

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 27 年 5 月 29 日現在

機関番号：13901

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2012～2014

課題番号：24654127

研究課題名(和文)GPUを用いた高速プラズマ粒子シミュレーション手法の研究

研究課題名(英文)Study for High-speed computing for plasma particle-in-cell simulation by using GPU

## 研究代表者

齊藤 慎司 (Saito, Shinji)

名古屋大学・理学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：60528165

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GPUを用いたプラズマ粒子シミュレーションの高速演算法を開発し、将来的に必ず必要となる大規模プラズマ粒子シミュレーション計算の高速化を目的としている。GPU演算のボトルネックとなることは、ホスト側(CPU側)とデバイス側(GPU側)とのデータ転送である。このボトルネックを解消するため、演算データを複数のブロックに分割し、ブロックごとにデータ転送と演算をオーバーラップさせることで転送時間の隠蔽を実現した。この手法によりCPU1コアに比べて8倍程度のGPU高速演算を実現し、これを用いてプラズマ波動非線形発展に関する研究成果を挙げた。

研究成果の概要(英文):The objective of this study is to develop method to accelerate calculations for plasma particle-in-cell simulation by using GPU that is many-cores device connected by PIC-Express. The particle-in-cell simulation method is expected to require more and more computer resources in near future. The bottleneck for GPU is the send-and-receive of data between the host (CPU) and the device (GPU). In order to reduce the the bottleneck, simulation data for calculation is divided into several blocks. By using the divided blocks, the data transfer between CPU and GPU and data processing in the GPU can be done simultaneously. This method reduces the data transfer time during the calculation of the particle-in-cell simulation. This method achieved 8-times faster computing than the calculation by a core of the CPU. By using the GPU-Particle-in-cell simulation, I cited results related to a nonlinear development of waves in plasma.

研究分野：宇宙プラズマ物理

キーワード：GPU プラズマ粒子シミュレーション

1. 研究開始当初の背景

磁気流体(MHD)近似が成立する大規模構造を扱うプラズマ物理と運動論的性質が支配する粒子スケールでのプラズマ物理との非線形的な相互作用を「クロススケールカップリング」と言う。このプロセスを1つのモデルで統一的に議論することはこれまで計算量の問題で困難であったが、近年のコンピュータ性能の向上により実現が可能になりつつある。統一的に議論する1つの手法は、運動論効果を扱う粒子シミュレーション手法を用いて運動論的スケールからMHD構造にまで領域を広げた大規模な計算を行うことである。しかし粒子シミュレーションには、扱う荷電粒子数密度(超粒子密度)の平方根の逆数に比例した数値的なノイズが現れる。クロススケールカップリング下ではMHD的な大振幅波動の中で運動論的な小振幅波動を扱う必要があるため、後者の波動が数値的なノイズでかき消されないよう大量の荷電粒子を扱う必要がある。Message Passing Interface (MPI)による並列演算により大規模計算実行は可能であるが、この中にはロードバランスの問題(どのようにして同じ計算量を振り分けるか)と共に、計算メモリをフルに使うと現実的な計算時間で結果を得られないという問題点がある。本研究ではこの後者の問題に着目し、近年注目され始めているGraphics Processing Units (GPU)を用いた粒子シミュレーション計算の高速化を行う。

2. 研究の目的

本研究ではGPUを用いたプラズマ粒子シミュレーション手法の開発を行い、GPUを用いた効率の良いプラズマ粒子シミュレーション実行を目的とする。また、それを用いたプラズマ乱流非線形発展に関する研究を行い、開発成果を実研究へフィードバックしプラズマ乱流物理研究の成果を挙げる。

GPUを用いたシミュレーションコード開発を通して、これまで実時間の問題で実現が困難と考えられていた大規模プラズマ粒子シミュレーション計算の高速化実現を狙う。その上でこれまでの並列計算システムとの比較を行い、GPU利用の有効性を考察し、GPUを用いた粒子シミュレーション計算に対する将来的な有効性を見定める。また、GPUによる計算はメニーコア演算の概念を基盤としていることから、これによる演算手法研究は将来的に訪れる超並列スーパーコンピュータ上での高効率演算手法の基礎となり得ると考えられ、このような超並列演算手法開発への貢献も目的の1つとして挙げる。

3. 研究の方法

研究期間中において、得に以下の3点に注目して行った。

- (1) 粒子シミュレーション手法での GPU

高効率演算方法の構築

- (2) コード開発・チューニング
- (3) 性能評価

上記を実施するために、GPUを搭載したマルチコア高速計算機にPGI-Fortranをインストールし、研究・開発を行った。

4. 研究成果

本課題において開発したGPUを用いた粒子シミュレーション手法に加え、開発された計算コードを用いて実研究で挙げた成果について以下に示す。

(1) GPU-PIC 計算手法について

GPUを用いた大規模計算の手法について、最も致命的なボトルネックとしてGPU(デバイス)とCPU(ホスト)の間でのデータ転送による遅延が挙げられる。ホスト側からデバイス側へのデータ転送はPCI-Expressを介して行われており、ホスト内蔵のメモリからのデータ転送に比べ、非常に低速となっている。そのため、デバイス内に内蔵しているメモリ量よりも大きなメモリを要するシミュレーションを実行する際、常にホスト・デバイス間のデータ転送が発生し、計算の全体効率のボトルネックとなる。

