

重力多体系の Vlasovシミュレーションとその先

筑波大学 計算科学研究センター

吉川耕司

2023年度 第2回 HPCIC計算科学フォーラム

2024年3月22日

共同研究者： 田中 賢 (京都大学 基礎物理学研究所)

吉田 直紀 (東京大学 Kavli IPMU)

齊藤 俊 (Missouri Sci. & Tech Univ.)

自己紹介

- 筑波大学 計算科学研究センター
宇宙物理研究部門
- 専門分野
 - 宇宙大規模構造、銀河団、銀河間物質
 - 宇宙物理学におけるHPC
(重力多体系、流体力学、輻射輸送)
- 2013年ころからVlasovシミュレーションの研究を始める
 - Yoshikawa, Yoshida, Umemura, ApJ, 762, 116 (2013)
 - Tanaka, Yoshikawa, Minoshima, Yoshida, ApJ, 849, 76 (2017)
 - Yoshikawa, Tanaka, Yoshida, Saito, ApJ, 904, 159 (2020)
 - Yoshikawa, Tanaka, Yoshida, SC '21: Proc. of the International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, Article No. 5, (2021)



本講演の内容

- 宇宙物理学における重力多体系の数値シミュレーション
- 重力多体系のVlasovシミュレーション
- 宇宙大規模構造におけるニュートリノの数値シミュレーション
- N体シミュレーションとの比較
- VlasovシミュレーションのSIMD命令を用いた高速化
- Vlasovシミュレーションの他分野への応用

重力多体系の数値シミュレーション

■ 無衝突自己重力系（重力多体系）

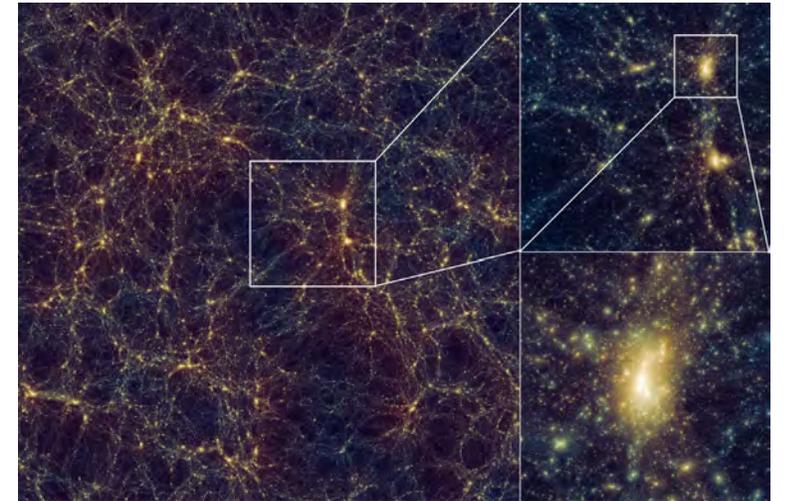
- 非常に多数の質点で構成されていて、個々の質点の運動が系の大域的な質量分布で決定される。
- 重力的に束縛されたダークマター（ダークマターハロー）

銀河・銀河団・宇宙大規模構造

■ 重力N体シミュレーション

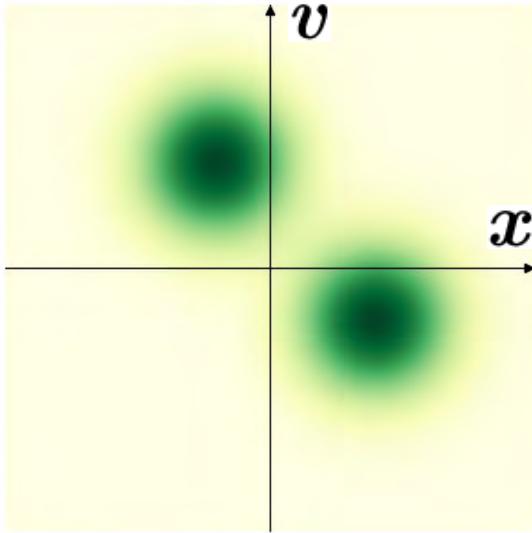
- 無衝突自己重力系の数値シミュレーションでは、これまでほぼ唯一の選択肢。
- 過去数十年にわたって、さまざまな天体形成の研究に利用されてきた。
- 計算手法の改良も長い歴史があり、極めて洗練された手法。
- 今日のテーマは、「これとは全く別の手法に敢えて挑戦しました」というお話。

Ishiyama et al. (2013)

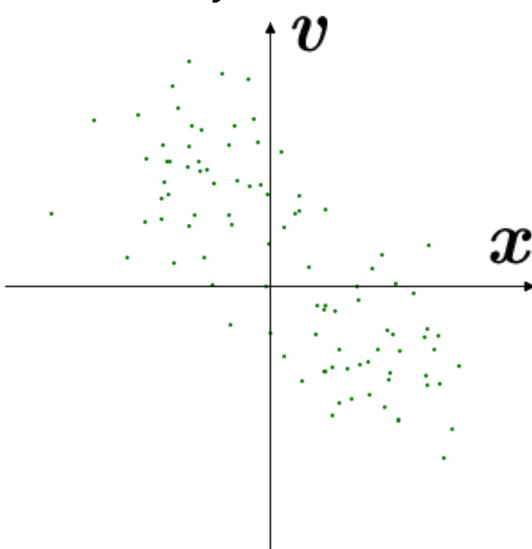


N-body Simulation

phase space distribution



N-body simulation



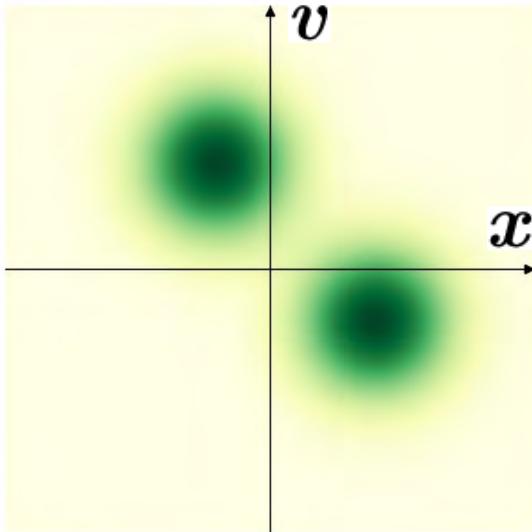
- In collisionless N-body simulations, the matter distribution in phase space is statistically sampled by a set of super-particles.
- The motion of each super-particle is integrated according to the EoM.

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{v}_i \\ \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\nabla\phi(\mathbf{x}_i) \end{cases}$$

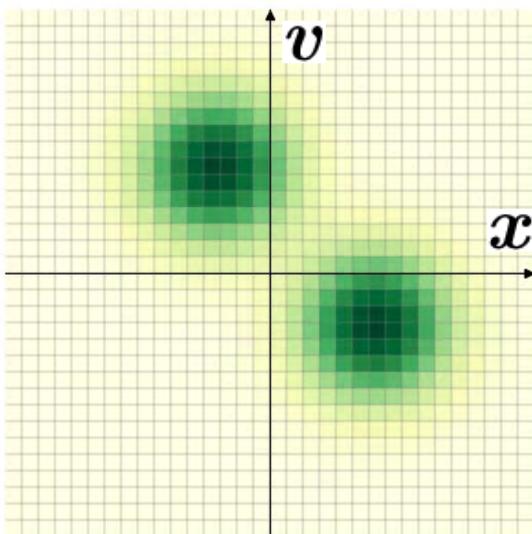
- adaptive resolution : good spatial resolution in high-density regions
- sophisticated schemes for huge number of particles and parallelization
- shot noise contamination associated with statistical sampling
- not good at handling kinematic effect (e.g. free streaming) due to poor sampling at the tail of velocity distribution

Vlasov-Poisson Simulation

phase space distribution



Vlasov simulation



- In Vlasov simulations, the phase space density is discretized directly in a finite volume manner.
- The distribution function is time-integrated in according to the **collisionless Boltzmann equation** (aka **Vlasov equation**).

