

AMR-PICコード開発のポイント

(Ref. Fujimoto, JCP, vol.230, 8508, 2011)

藤本 桂三

理化学研究所 計算宇宙物理研究室

発表内容

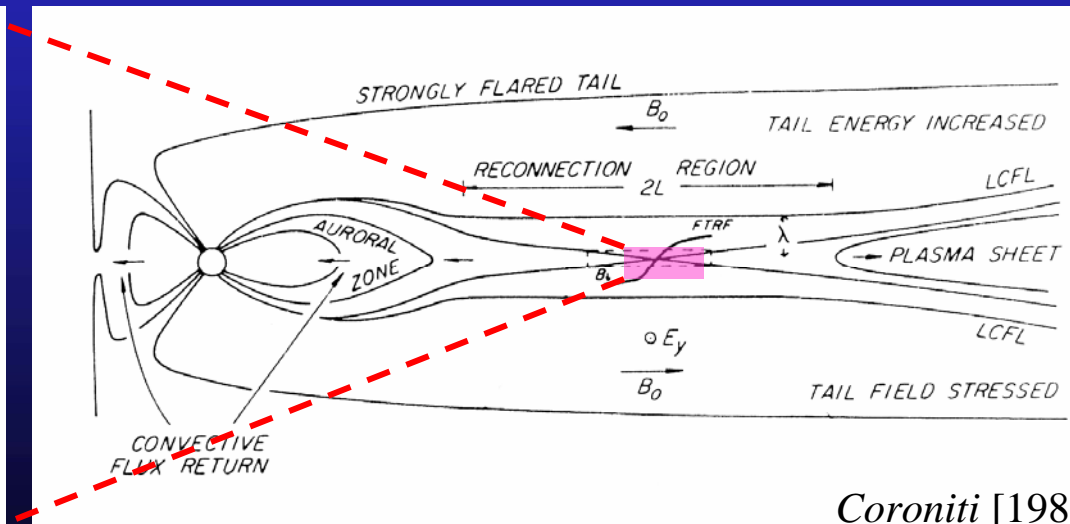
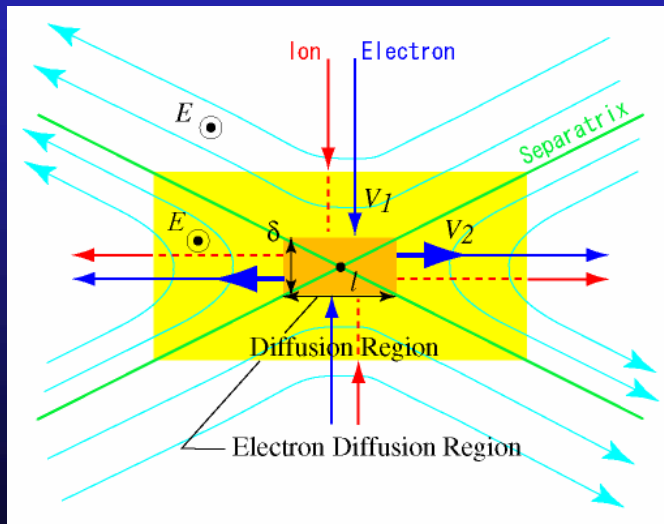
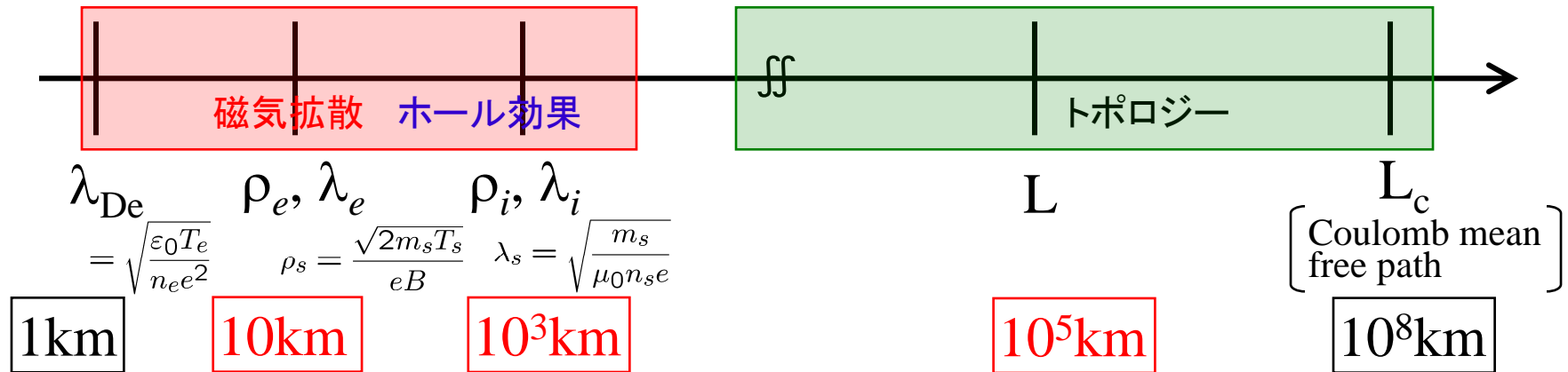
- 開発の動機、戦略
- AMR-PICコードの開発
- 応用例（磁気リコネクション）
- まとめ

開発の動機、戦略

磁気リコネクションとそのマルチスケール性

$\beta_i \sim 1$ (Particle-In-Cell)
Full PIC (粒子)

(Magnetohydrodynamics)
MHD (流体)



Coroniti [1985]

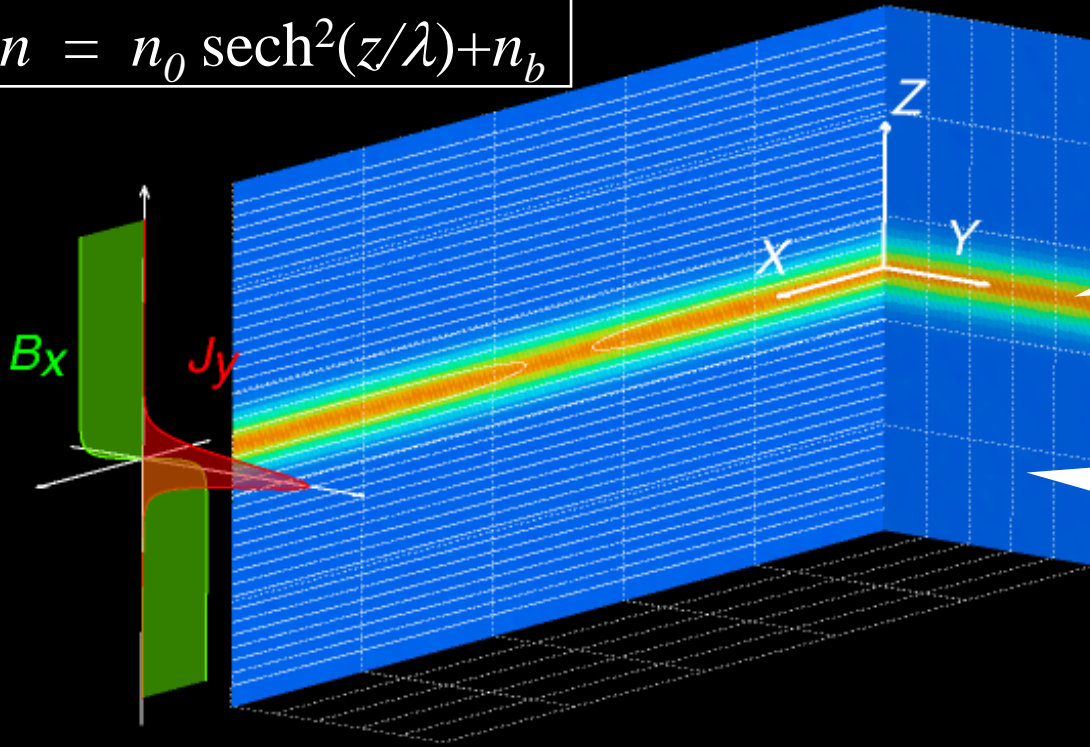
陽的PICスキームの制約と電流層プロファイル

$$\lambda_{De} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 T_e}{n_e e^2}}$$

格子点間隔 $\Delta x \lesssim 3\lambda_{De}$

$$B_x = -B_0 \tanh(z/\lambda)$$

$$n = n_0 \operatorname{sech}^2(z/\lambda) + n_b$$



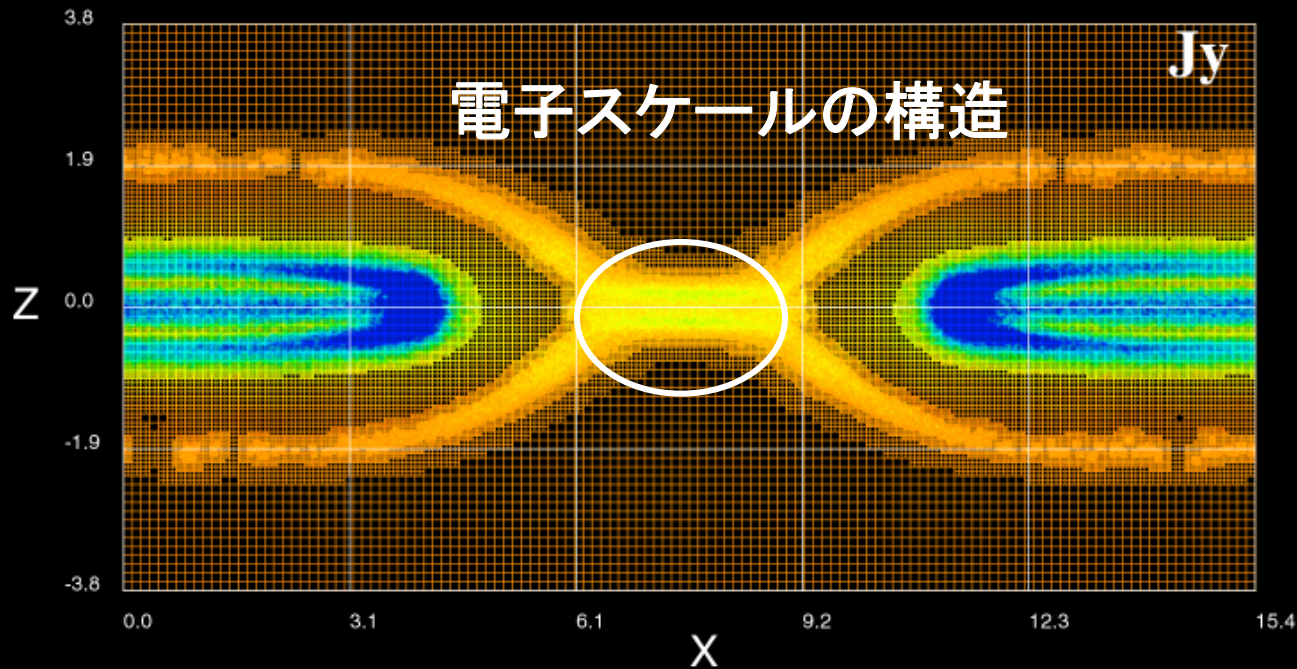
電流層中心付近

$$\lambda_{De} \approx 3 \times 10^2 \text{ m}$$

磁場支配領域

$$\lambda_{De} \approx 6 \times 10^3 \text{ m}$$

物理的に要求される解像度



$$\nabla \times B = \mu_0 J_e$$

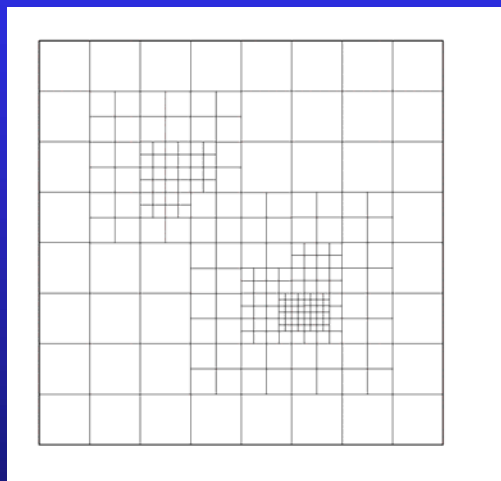
$$\left| \frac{1}{B} \frac{\partial B}{\partial z} \right|^{-1} \sim \frac{c}{\omega_{pe}}$$

