 Development of Full-Multigrid Gravity Solver for Athena++
3. 学会等名 国立天文台CfCAユーザーズミーティング
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kengo Tomida, Kazunari Iwasaki, James M. Stone
2. 発表標題 Development of a Full-Multigrid Gravity Solver for Athena++
3. 学会等名 日本天文学会 2018年春季年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 富田賢吾
2. 発表標題 Current Status of Athena++
3. 学会等名 国立天文台CfCAユーザーズミーティング
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 富田賢吾、高棹真介、岩崎一成、James M. Stone、Zhaohuan Zhu、Xuening Bai
2. 発表標題 MHD Simulations of Protoplanetary Disks with Athena++
3. 学会等名 ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 第1回 公開シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kengo Tomida
2. 発表標題 Formation and Early Evolution of Protoplanetary Disks
3. 学会等名 Workshop on Star Formation (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kengo Tomida
2. 発表標題 Formation and Early Evolution of Circumstellar Disks
3. 学会等名 meeting in on Star Formation (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Tomida, K. Iwasaki, S. Takasao, S. Okuzumi, S. Mori, T. K. Suzuki
2. 発表標題 Global Non-ideal Magnetohydrodynamic Simulations of Protoplanetary Disks
3. 学会等名 CCS International Symposium 2019 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 富田賢吾
2. 発表標題 Multigrid gravity solver on AMR for Athena++
3. 学会等名 令和元年度 国立天文台 天文シミュレーションプロジェクト ユーザーズミーティング
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

Athena++ http://princetonuniversity.github.io/athena/ Athena++ 日本語サポートページ https://www.astr.tohoku.ac.jp/~tomida/athena/

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 協力者	ストーン ジェームズ (Stone James)	プリンストン大学・Department of Astrophysical Sciences・Professor	Athena++コードの共同開発