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} - \nabla \phi \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = 0 \\ \nabla^2 \phi = 4\pi G \rho = 4\pi G \int f d^3 \mathbf{v} \end{cases}$$

- capability to accurately handle the free streaming effect
- free from shot noise
- large amount of memory space and computational cost

World first Vlasov simulation in 6D phase space

Yoshikawa, Yoshida, Umemura (2013)

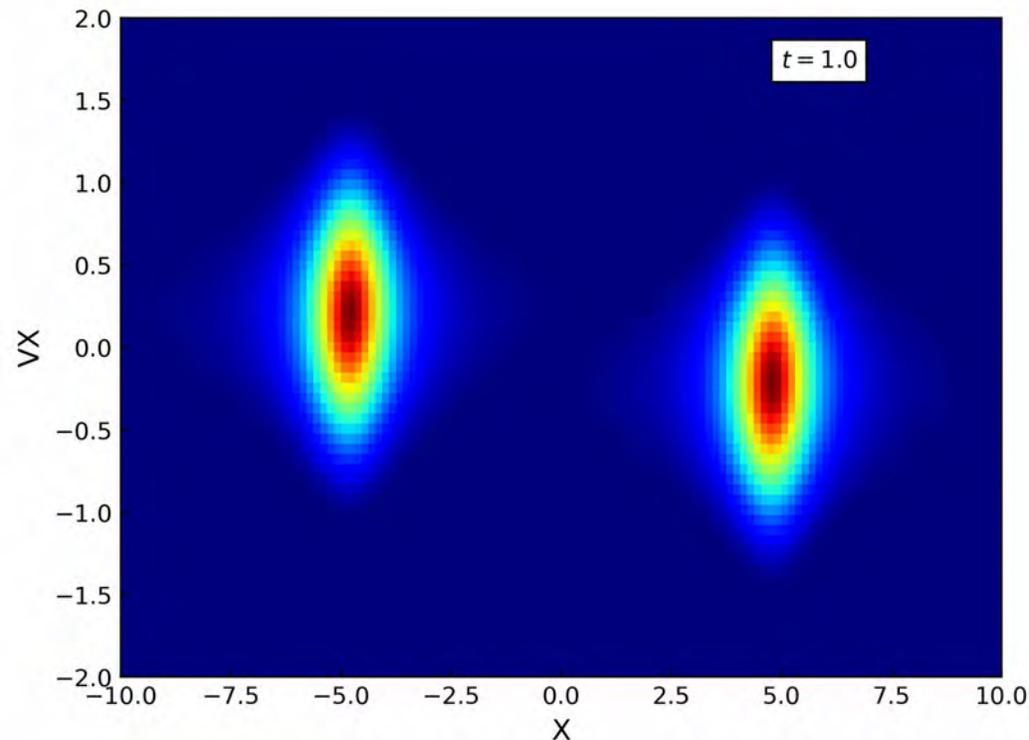
Vlasov-Poisson Simulation

- Head-on collision of two self-gravitating spheres

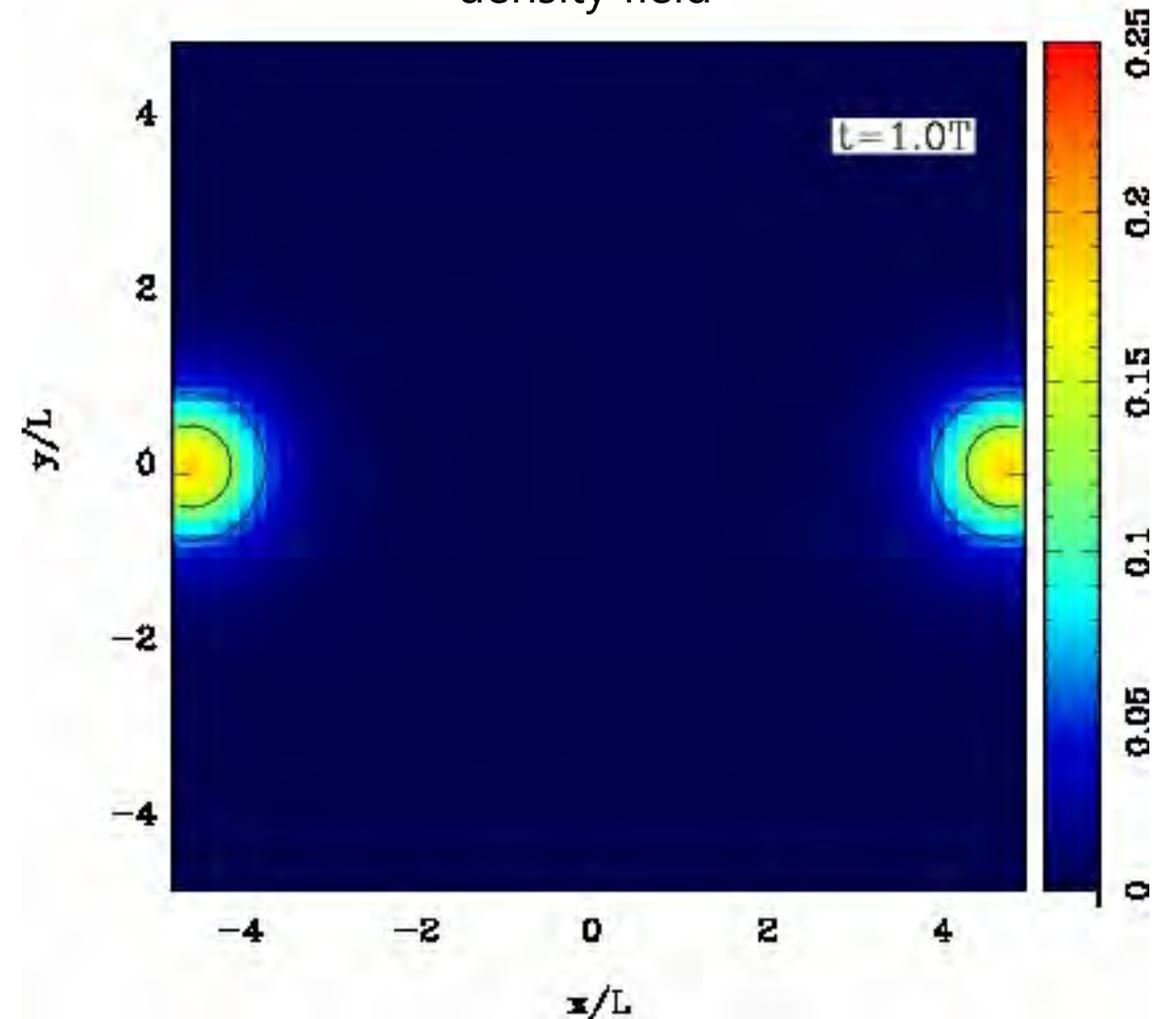
- $N_x=128^3, N_v=64^3$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} - \nabla \phi \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = 0$$

distribution function



density field



宇宙大規模構造形成におけるニュートリノ

■ 宇宙大規模構造

- 宇宙の質量の大半を占める cold dark matter (CDM) の重力によって形成される構造
- ダークマター・ダークエネルギーの正体、宇宙初期の物理状態を調べる手掛かり

■ ニュートリノ

- 質量など基本的な性質が不明な素粒子
- 宇宙初期において他の成分から脱結合したニュートリノ
- ニュートリノとダークマターの重力相互作用
- 宇宙大規模構造の観測によるニュートリノ質量などの解明

■ ニュートリノを取り入れた大規模構造形成シミュレーション

- これまでの研究はN体シミュレーション

Credit: 2dF Galaxy Redshift Survey

Hybrid of Vlasov/N-body Simulation

- ダークマターとニュートリノの2成分系での宇宙大規模構造の数値シミュレーション
- ダークマター成分はN体シミュレーションで計算

速度分散が極めて小さいので速度空間での広がりほぼ無い

$$\frac{d^2 \mathbf{x}_i}{dt^2} + 2H(t) \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = -\frac{\nabla\phi(\mathbf{x}_i)}{a(t)^2}$$