適合細分化格子 (AMR) の適用

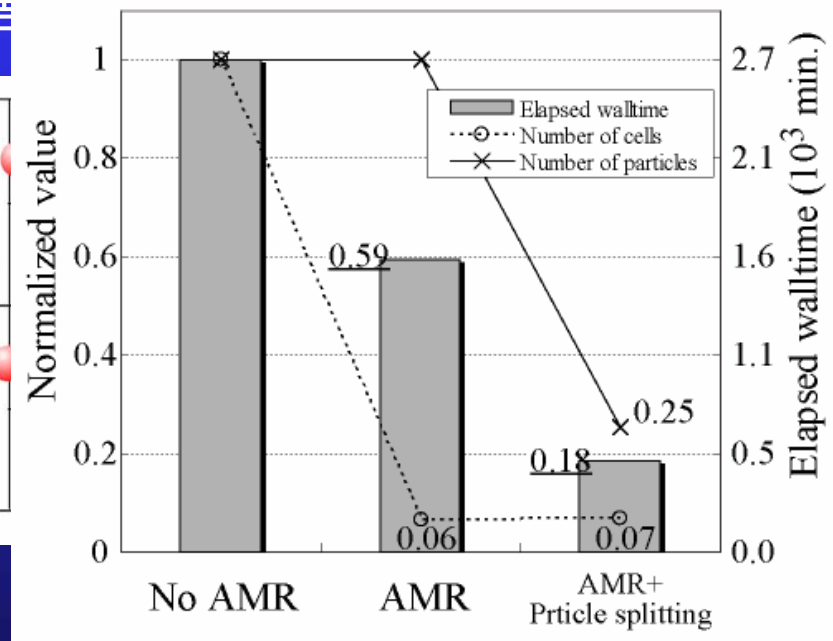
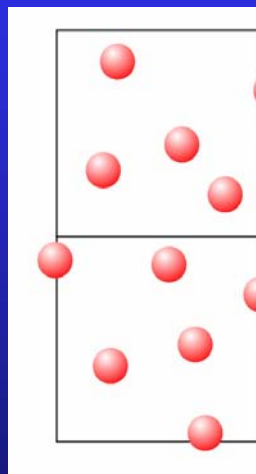
AMR

(Adaptive Mesh Refinement)

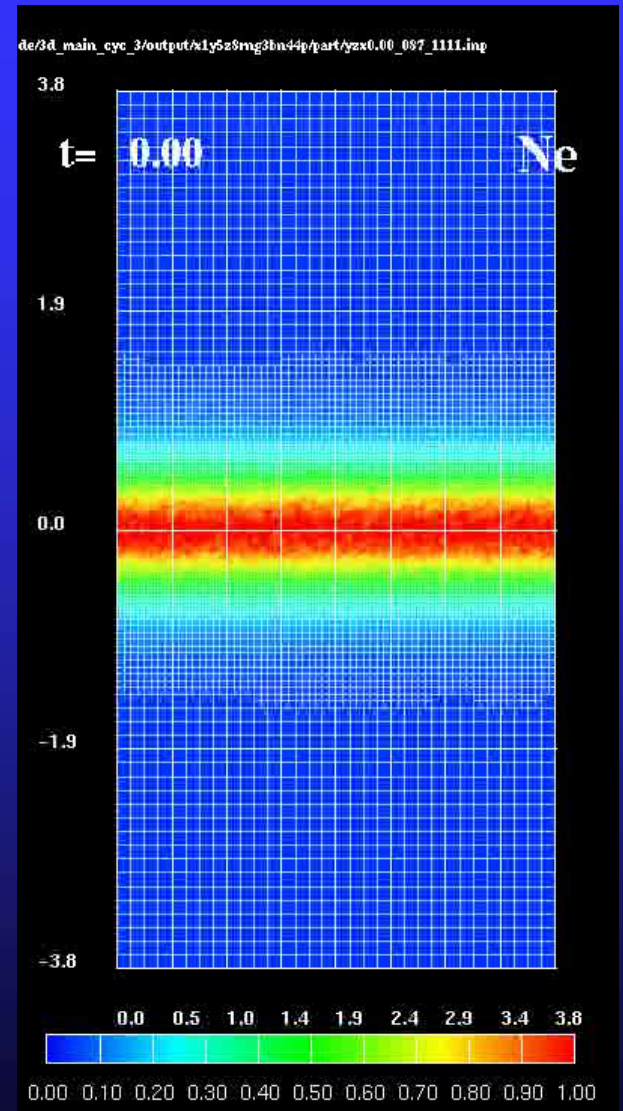
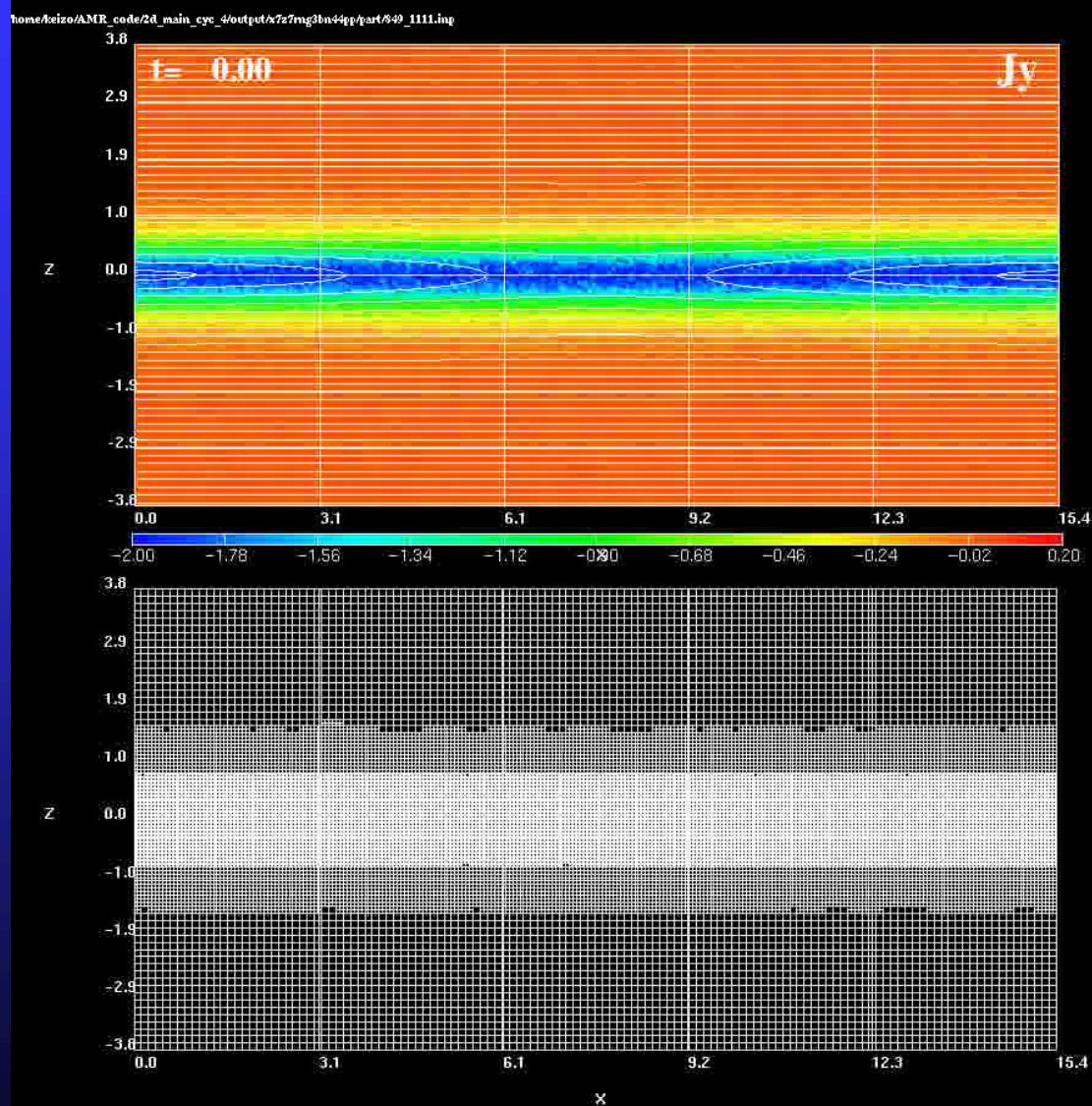
適合細分化格子



粒子分割

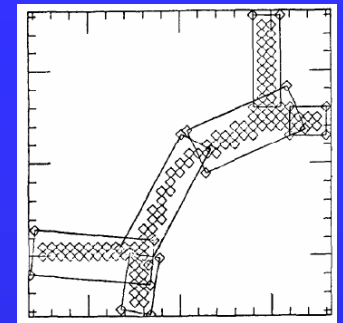


AMR-PIC Simulations



AMR-PICコードの開発

AMRの使用例



- 多階層格子を偏微分方程式系に適用

Berger and Olinger (1984), Berger and Colella (1989)

- MHD + AMR

Groth et al. (2000), Toth et al. (2012) (U Michigan)

- PIC + AMR (N-body code)

Villumsen (1989), Kravtsov et al. (1997), Yahagi and Yoshii (2001)