本課題ではデータ転送による遅延を解消するため、非同期データ転送により、デバイス上での計算中に必要なデータを転送して行くことにより、データ転送時間の隠蔽手法を開発した。図1において、その概要を示す。

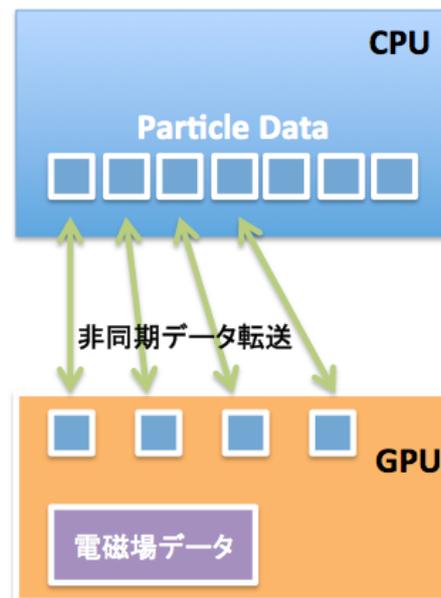


図1: CPU (ホスト) と GPU (デバイス) 間のデータ転送概要図。デバイス側に複数のデータブロック受け入れ領域を設け、ホスト側からその領域へ粒子データを非同期転送する。ブロック単位での計算を行いその完了後、非同期で粒子データをCPUへ返し、その後別のブロックのデータを非同期で受け取りブロック単位での計算を繰り返す。

プラズマ粒子シミュレーションはMaxwell方程式と荷電粒子の運動方程式を同時に解き、

その時間発展を追跡する。粒子データは荷電粒子の速度・位置を1つ1つ保持する必要があるため、一般的に電磁場の空間グリッドデータ数より非常に大きくなる傾向がある。このため、電磁場データはGPUのメモリへ常駐させることが出来る一方で、粒子データはCPU側と常に通信を行う必要がある。このデータ転送を非同期で行うことでデータ転送時間の隠蔽を行う。このためにはデータの転送とGPU内の計算を同時に実行する必要があるため、粒子データをある一定の大きさのブロックに分割し、その単位でGPU内に複数配置する。ブロック単位でGPU内では計算を行い、計算が終了した段階でCPUへデータを転送し、空いた領域に別のブロックを引き込み、計算を行う。GPU内での計算ブロックを複数配置することで、あるブロックでの計算を実行中に他のブロックへの非同期データ転送を実行することで、計算とデータ転送が同時に実行される。非同期でデータを逐次転送してデバイス側で計算を行うことにより、GPUに内蔵しているメモリより大きなメモリを要求する粒子シミュレーションの実行を可能としている。

この手法を用いて、倍精度演算による粒子シミュレーション計算を実施した。これにより、Xeon-E5 プロセッサ 1 コアの 7-8 倍程度の計算処理速度向上が見られた。転送時間の隠蔽手法を実施しない場合は、計算速度向上は見られず、むしろ低下する傾向にあるが、転送時間隠蔽を実現することにより、より高効率の演算が実現された。しかしながらマルチコア CPU (8core 程度) を用いて OpenMP や MPI で並列化を行う場合と比べると、1CPU での計算とほぼ同等のパフォーマンスであるとも言える。8 コアを有するマルチコア CPU と今回導入した GPU はほぼ同等の価格帯であることを考慮すると、単位価格当たりのパフォーマンスは同等であると考えられる。GPU を用いた計算は近年コンパイラの発展に伴い、プログラミングし易くなっているが、CPU 内で行う OpenMP や MPI に比べて開発コストがかかる傾向にある。そのため、GPU を用いた計算コード開発の意義は、今回開発されたコード以上のパフォーマンスが必要となる。これを実現するためには、GPU 内での演算手法を根本から見直し、効率の向上を目指すことが今後の必要課題と認識している。また今後、PCI-express を用いないで GPU を利用出来る環境が示唆されていることから、GPU 内での高度なチューニング手法が今後求められる。

これと平行して、同様な位置づけとして注目され始めている Xeon-Phi でのメニーコア演算手法についても現在開発を行っている。(挑戦的萌芽研究 (26600152) 平成 26 年-平成 28 年)

- (2) GPU を用いた粒子シミュレーションで計算された、whistler 乱流の非線形発展お

#### よびイオンの加速について

開発された粒子シミュレーションコードの成果を実研究へフィードバックを行った。この研究では whistler 波動と呼ばれるプラズマ波動によって構成される乱流の非線形発展について計算を行い、この中でイオンが背景磁場に対して垂直方向に優位に散乱されることを明らかにした。whistler 乱流によるイオンの垂直散乱プロセスはこれまで報告がなく、2014 年 4 月に Physics of Plasmas という論文誌において発表を行った。(学会発表リスト①)