- ニュートリノ成分はVlasovシミュレーションで計算

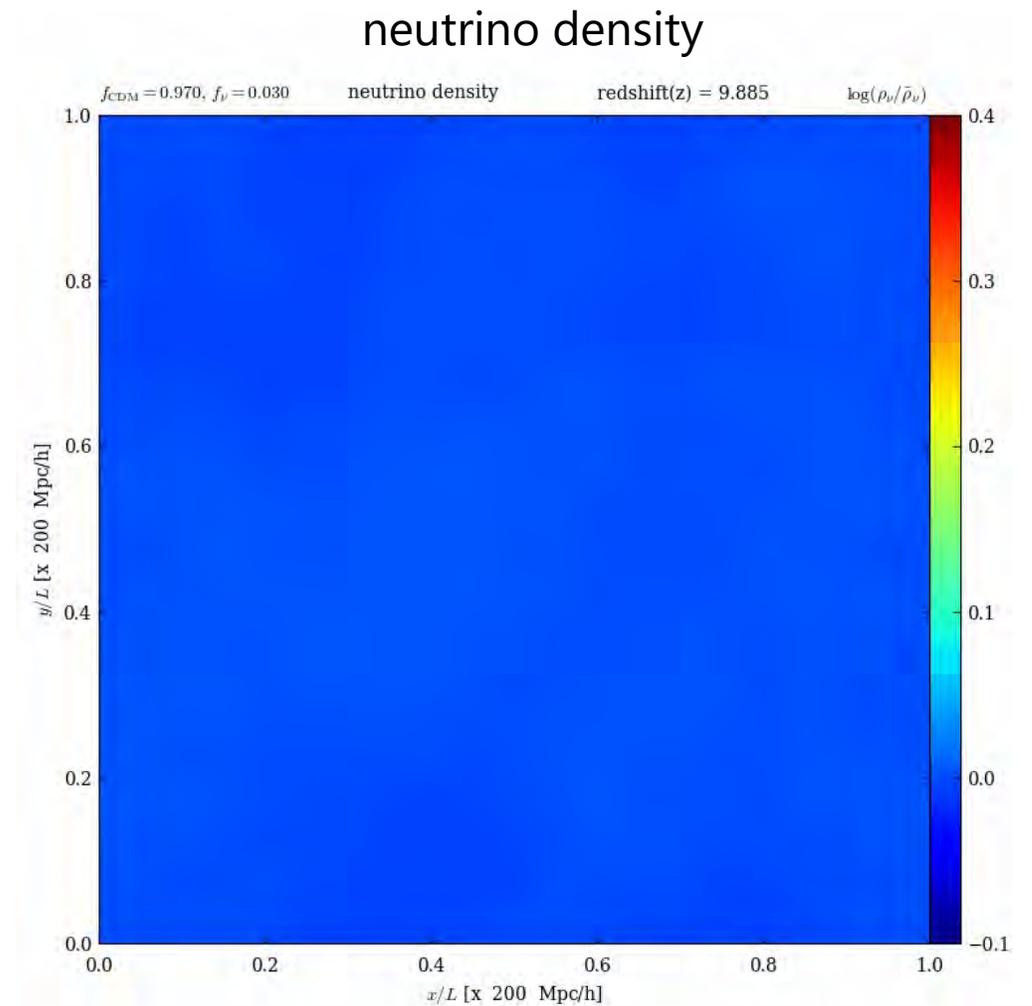
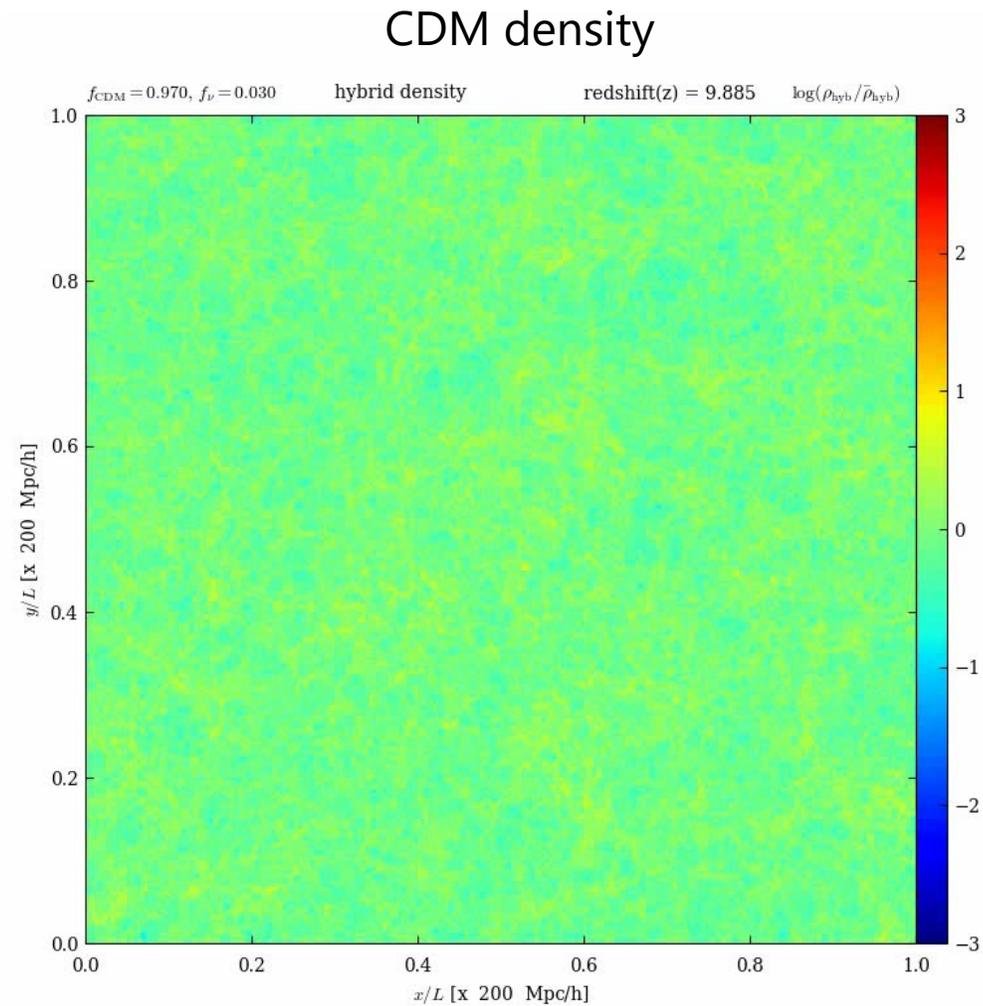
$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{a^2} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} - \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0$$

- ダークマターとニュートリノが感じる重力ポテンシャル

ダークマターとニュートリノの密度分布からPoisson 方程式を用いて計算

$$\nabla^2 \phi = 4\pi G \bar{\rho} a^2 (f_{\text{cdm}} \delta_{\text{cdm}} + f_{\nu} \delta_{\nu})$$

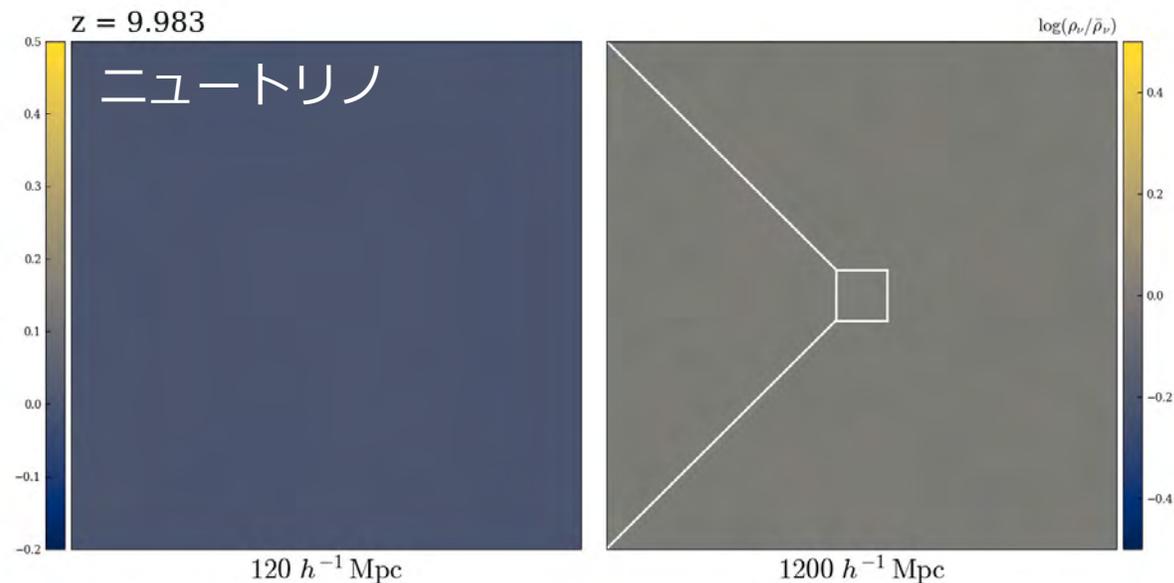
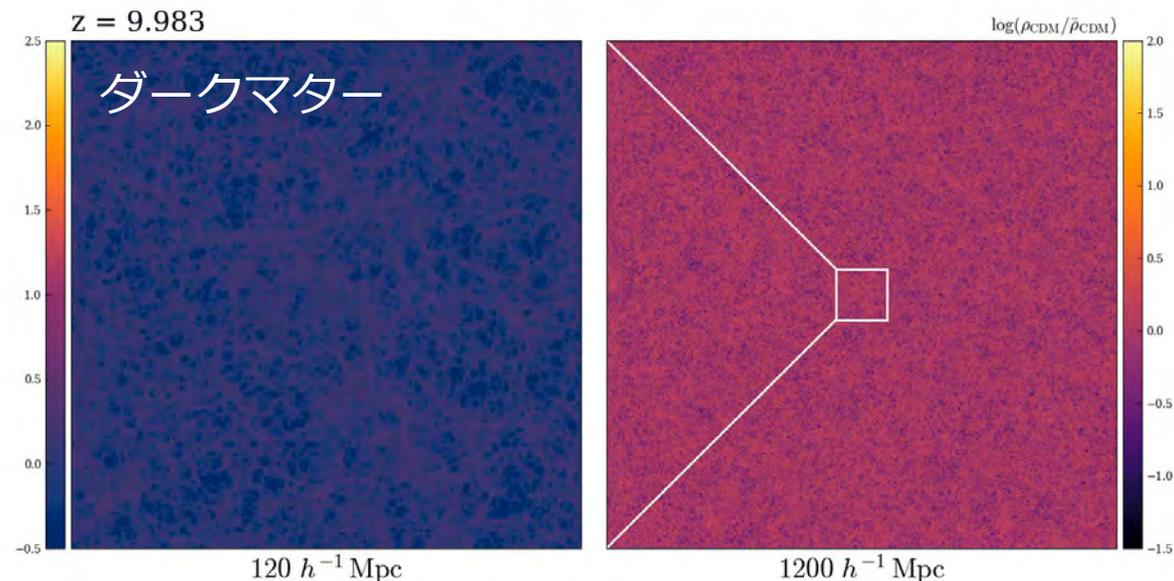
Hybrid of N-body + Vlasov Simulation