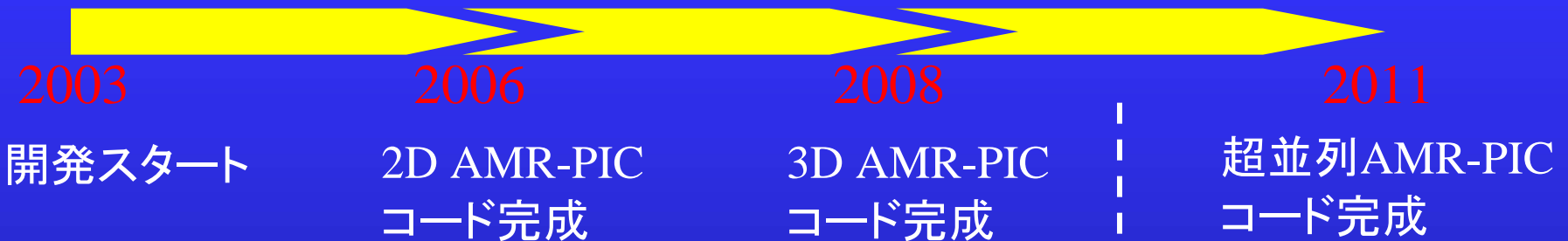
- ElectroStaticPIC + AMR Vay et al. (2004), Colella et al.(2010)

- ElectroMagneticPIC + AMR

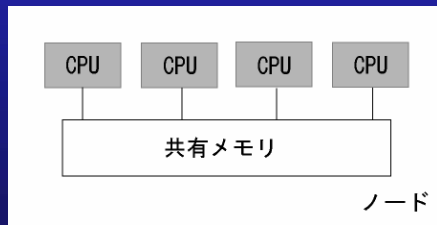
Vay et al. (2004?), Fujimoto & Machida (2006),
Fujimoto (2011)

開発履歴

[Fujimoto & Machida, 2006; Fujimoto & Sydora, 2008, Fujimoto, 2011]

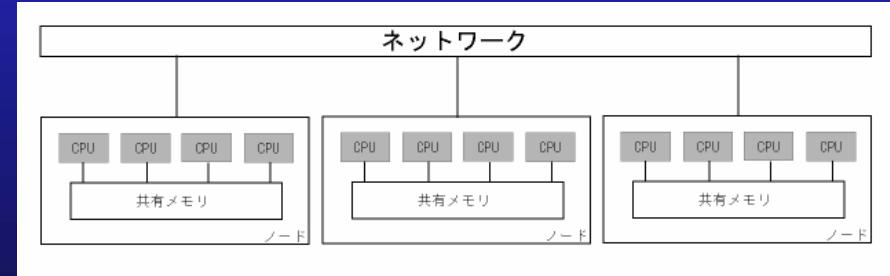


ポアソン方程式
ノード内並列



CPU数、メモリ容量
の制約

- 電荷保存法
- 適合ブロック法



より多くの計算機資源が利
用可能！

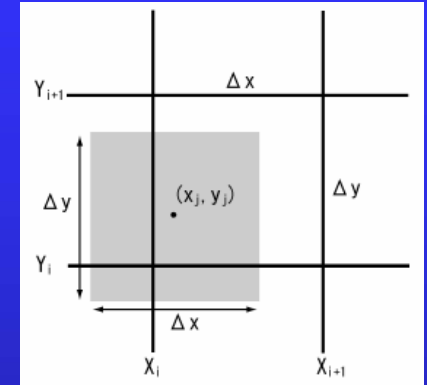
電磁粒子(EMPIC)コード

[Birdsall and Langdon, IOP, 1991]

$$\rho_{l,m,n} = \sum_s \sum_j q_{sj} S(\vec{x}_{sj} - \vec{X}_{l,m,n})$$

$$A(\vec{x}_{sj}) = \sum_l \sum_m \sum_n A_{l,m,n} S(\vec{x}_{sj} - \vec{X}_{l,m,n})$$

S: Shape function



● 超粒子 (Buneman-Boris法)

$$\frac{\vec{v}_{sj}^{n+1/2} - \vec{v}_{sj}^{n-1/2}}{\Delta t} = \frac{q_{sj}}{m_{sj}} \left[\vec{E}^n(\vec{x}_{sj}^n) + \frac{\vec{v}_{sj}^{n-1/2} + \vec{v}_{sj}^{n+1/2}}{2} \times \vec{B}^n(\vec{x}_{sj}^n) \right]$$

$$\frac{\vec{x}_{sj}^{n+1} - \vec{x}_{sj}^n}{\Delta t} = \vec{v}_{sj}^{n+1/2}$$

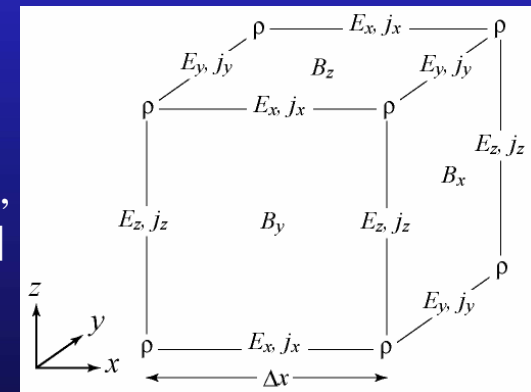
● 電磁場 (Yee-Bunemanスキーム)

$$\frac{\vec{B}^{n+1/2} - \vec{B}^{n-1/2}}{\Delta t} = -\nabla \times \vec{E}^n$$

$$\frac{\vec{E}^{n+1} - \vec{E}^n}{\Delta t} = c^2 \nabla \times \vec{B}^{n+1/2} - \frac{1}{\epsilon_0} \vec{j}^{n+1/2}$$

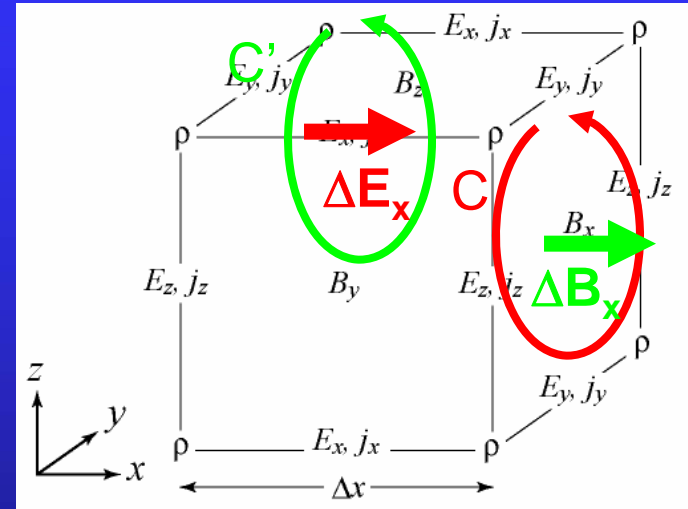
電荷保存法

[Villasenor & Buneman, 1992]



Staggering Grid Scheme [Yee, 1966; Buneman, 1968]

$$\frac{B_x^{n+1/2} - B_x^{n-1/2}}{\Delta t} \Delta y \Delta z = - \oint_C \vec{E}^n \cdot d\vec{s}$$
$$\frac{E_x^{n+1} - E_x^n}{\Delta t} \Delta y \Delta z = c^2 \oint_{C'} \vec{B}^{n+1/2} \cdot d\vec{s}$$



- 電磁フラックスが厳格に保存
- 電磁波に対する数値散逸なし

von Neumannの安定解析

$$E_j^n = g^n \exp[ik(j\Delta x)]$$

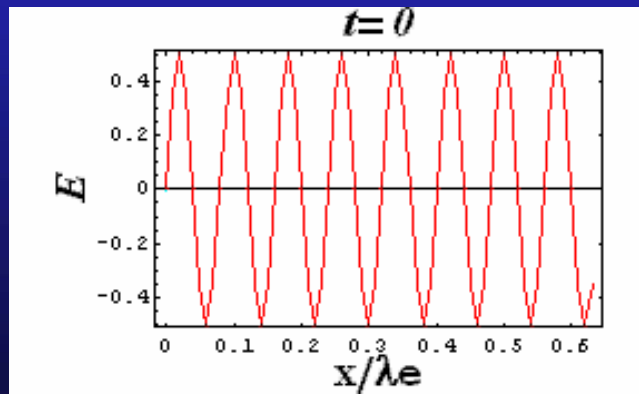
$$g = |g| \exp[-i\omega\Delta t]$$



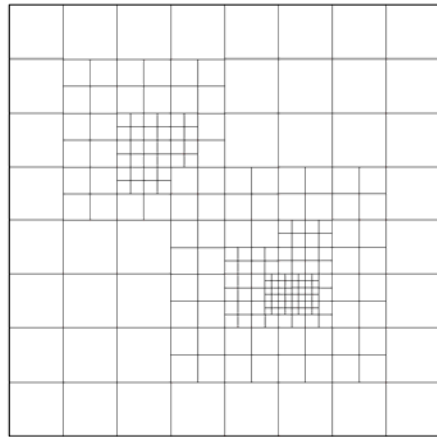
$$\frac{\vec{B}^{n+1/2} - \vec{B}^{n-1/2}}{\Delta t} = -\nabla \times \vec{E}^n$$
$$\frac{\vec{E}^{n+1} - \vec{E}^n}{\Delta t} = c^2 \nabla \times \vec{B}^{n+1/2}$$

$$g = 1 - \frac{(\kappa c \Delta t)^2}{2} \pm i(\kappa c \Delta t) \sqrt{1 - \frac{(\kappa c \Delta t)^2}{4}} \quad (\Delta x / \Delta t > c)$$

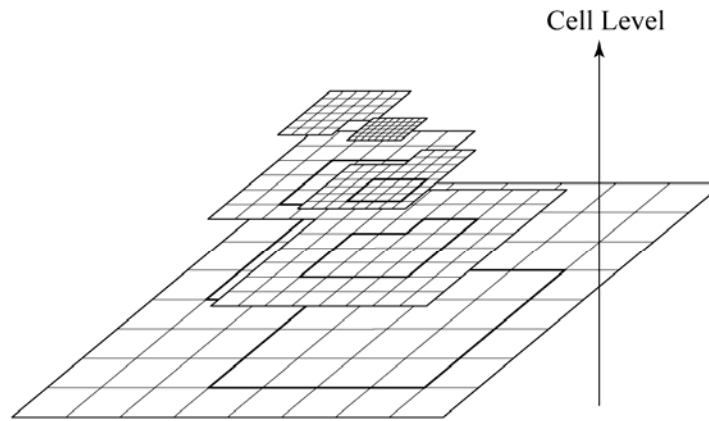
$$|g| = 1$$



AMRの適用: データ構造



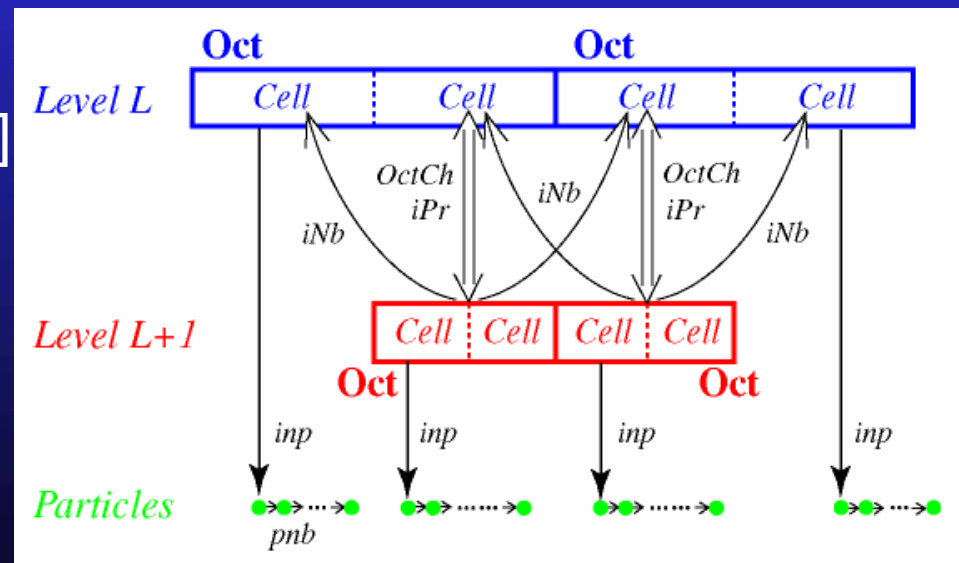
(a)



(b)

Similar to a fully threaded tree (FTT) structure (Khokhlov, 1998).