この散乱プロセスは whistler 乱流の非線形発展の特徴に起因する。これまで知られている whistler 乱流の特徴として、背景磁場に対して準垂直方向に伝搬する波動を乱流中で優位に励起するということが挙げられる。(e.g. Saito *et al.* (2008)) 準垂直伝搬する whistler 波動は位相速度が遅くなることはプラズマの線形分散関係より知られており (Gary (1993)), この特徴によって、イオンが準垂直伝搬する whistler 波動とランダウ共鳴をすることによって、イオンの一部が散乱され、背景磁場に対して垂直方向に速度分布を広げるという結果が、今回の粒子シミュレーションによって明らかになった。図 2 は今回発表した論文 (Saito and Nariyuki (2014)) の Figure 3 より引用している。

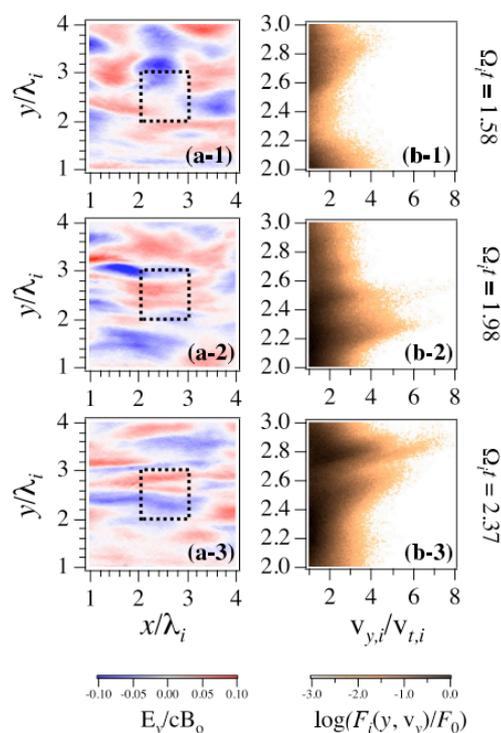


図 2: Saito and Nariyuki (Physics of Plasmas, Vol. 21, 042303 (2014)) の Figure 3 より引用。左側カラープロット: 電場  $E_y$  の  $x$ - $y$  平面での強度分布の時間発展。右側カラープロット: 左図の点線で囲まれた部分でのイオンの位相空間密度 ( $v_y$ ,  $y$ )。これより  $y$  方向に短波長の摂動が現れるところでイオンが  $y$  方向に加速されているのが分かる。これはイオンのランダウ共鳴による散乱であると考えられる。

図2より電場分布に短波長成分が現れる領域でイオンが選択的にy方向(背景磁場と垂直方向)に散乱されていることがわかる。通常イオンはwhistler波動と共鳴しないと思われることから、本研究成果は、太陽風乱流散逸プロセスの研究を行う分野において、インパクトのあるものと考えられる。

現在実施している科研費(基盤(B))において、この研究テーマを継承し、運動論的プラズマ乱流の非線形発展およびその散逸プロセスについて研究を遂行している。

#### <引用文献>

- ① S. Saito, S. P. Gary, H. Li, and Y. Narita (2008) 'Whistler turbulence: Particle-in-cell simulations', Physics of Plasmas, Vol.15, 102305
- ② S. P. Gary (1993) 'Theory of Space Plasma Microinstabilities', Cambridge University Press, New York

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

##### [雑誌論文] (計1件)

- ① S. Saito and Y. Nariyuki, Perpendicular ion acceleration in whistler turbulence, Physics of Plasmas (査読有) Vol.21, issue 4, pp. 042303. DOI: 10.1063/1.4870757

##### [学会発表] (計5件)

- ① 齊藤慎司, 成行泰裕, "Perpendicular Ion Acceleration in Anisotropic Whistler Turbulence" (口頭) Plasma Conference 2014 (2014年11月) 新潟県新潟市(朱鷺メッセ)
- ② 齊藤慎司, 成行泰裕, "Perpendicular ion heating by anisotropic whistler turbulence" (ポスター) AGU Fall Meeting (2013年12月) San Francisco, USA.
- ③ 齊藤慎司, 成行泰裕, "運動論乱流における理論・シミュレーション研究の現状について" (口頭) MMS研究会・境界層分科会 (2013年10月) 湘南国際村センター
- ④ 齊藤慎司, 成行泰裕, "Perpendicular ion acceleration in forward cascading whistler turbulence from ion scale to electron scale" (口頭) Asia-Pacific Radio Science Conference (2013年9月) Taipei, Taiwan.
- ⑤ 齊藤慎司, "GPGPUを用いたプラズマ粒子シミュレーション簡易計算手法" (口頭) 平成24年度名古屋大学太陽地球環境研究所共同研究集会「STEシミュレーション研究会」および「太陽地球惑星系

科学(STP)シミュレーション・モデリング技法勉強会」(2013年3月)名古屋大学

#### 6. 研究組織

##### (1) 研究代表者

齊藤 慎司 (SAITO, Shinji)

名古屋大学・大学院理学研究科・特任准教授

研究者番号: 60528165