富岳の全系によるシミュレーション

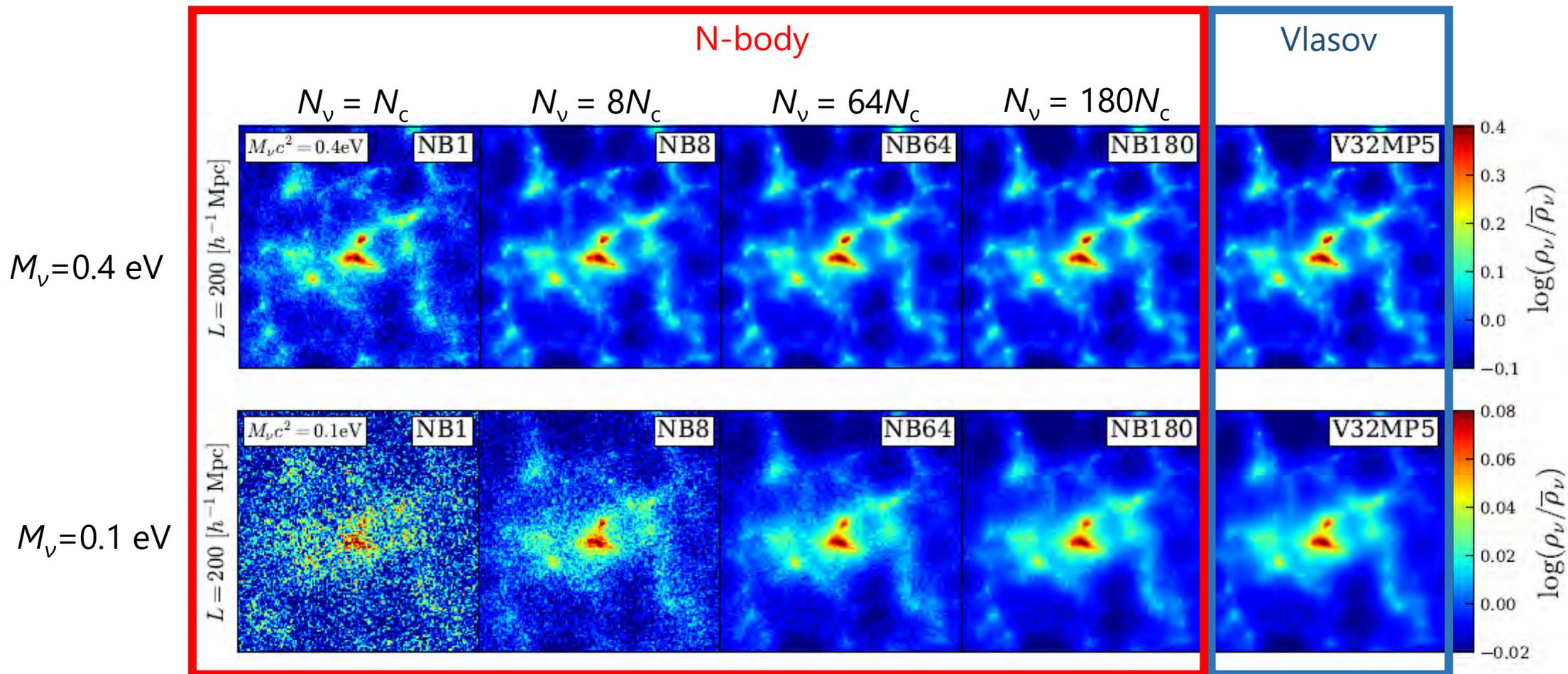
- ダークマター粒子数 : 6912^3
- Vlasov シミュレーションのメッシュ数 : $1152^3 \times 64^3$
- ノード数 : 147456
- Vlasovシミュレーションの部分は strong scaling / weak scaling とともに90%以上の並列化効率
- 2021年の ACM Gordon-Bell Prize のファイナリストに選ばれた。

“A 400 Trillion-Grid Vlasov Simulation on Fugaku Supercomputer: Large-Scale Distribution of Cosmic Relic Neutrinos in a Six-dimensional Phase Space”