[Fujimoto & Machida, JCP, 2006]



AMRの適用: 階層間同期

細分化格子の解がより高精度

$$\begin{cases} \frac{\partial \vec{B}^L}{\partial t} = -\nabla^L \times \vec{E}^L \\ \frac{\partial \vec{E}^L}{\partial t} = \nabla^L \times \vec{B}^L - \vec{j}^L \\ \frac{\partial \rho^L}{\partial t} + \nabla^L \cdot \vec{j}^L = 0 \end{cases}$$

$$\rho^L = \sum_s \sum_j q_{sj} S^L(\vec{x}_{sj} - \vec{X}^L)$$

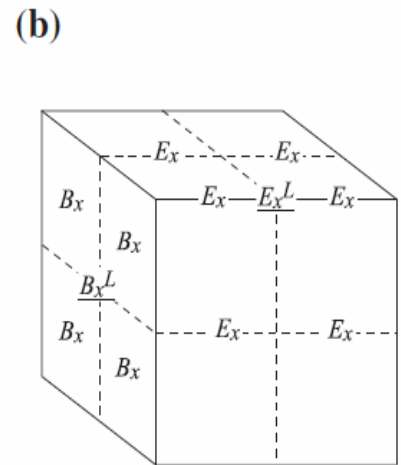
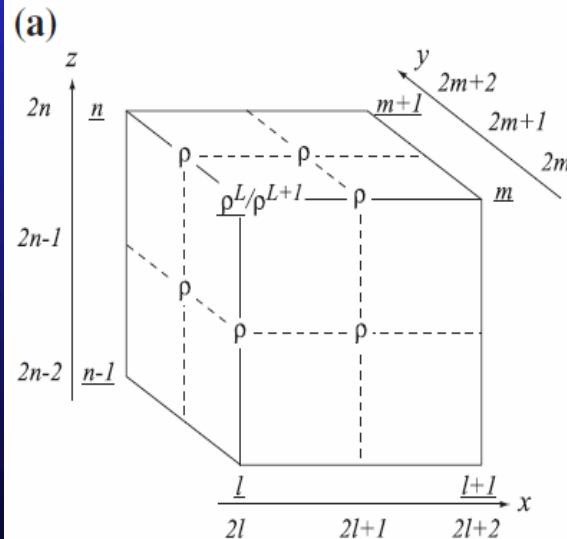
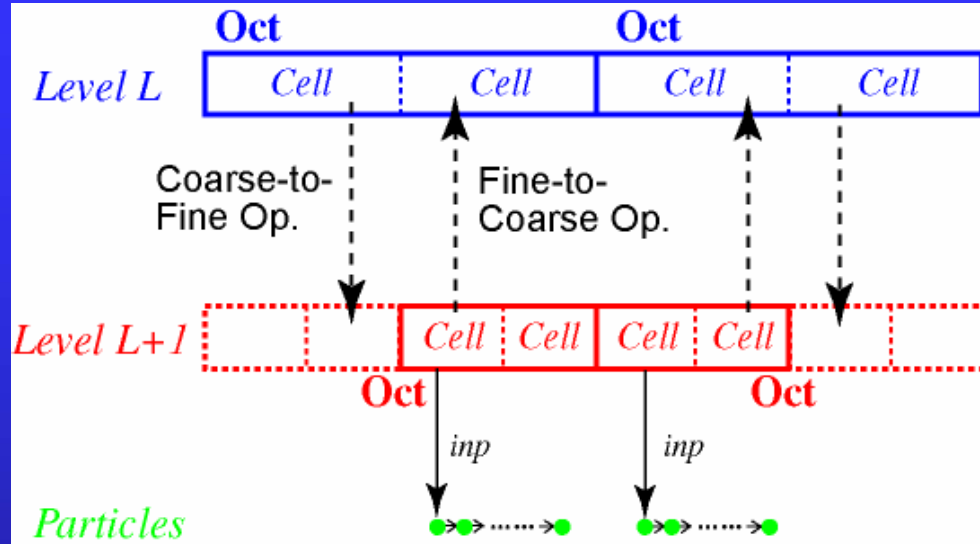
$$\rho^L = \sum_i \rho_i^{L+1} S^L(\vec{X}_i^{L+1} - \vec{X}^L)$$

$$\vec{B}^L = \sum_i \vec{B}_i^{L+1} S^L(\vec{X}_i^{L+1} - \vec{X}^L)$$

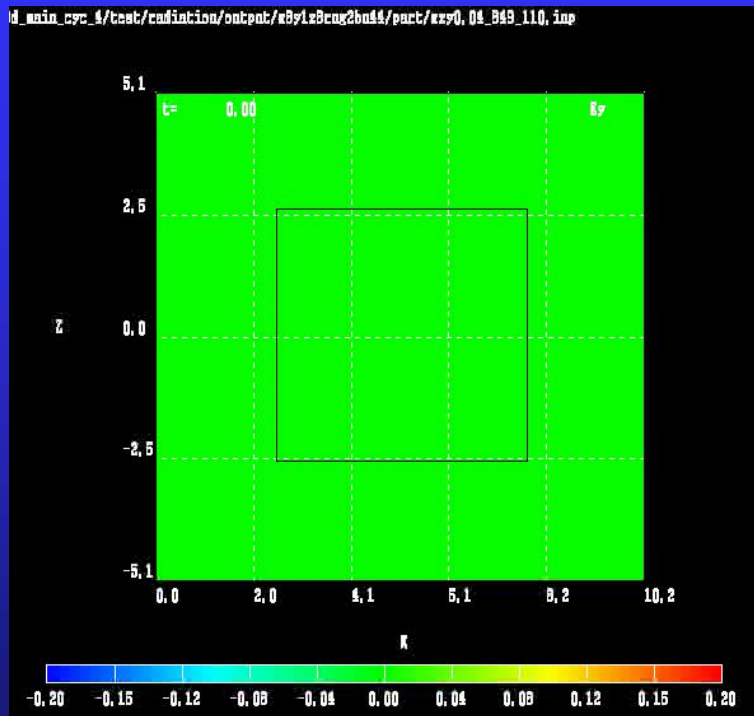
(アンペールの式を満たす)

$$\nabla^{L+1} \times \vec{E}^{L+1} = \nabla^L \times \vec{E}^L$$

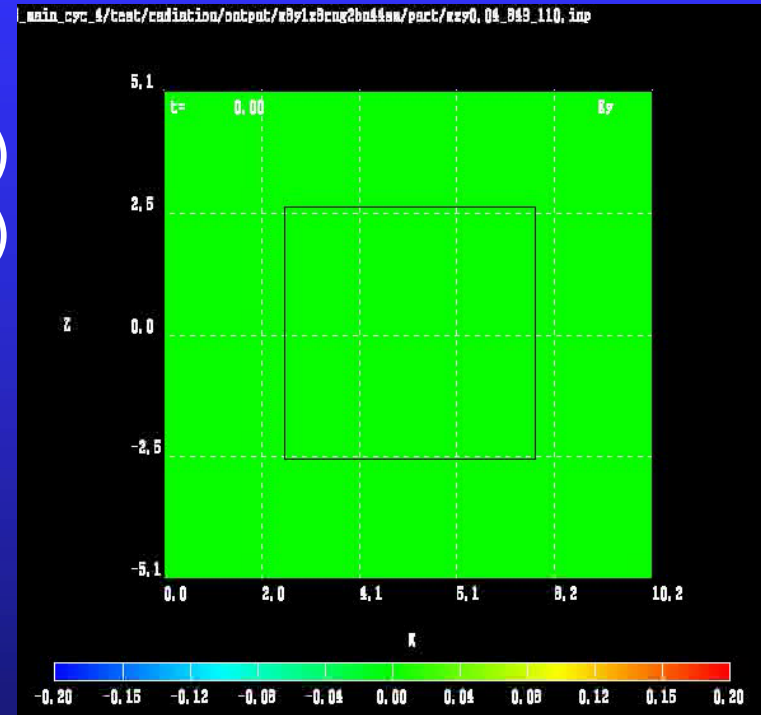
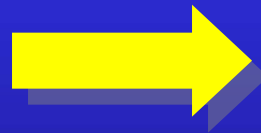
(ファラデーの式を満たす)



AMRの適用: 電磁場のスムージング

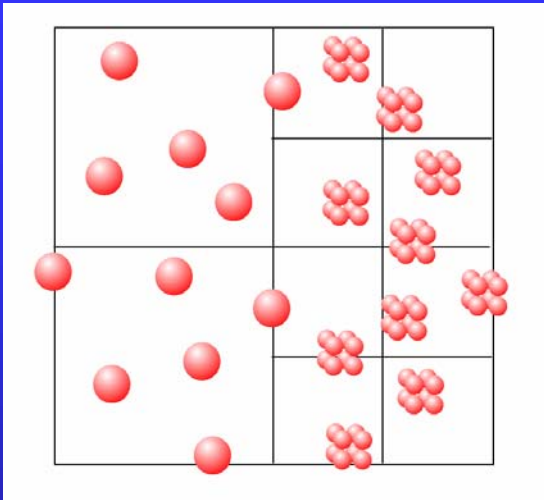


$$E_{SM} = f_{SM}(E)$$
$$B_{SM} = f_{SM}(B)$$



$$A_{SM,j} = f_{SM}(A_j) = \frac{\alpha A_{j-1} + A_j + \alpha A_{j+1}}{1 + 2\alpha} \quad (\alpha = 0.002)$$

超粒子の分割・統合 [Lapenta, JCP, 2002]