N体シミュレーションとの比較

- neutrino density field



N体シミュレーションとの比較

N-body

Vlasov

$N_v = N_c$
NB1

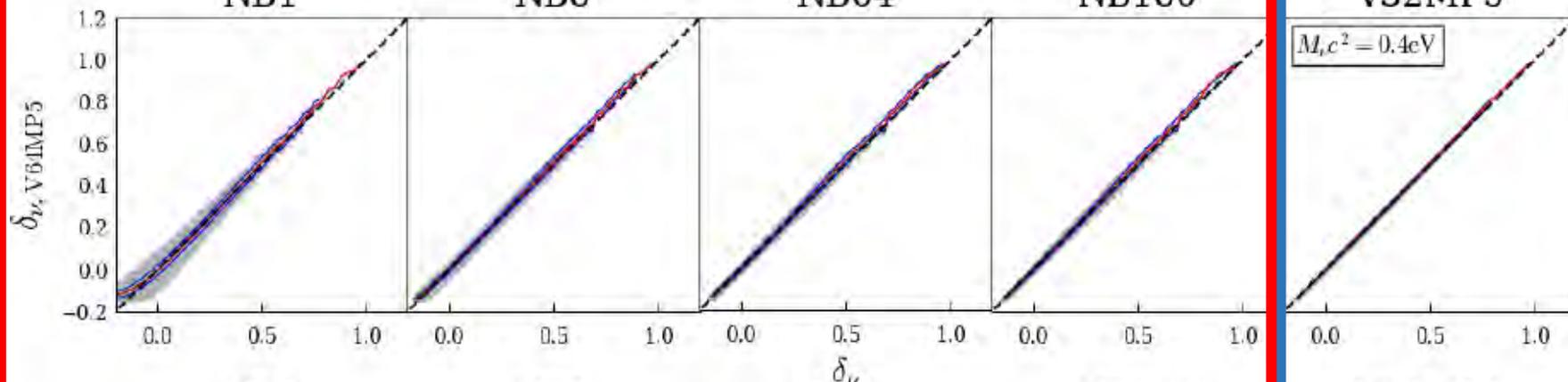
$N_v = 8N_c$
NB8

$N_v = 64N_c$
NB64

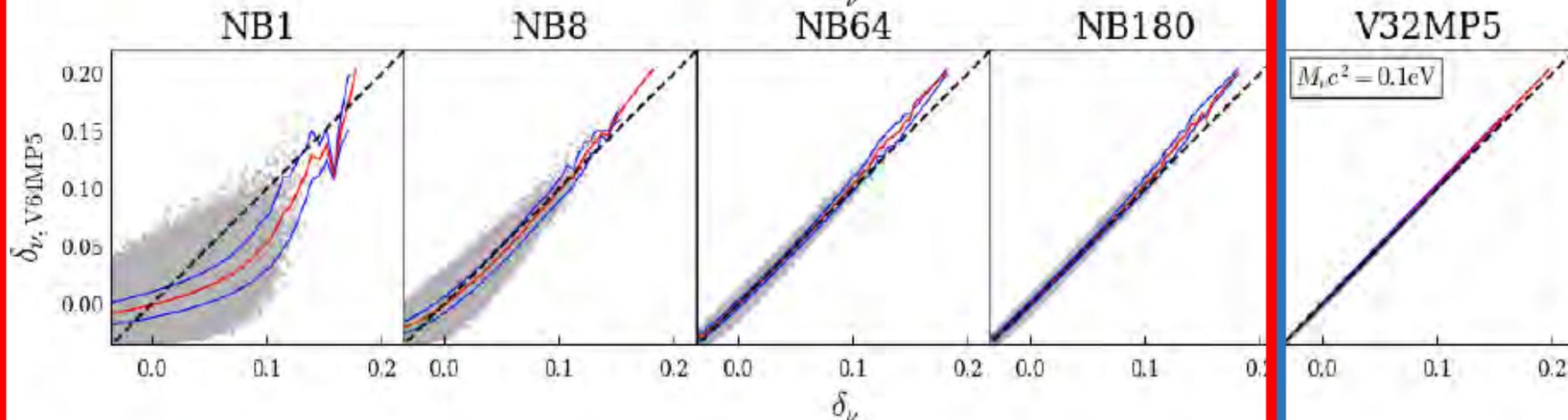
$N_v = 180N_c$
NB180

V32MP5

$M_v = 0.4 \text{ eV}$

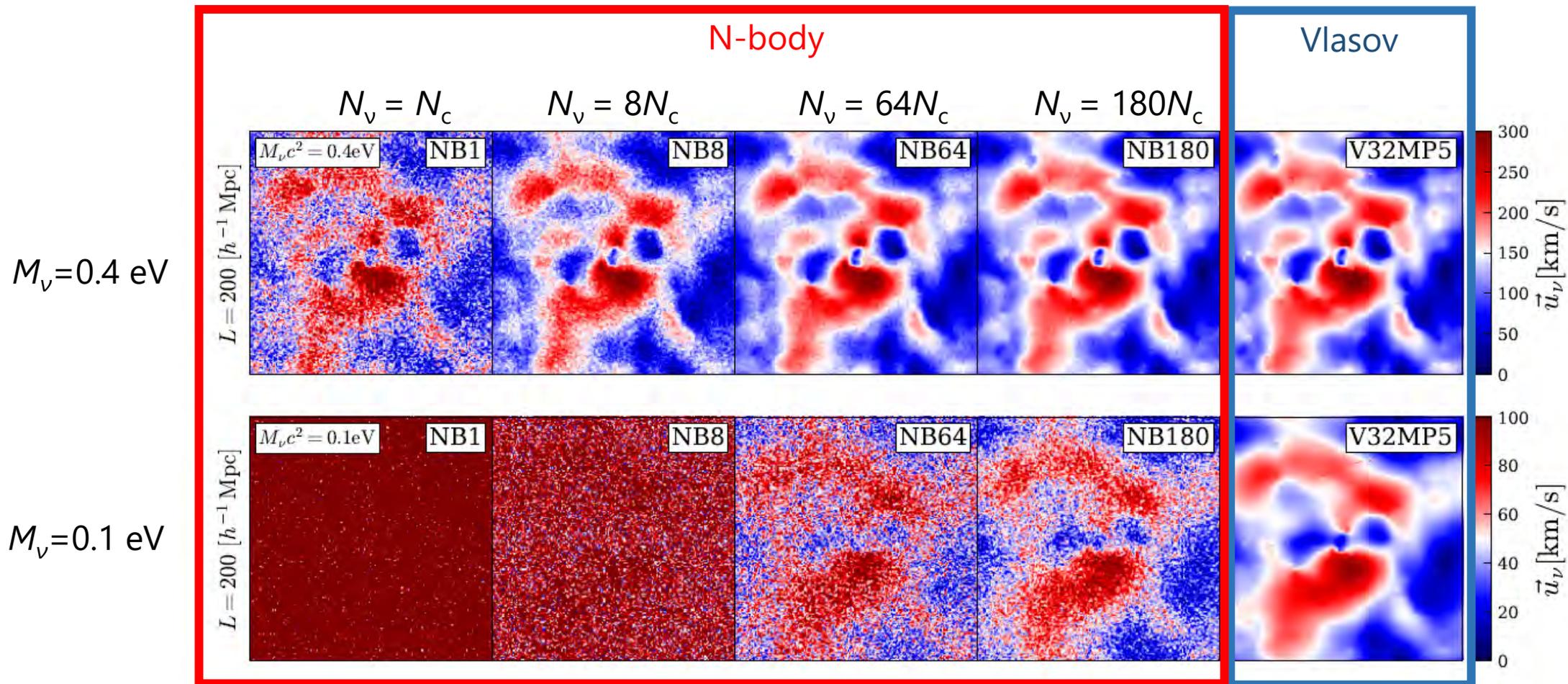


$M_v = 0.1 \text{ eV}$



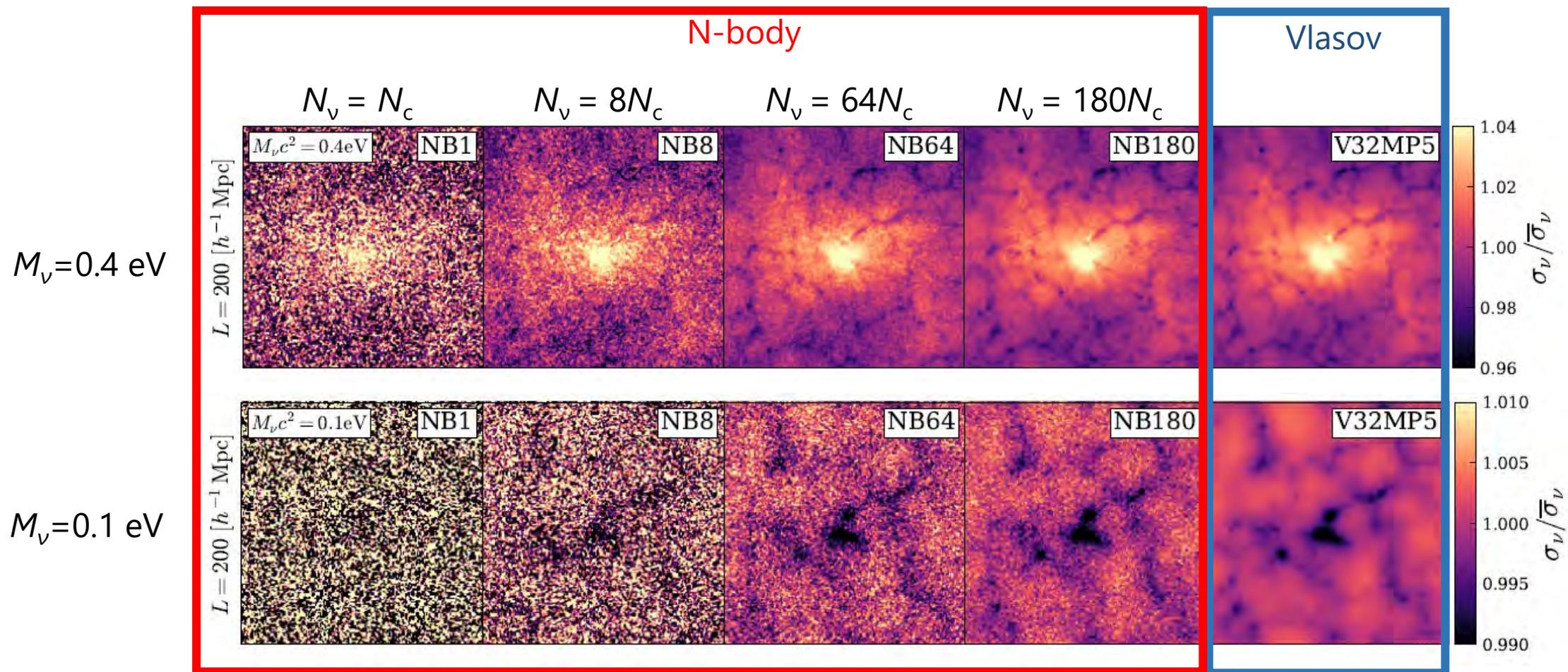
N体シミュレーションとの比較

- neutrino velocity field

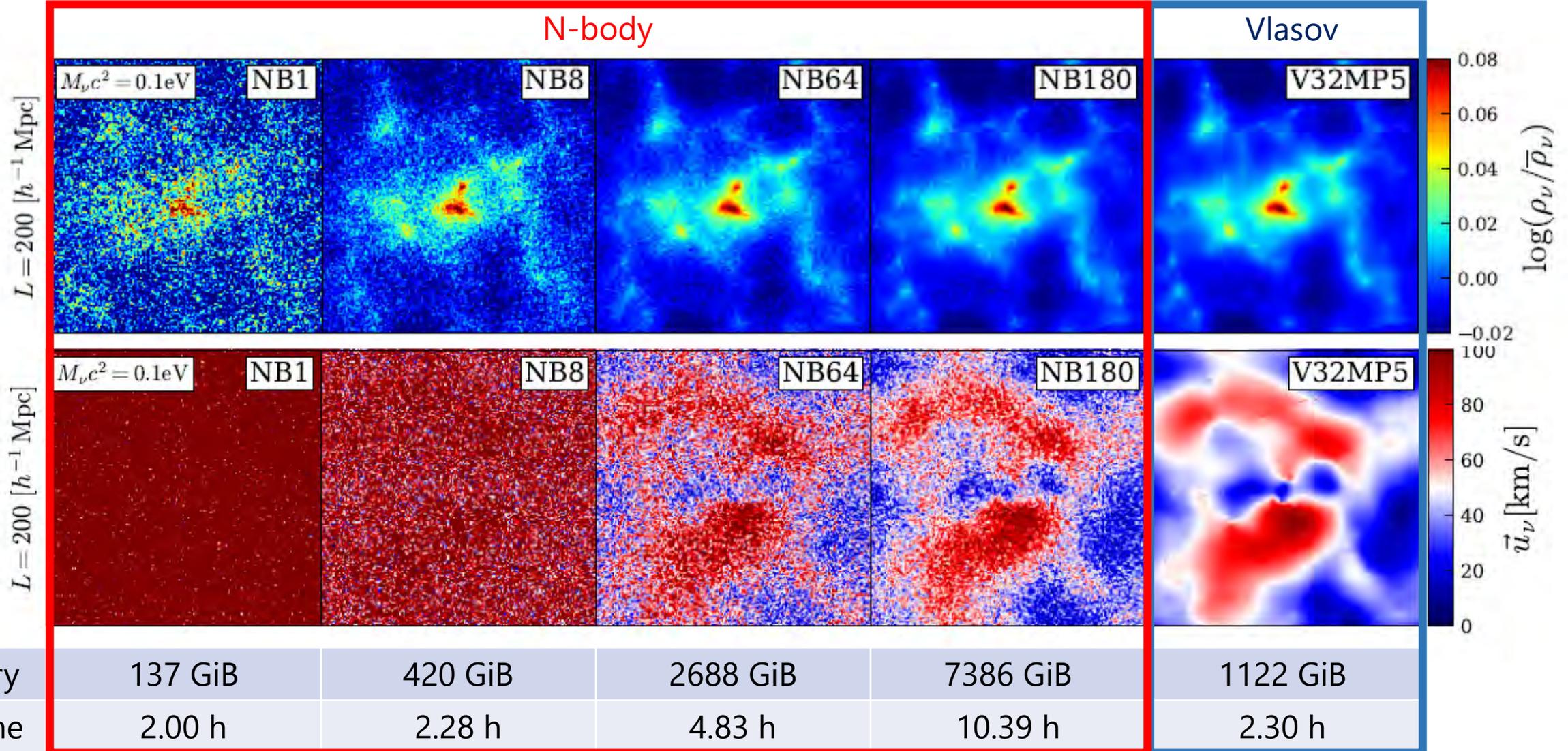


N体シミュレーションとの比較

- neutrino velocity dispersion



Comparison of Numerical Resources

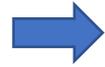


- Vlasov simulation is clearly superior to the N-body approach in the simulation of cosmological neutrinos.

Vlasovシミュレーションの高速化・最適化

■ 数値計算手法

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} - \nabla \phi \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = 0$$



1次元の移流方程式に方向分割

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f}{\partial t} + v_i \frac{\partial f}{\partial x_i} = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial t} - \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial v_i} = 0 \end{array} \right. \quad (i = 1, 2, 3)$$

有限体積法で離散化

■ SIMD命令による高速化

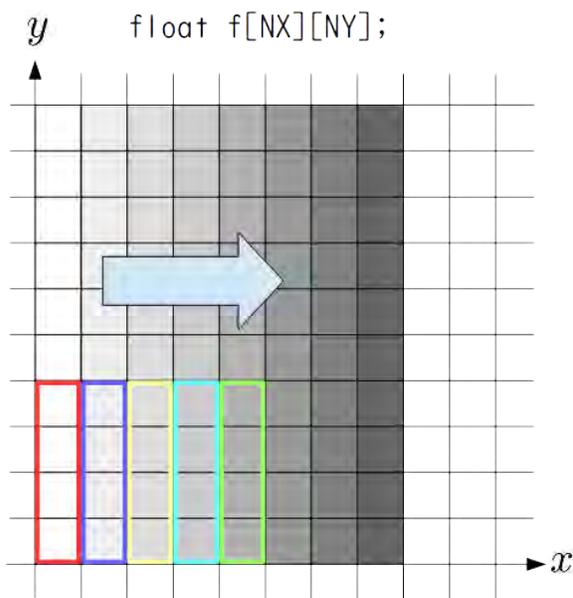
(single instruction multiple data)

f0	f1	f2	f3
+			
g0	g1	g2	g3
f0+g0	f1+g1	f2+g2	f3+g3

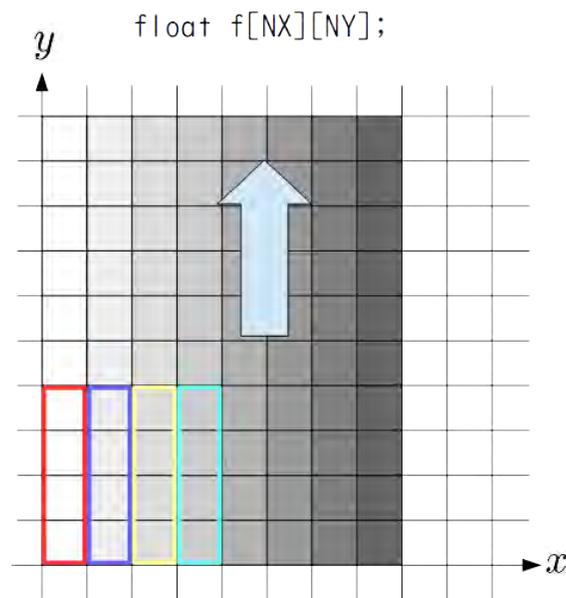
- 複数のデータに対して同じ演算を並列に行う命令
 - プロセッサ内の専用レジスタ上で演算を実行
 - レジスタの大きさは256 bit ~ 512 bit
- 単精度演算を8~16個 } 並列に実行
倍精度演算を4~8個 }

移流スキームのSIMD命令による高速化

- x軸に沿った移流



- y軸に沿った移流



SIMDレジスタ上での
"in-place" なデータの転置



移流スキームのSIMD命令による高速化

```
#define DF(ix,iy,iz) df[((iz)+NMESH_Z*((iy)+NMESH_Y*(ix)))]

for(int ix=0;ix<NMESH_X;ix++) {
  for(int iz=0;iz<NMESH_Z;iz+=vector_length) {
    svfloat32_t r0, r1, r2, r3, r4;

    r0=svld1(pred, &DF(ix,iy,iz));
    r1=svld1(pred, &DF(ix,iy+1,iz));
    r2=svld1(pred, &DF(ix,iy+2,iz));
    r3=svld1(pred, &DF(ix,iy+3,iz));

    svtranspose_4x4_f32(&r0, &r1, &r2, &r3);

    sweep_1d_sve(&r0, &r1, &r2, &r3);

    svtranspose_4x4_f32(&r0, &r1, &r2, &r3);

    svst1( pred, &DF(ix, iy, iz), r0 );
    svst1( pred, &DF(ix, iy+1, iz), r1 );
    svst1( pred, &DF(ix, iy+2, iz), r2 );
    svst1( pred, &DF(ix, iy+3, iz), r3 );

  }
}
```