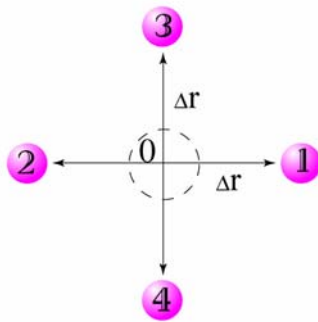


$$\frac{d\vec{v}_s}{dt} = \frac{q_s}{m_s} (\vec{E} + \vec{v}_s \times \vec{B})$$

分割前後で保存させる

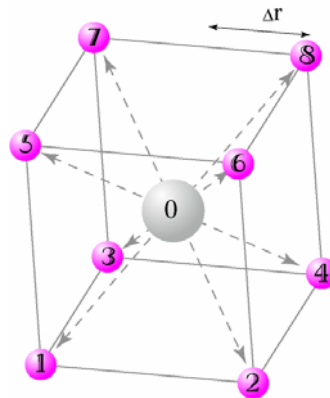
格子点上のモーメント (ρ_c, J)、全電荷・質量 ($\Sigma\rho_c, \Sigma m$)、粒子の全エネルギー ($\Sigma mv^2/2$)、粒子の分布関数 ($f(v)$)

2次元の場合



$$\vec{v}_j = \vec{v}_0 \quad (j = 1, 2, \dots, 8)$$

3次元の場合

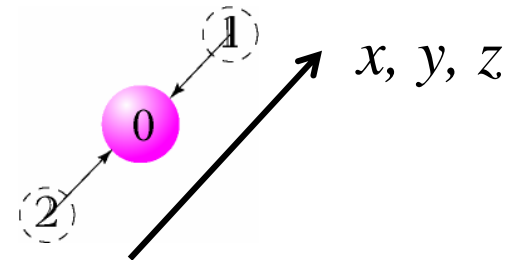


$$q_1 = q_2; m_1 = m_2$$

$$\mathbf{x}_0 = (\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)/2$$

$$\mathbf{V}_0 = (\mathbf{V}_1 + \mathbf{V}_2)/2$$

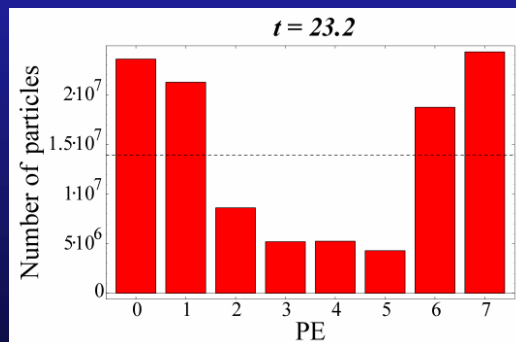
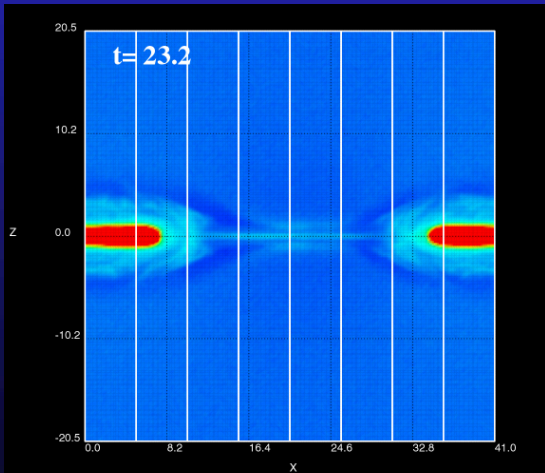
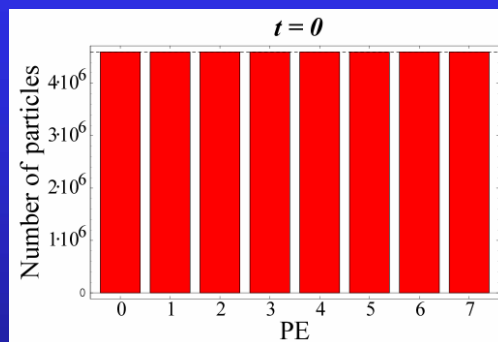
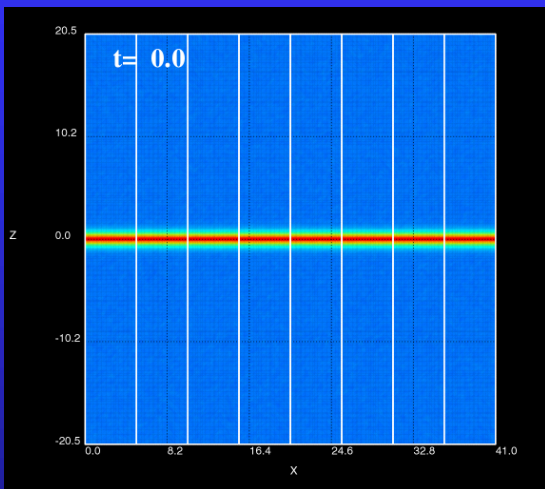
$$q_0 = q_1 + q_2; m_0 = m_1 + m_2$$



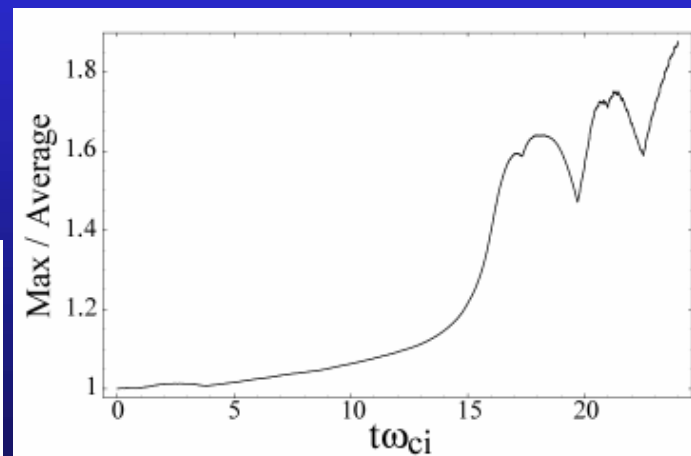
分散並列化: 問題点

8ノード並列の例

PICシミュレーションでは全計算時間の99%以上を粒子に関する計算に要する。



ノード当たり粒子数の不均衡性



適合ブロック法(その1)

(ブロック: 並列計算において各ノードが分担する計算領域)

全計算領域の基底オクト(グローバルオクト)を最適な順番に並べ替える。

出発点から数えて $(x_{oct}, y_{oct}, z_{oct})$ 番目にあるオクトの順番 $D_m = \sum_{l=0}^{n_x+n_y+n_z} N_l d_l$

$$x_{oct} = \sum_{i=0}^{n_x} b_{xi} d_{xi}; \quad y_{oct} = \sum_{j=0}^{n_y} b_{yj} d_{yj}; \quad z_{oct} = \sum_{k=0}^{n_z} b_{zk} d_{zk} \quad \left/ \quad \begin{array}{l} l = i_l + j_l + k_l \\ N_l = b_{xi_l} b_{yj_l} b_{zk_l} \quad (b_{zk_l} \gtrsim b_{xi_l} \gtrsim b_{yj_l}) \end{array} \right.$$

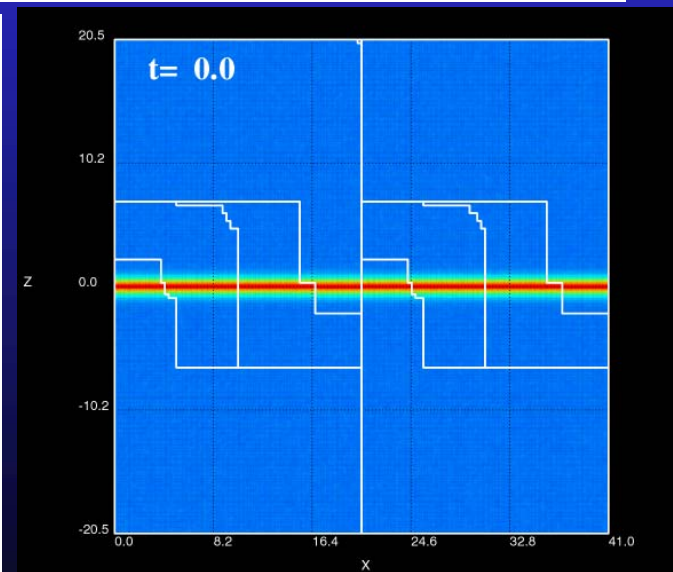
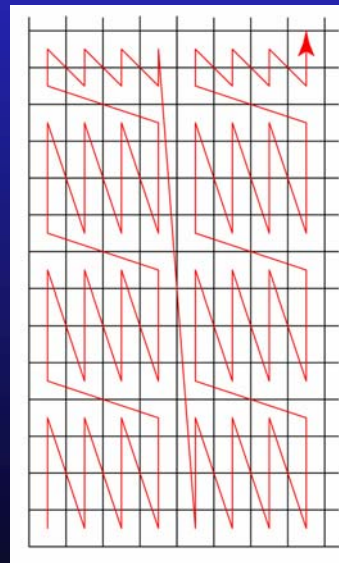
$$b_{xi} = 2^i; \quad b_{yj} = 2^j; \quad b_{z,n_z} = N_z, \quad b_{z,k-1} = \left[\frac{b_{zk}}{3} \right], \quad b_{z,0} = 1$$

$$d_0 = d_{z0}$$

$$d_{l+1} = (i_{l+1} - i_l) d_{x,i_{l+1}} + (j_{l+1} - j_l) d_{y,j_{l+1}} + (k_{l+1} - k_l) d_{z,k_{l+1}}$$

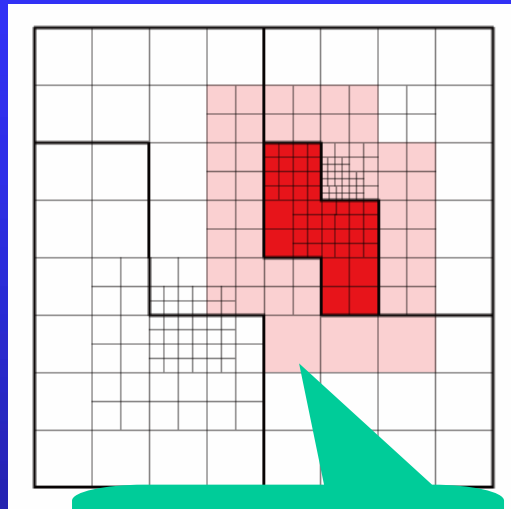
- 初期に1度だけ実施
- この順番に沿って粒子数を数え、各ノード(ブロック)の粒子数が均等になるように基底オクトを分割する。

➡ ブロックの表面積を小さくし、通信量を減らす。

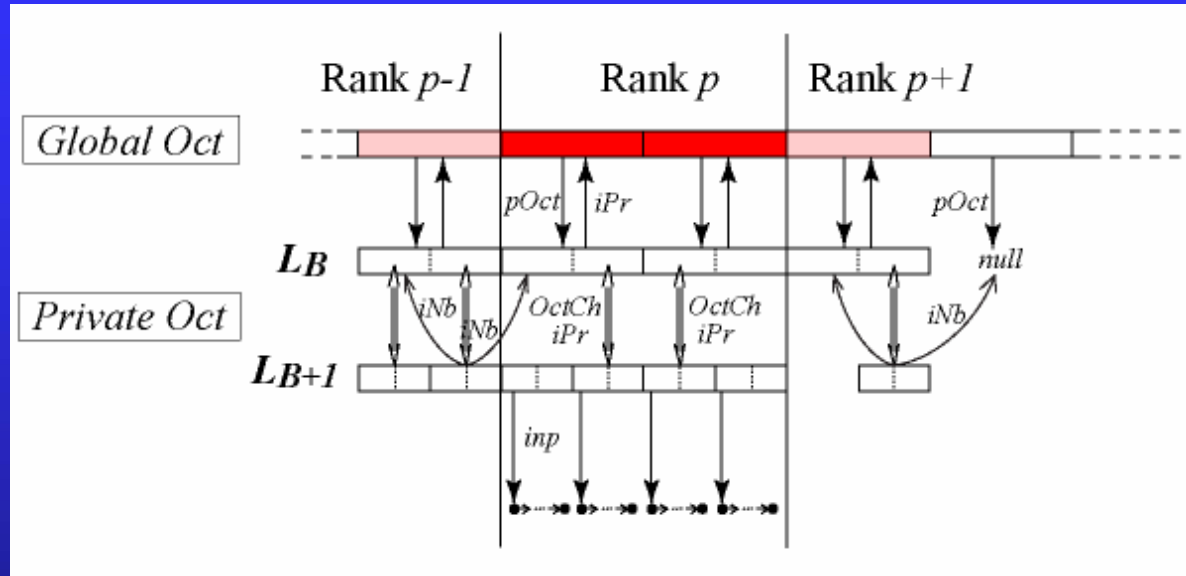


適合ブロック法(その2)

バッファ領域とプライベートオクトの生成



バッファ領域



グローバルオクト

すべてのノードでシェア

$grank$: ノード番号

$gOctNb$: 隣接するオクト

$pOct$

iPr

プライベートオクト

各ノードで個別に設定

$rank$: ノード番号

iNb : 隣接するオクトの親セル

iPr : 親セル

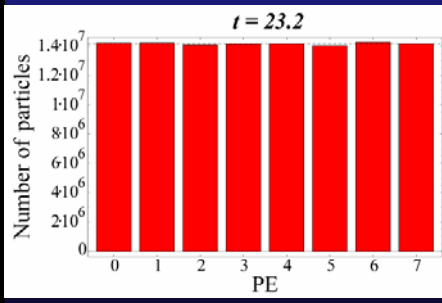
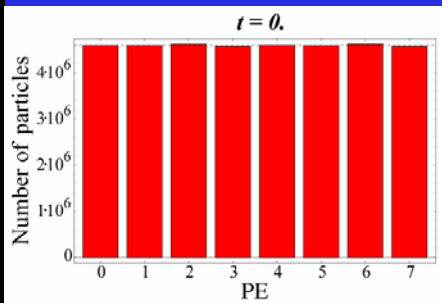
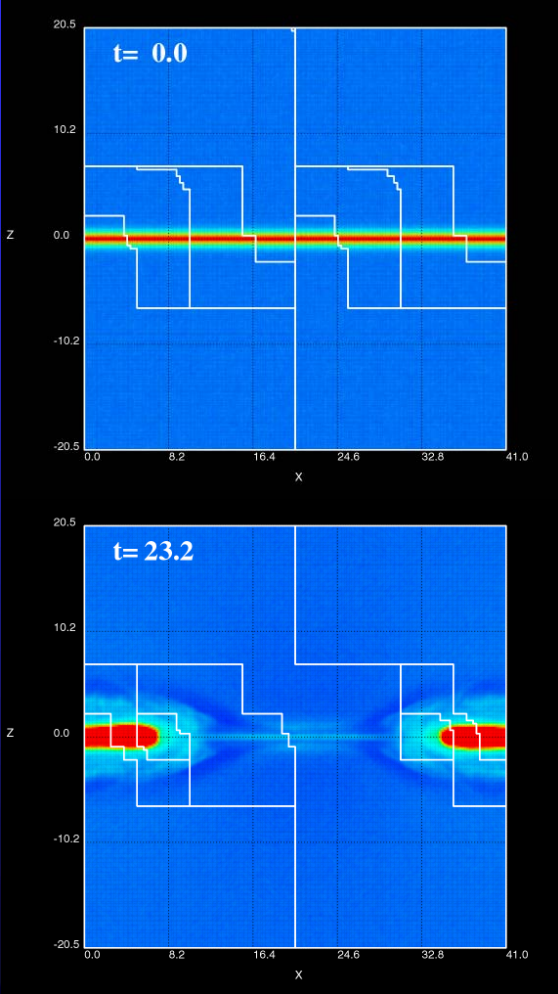
$OctCh$: 子オクト

...

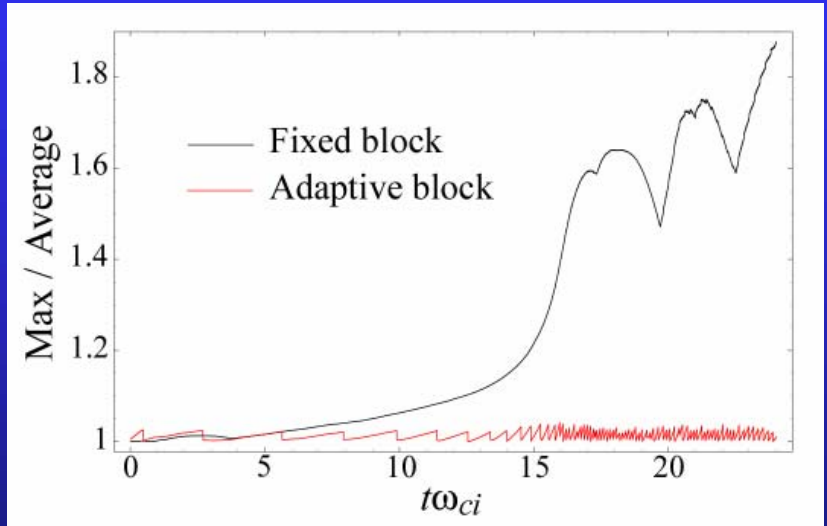
物理データ

適合ブロックを用いたシミュレーション

8ノード並列の例



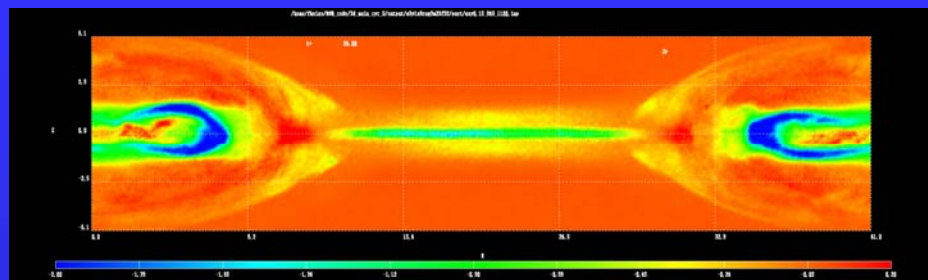
ノード当たり粒子数の不均衡性



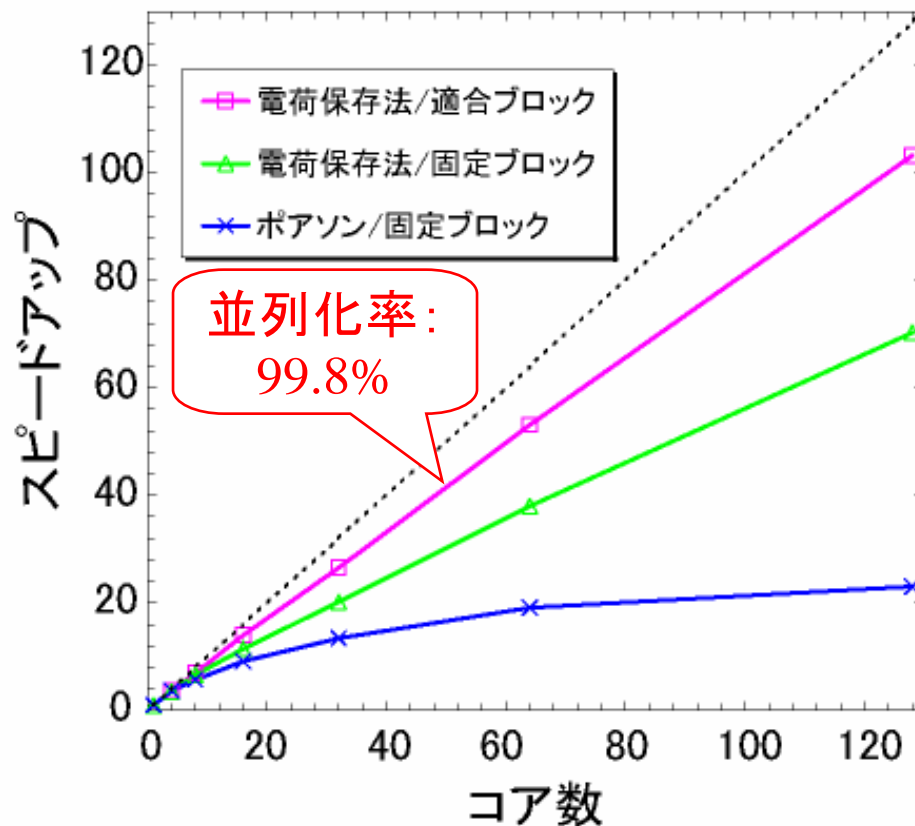
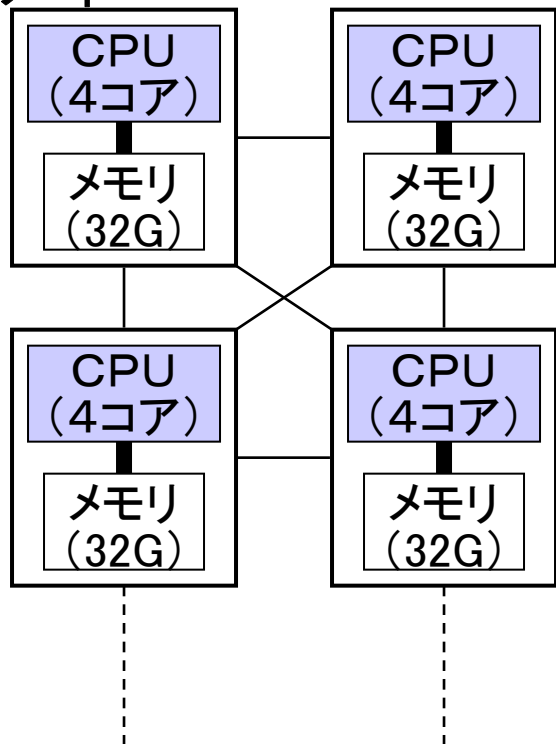
超並列AMR-PICコードの性能

Fujitsu FX1

(名大情報基盤センター)