4x4 データの転置

移流スキームの計算

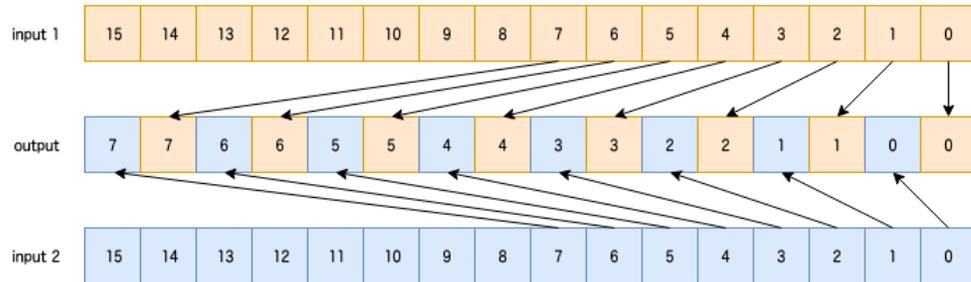
SIMD命令による転置 (SVE命令)

- svzip1 命令と svzip2 命令の組み合わせで実現

- sv{type} svzip1_f32(sv{type} op1, sv{type} op2)

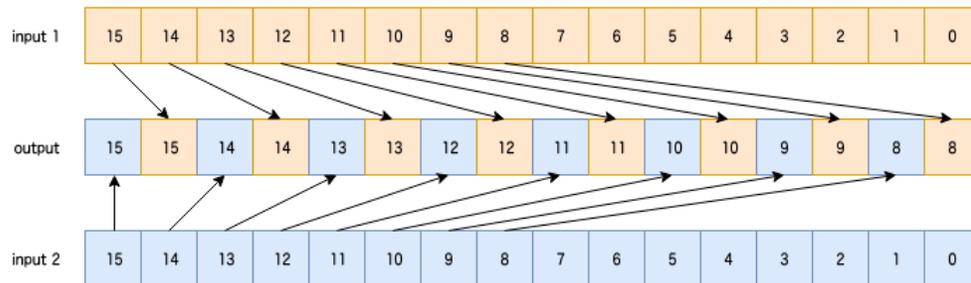
Intel AVXなどの **unpacklo** 命令に相当

ZIP1: Interleave elements from low halves of two inputs

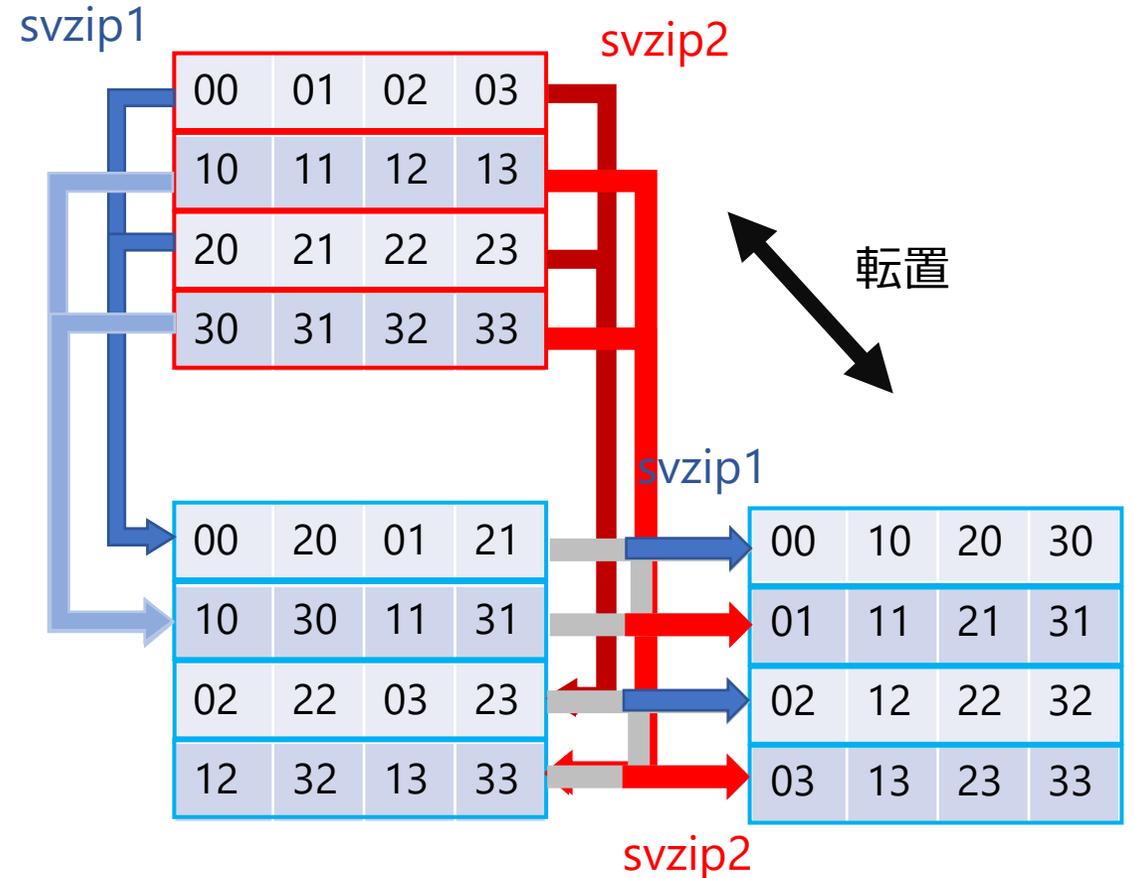


- sv{type} svzip2_f32(sv{type} op1, sv{type} op2)

ZIP2: Interleave elements from high halves of two inputs



- 4x4データ(4つの4要素レジスタ)の転置の例



- 16x16データの転置は64命令で実行可能

富岳における最適化

CMGあたりのVlasovシミュレーションのパフォーマンス

direction	w/o SIMD inst.	w/ SIMD inst.	w/ transposition
v_x	4.84 Gflops	176.7 Gflops	N/A
v_y	7.14 Gflops	233.3 Gflops	N/A
v_z	7.44 Gflops	17.9 Gflops	224.2 Gflops
x	5.51 Gflops	150.0 Gflops	N/A
y	6.88 Gflops	154.1 Gflops	N/A
z	6.50 Gflops	149.2 Gflops	N/A

(cf. 単精度理論ピーク性能 : 1.5Tflops/CMG)

- Vlasovシミュレーションの演算性能は理論性能の12-15%を達成
- (参考)我々の移流スキーム : $B/F = 0.23$

A64FXの単精度浮動小数点演算でのHBM2メモリに対するB/Fは0.18

Further Application : Magnetized Plasma

■ Particle-In-Cell (PIC) simulation

- particle-based method for collisionless plasma
- EoM for protons and electrons

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{q_i}{m_i} \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}_i \times \mathbf{B}}{c\gamma_i} \right)$$

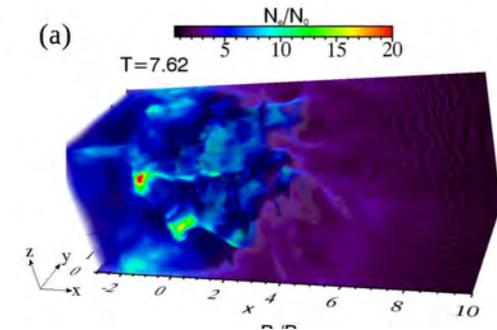
- \mathbf{E} and \mathbf{B} obtained by solving Maxwell eq.

■ Similar drawbacks to grav. N-body simulation

- shot-noise contamination
- mesh spacing in solving Maxwell eq. must be smaller than the Debye scale.

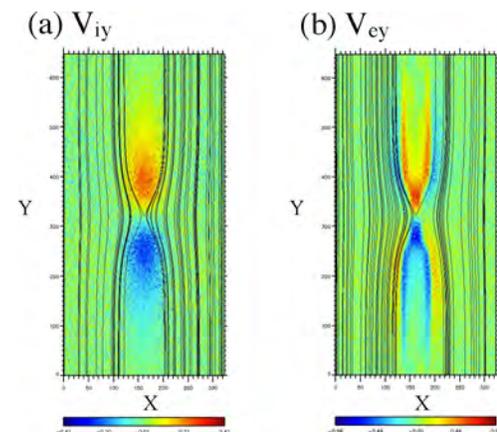
➔ difficult to cover the MHD scales.