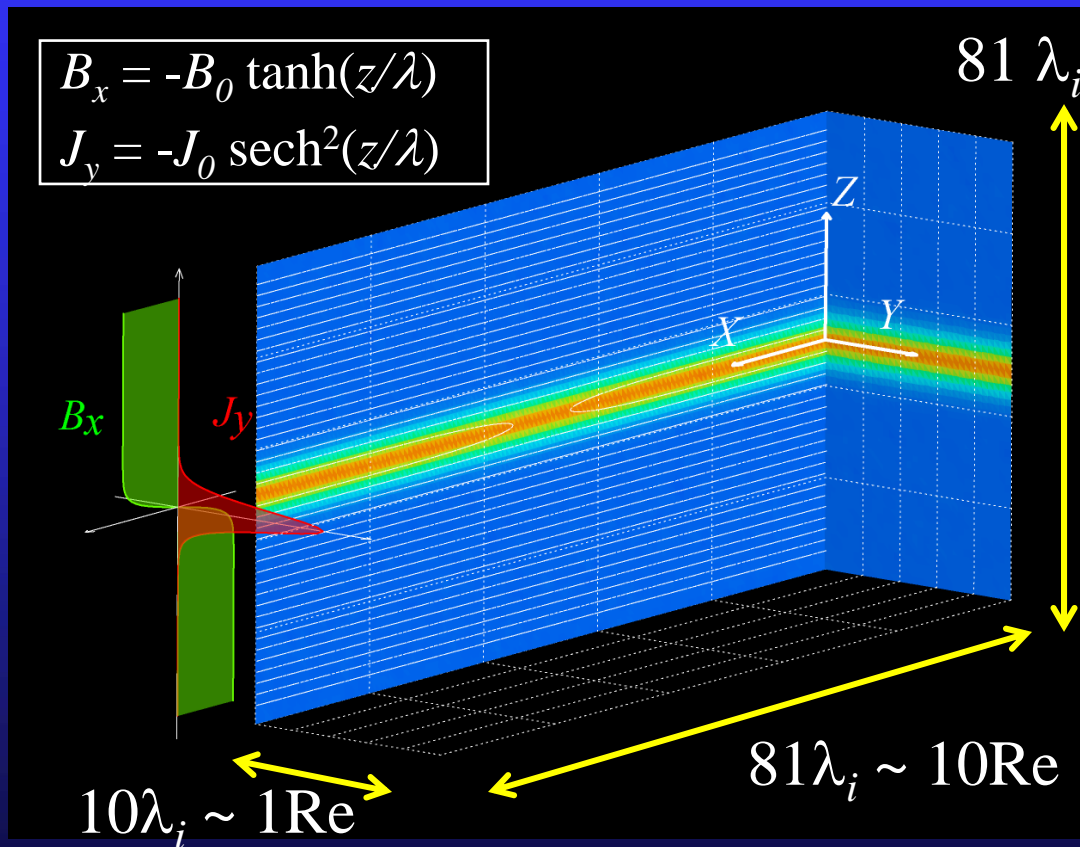
ノード



応用例（磁気リコネクション）

Simulation Setup

Fujitsu FX1, 1024 cores



$$m_i/m_e = 100$$

Max resolution:

$$4096 \times 512 \times 4096 \sim 10^{10}$$

Max number of particles

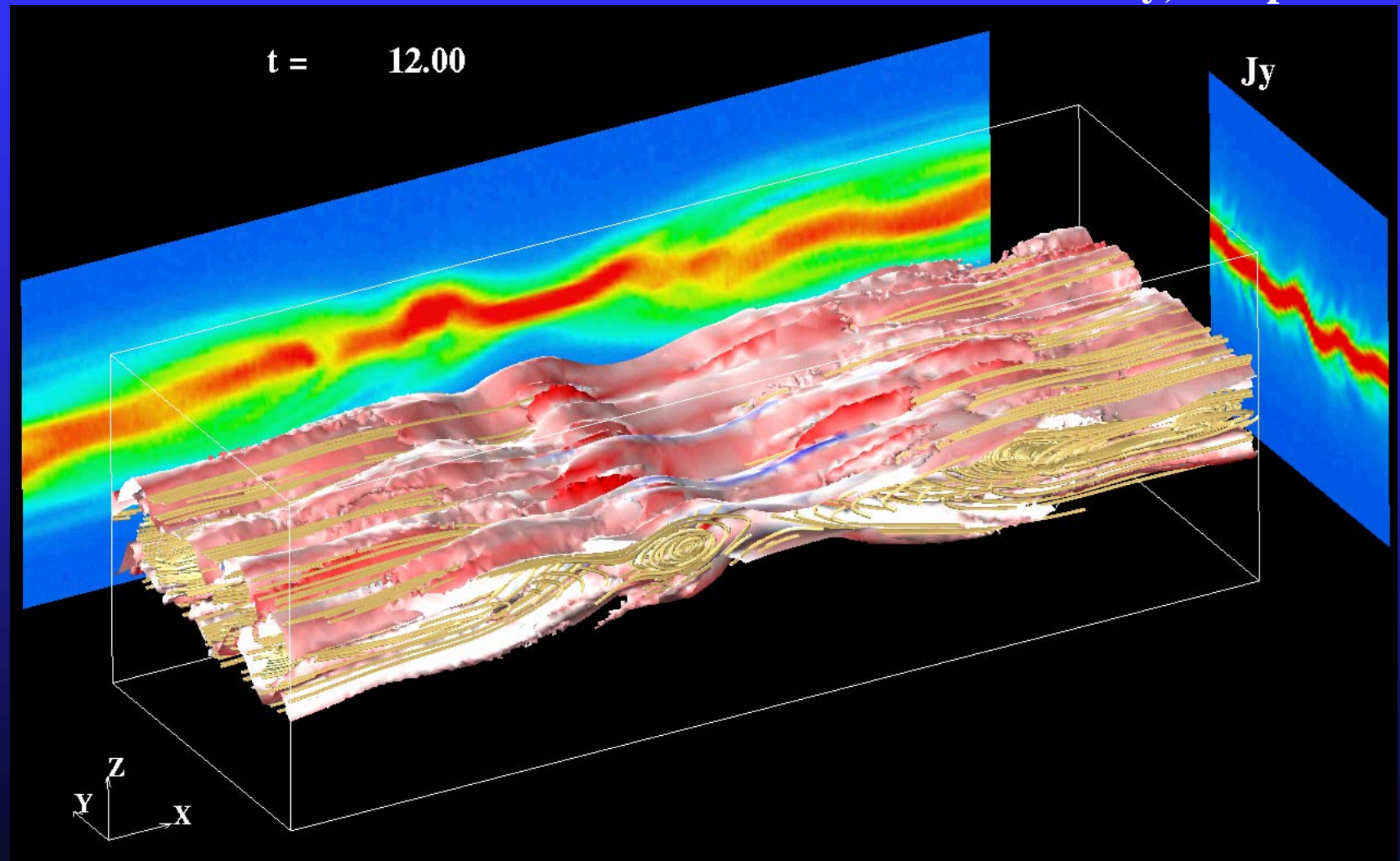
$$\text{Ion} + \text{Electron} \sim 10^{11}$$

Max memory used $\sim 6\text{TB}$

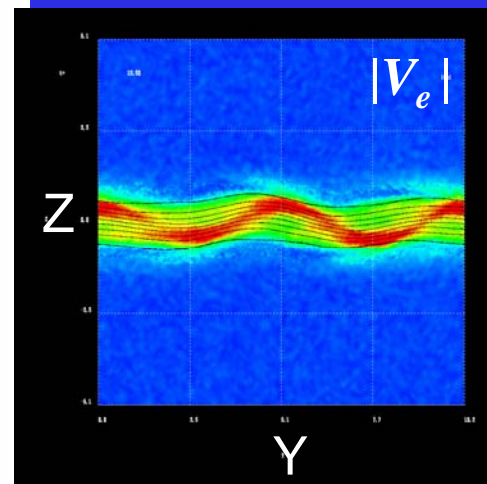
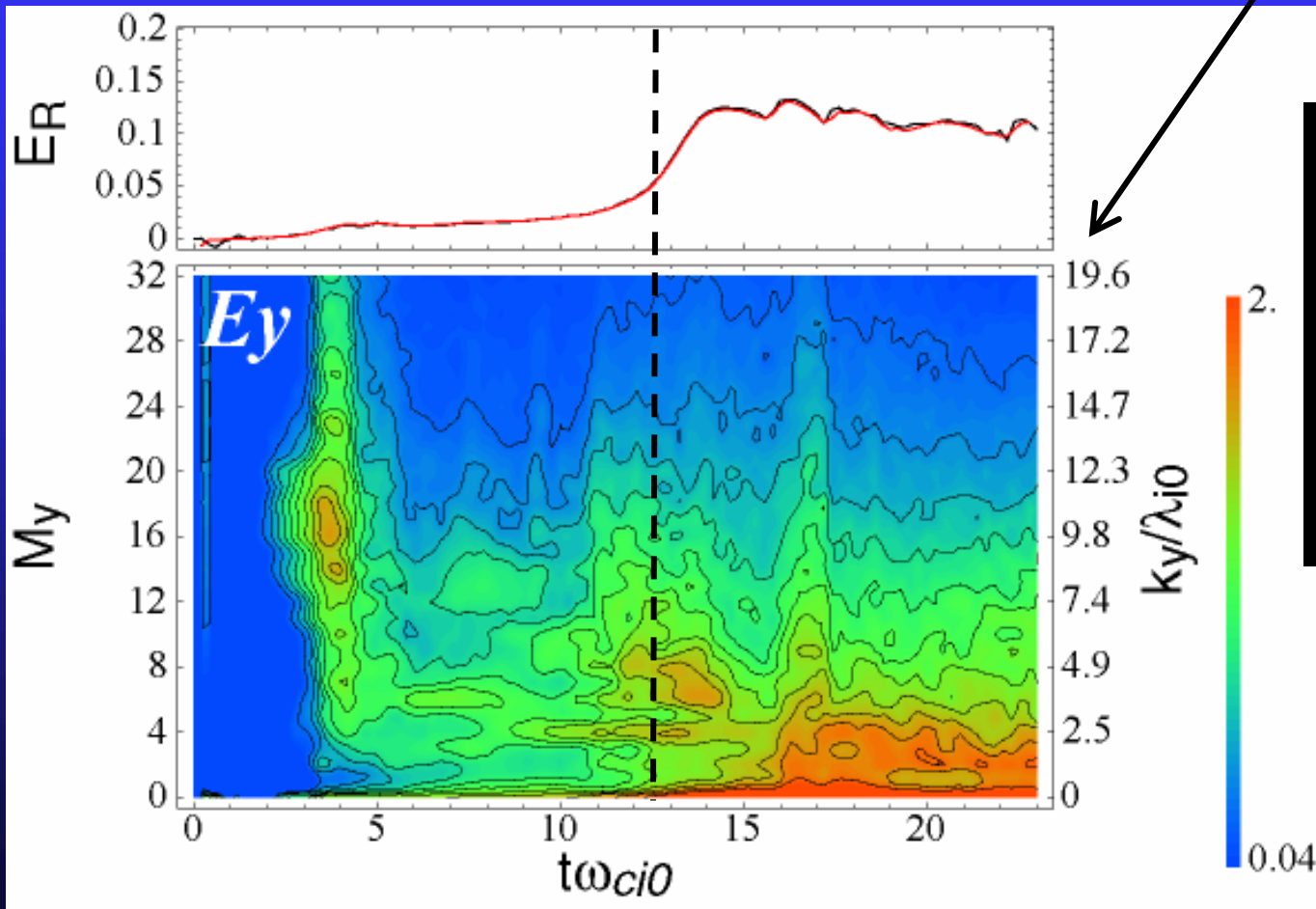
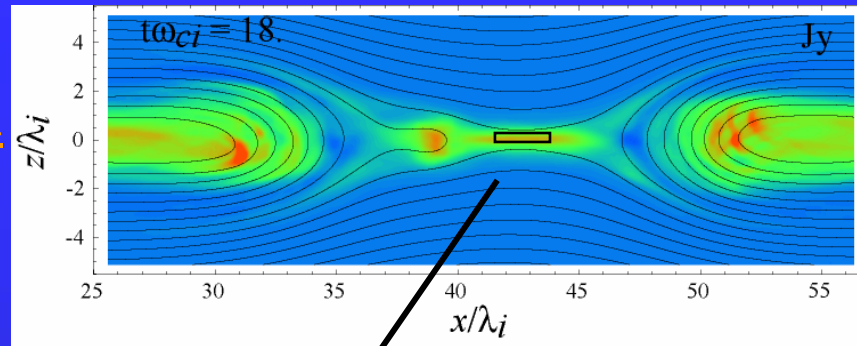
Time Evolution of the Current Sheet

Surface: $|J|$, Line: Field line

Color on the surface: E_y , Cut plane: J_y



Wave Number Spectrum

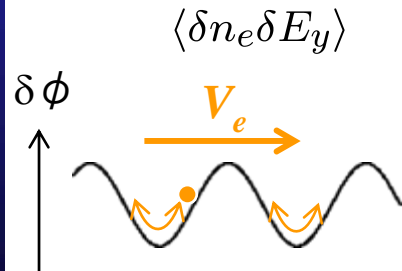


Wave-Particle Interactions

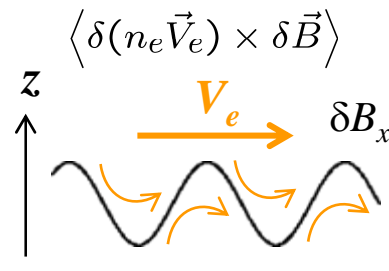
$$A = \langle A \rangle + \delta A \quad \left(\langle \cdot \rangle = \frac{1}{L_y} \int_0^{L_y} \cdot dy \right)$$

$$\begin{aligned} \langle -E_y \rangle &= \frac{1}{\langle n_e \rangle} \left(\langle n_e \vec{V}_e \rangle \times \langle \vec{B} \rangle \right)_y \\ &+ \frac{1}{e \langle n_e \rangle} \langle \nabla \cdot \vec{P}_e \rangle_y \\ &+ \frac{m_e}{e \langle n_e \rangle} \left\langle \frac{\partial V_{ey}}{\partial t} + \vec{V}_e \cdot \nabla V_{ey} \right\rangle \\ &+ \frac{1}{\langle n_e \rangle} \langle \delta n_e \delta E_y \rangle \\ &+ \frac{1}{\langle n_e \rangle} \langle \delta(n_e \vec{V}_e) \times \delta \vec{B} \rangle_y \end{aligned}$$

Anomalous effects

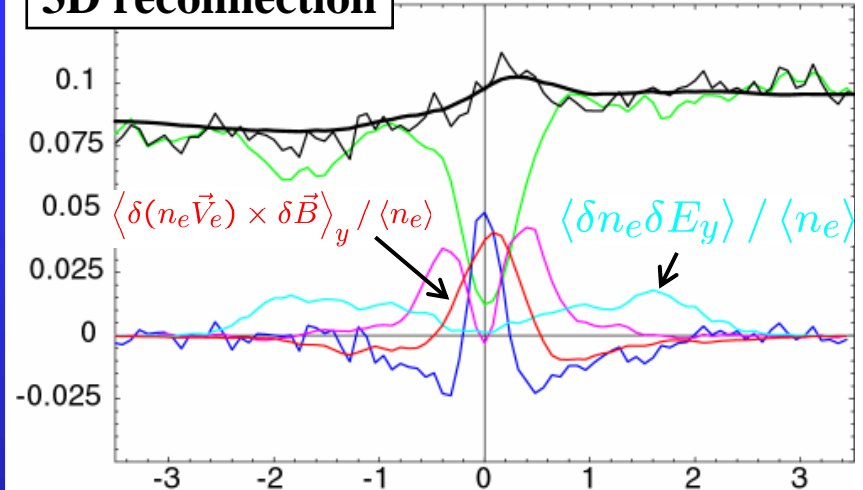


ES turb.

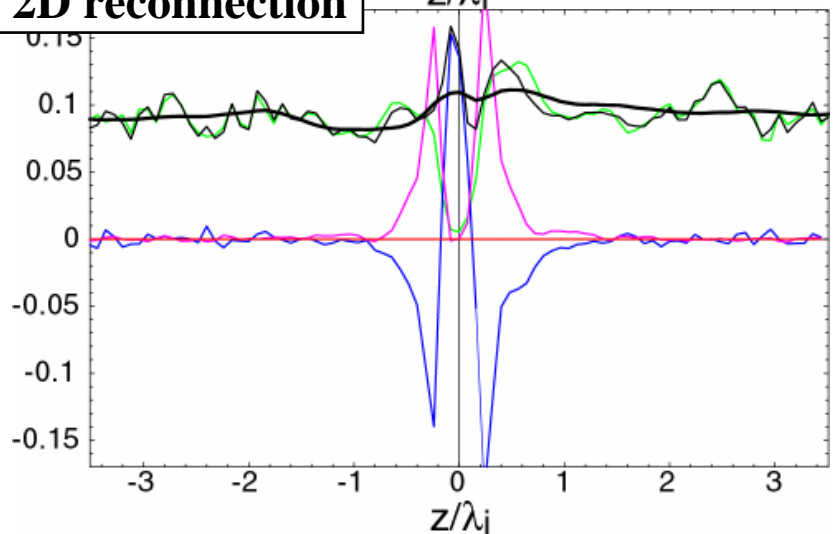


EM turb.

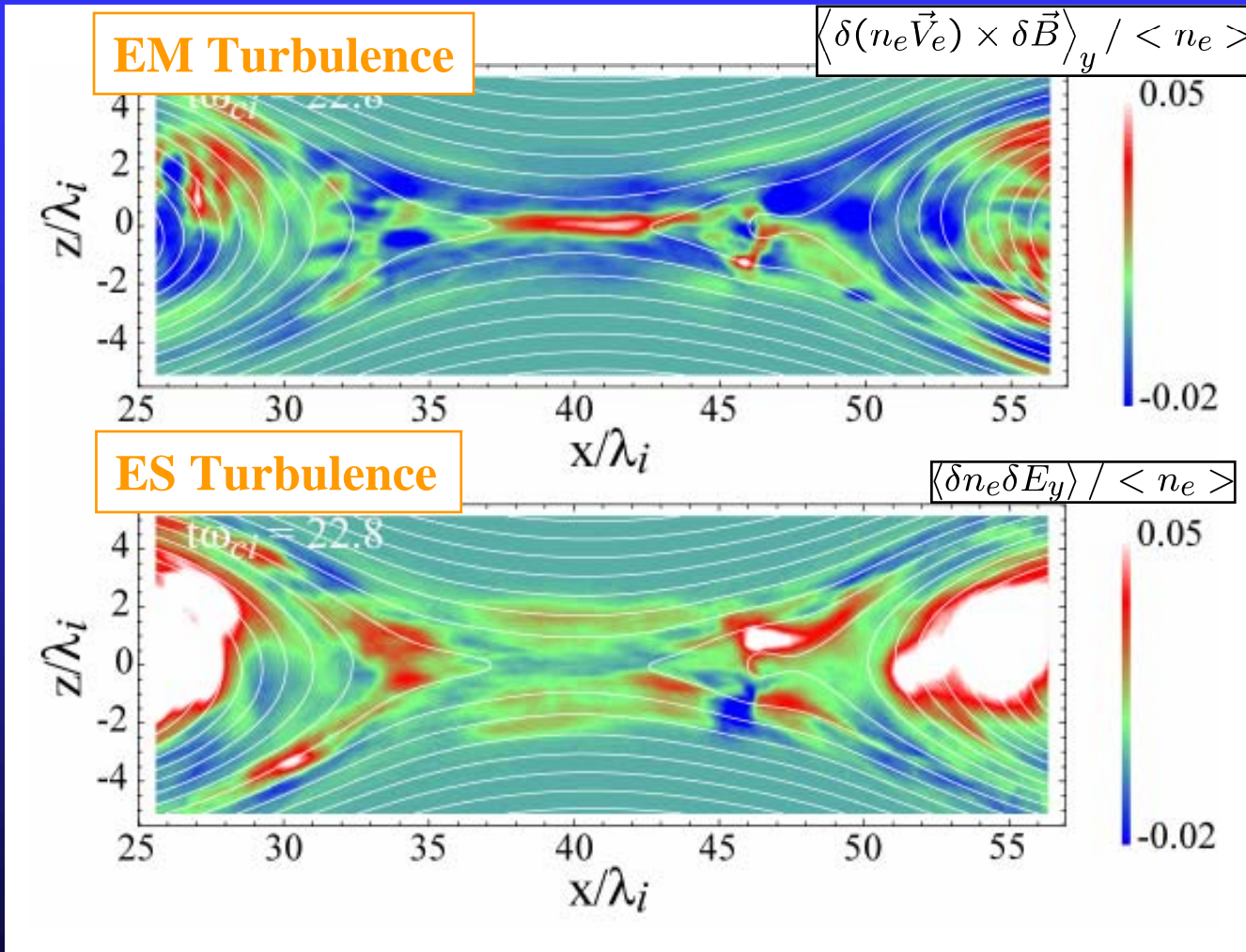
3D reconnection



2D reconnection



EM vs. ES Turbulence Effects



まとめ

AMR-PICコード開発のポイント

1. 細分化レベル間の同期 (電磁波動の分散性を保持)
2. 電磁場のスムージング (短波長モードの除去)
3. データ構造 (ツリー構造が便利)
4. 粒子分割・統合 (格子当たりの粒子数調節)
5. あきらめずにコツコツやる。

今後の課題

- 超並列2次元AMR-PICコードの開発
- 開放境界条件
- 粒子データのソーティング
- 逐次計算効率の向上
- 適合ブロック法の改良
- 数千コア並列以上の場合における最適化
- ソースコードの公開
- マニュアルの作成
- ユーザの拡大

...