3D PIC simulation of collisionless shock



Matsumoto et al. (2017)

PIC simulation of magnetic reconnection



(pCANS web page)

Vlasov-Maxwell Simulation

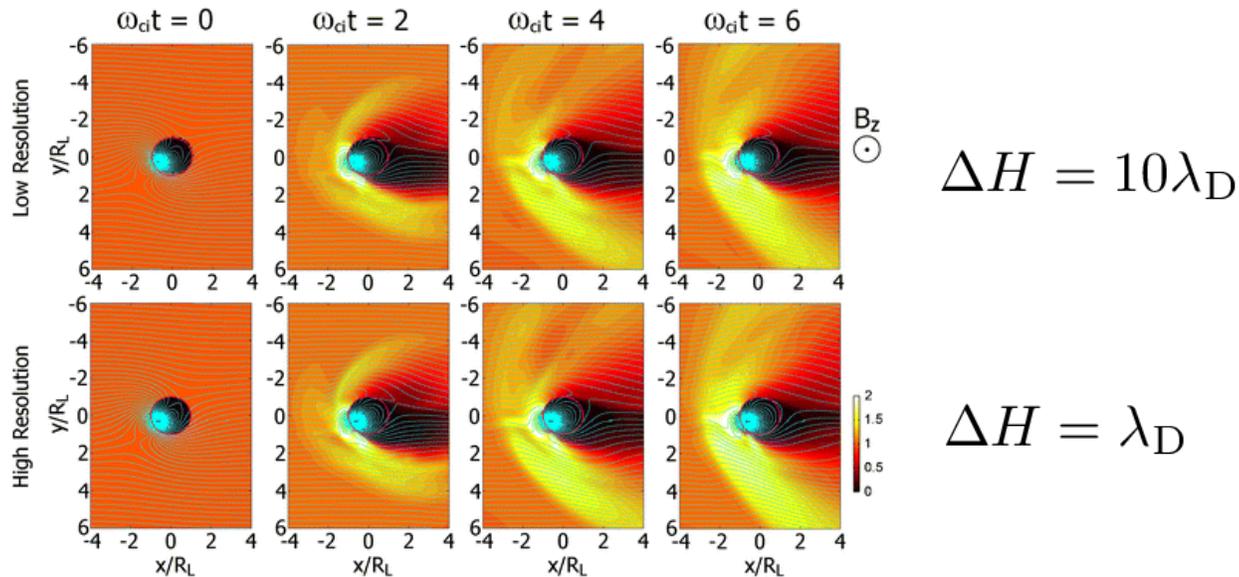
■ Vlasov-Maxwell equation

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \frac{\mathbf{v}}{\gamma} \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{x}} + \frac{q_s}{m_s} \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c\gamma} \times \mathbf{B} \right) \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{v}} = 0$$

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = c\nabla \times \mathbf{B} - 4\pi \mathbf{J} \quad \mathbf{J} = \sum_s q_s \int \frac{\mathbf{v}}{\gamma} f_s d^3 \mathbf{v}$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -c\nabla \times \mathbf{E}$$

■ Mesh spacing not restricted to the Debye scale



- Vlasov-Maxwell simulation of solar wind and planets with weak intrinsic B-field.
- no significant difference between the runs with $\Delta H = \lambda_D$ and $10\lambda_D$
- Vlasov simulation works well even for $\Delta H > \lambda_D$

Solving Gyration around B -field

- rigid body rotation in velocity space

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{v} \times \boldsymbol{\omega}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = 0$$

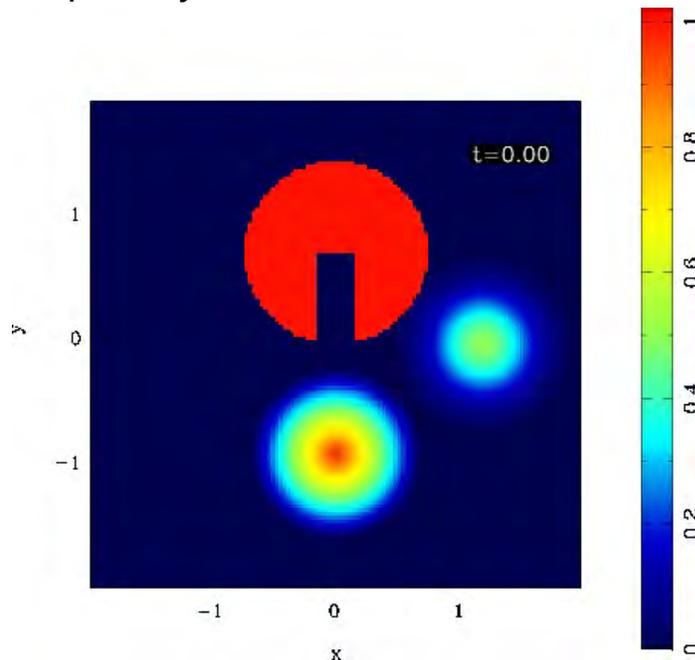
- numerical solution of rigid-body rotation is sensitive to numerical diffusion.

➡ artificial heating of plasma

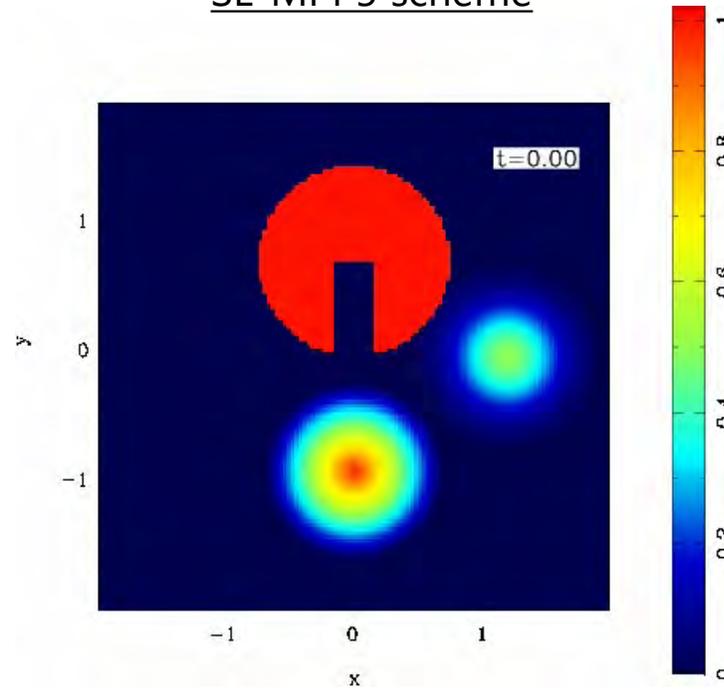
- **SL-MPP5** / **SL-MPP7** schemes

- we found our advection scheme works excellently in rigid-body rotation

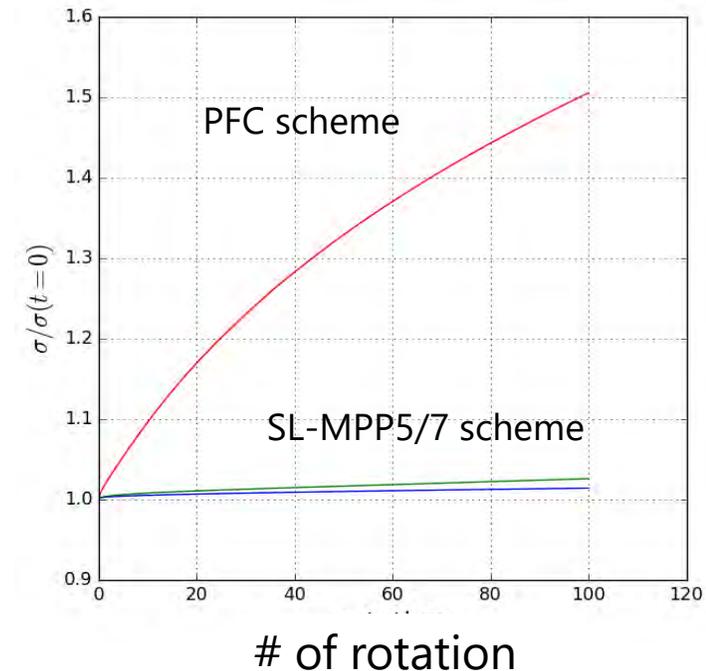
spatially 3rd order PFC scheme



SL-MPP5 scheme



velocity dispersion



Vlasov-Maxwell Simulation

■ Vlasov-Maxwell equation

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \frac{\mathbf{v}}{\gamma} \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{x}} + \frac{q_s}{m_s} \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c\gamma} \times \mathbf{B} \right) \cdot \frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{v}} = 0$$

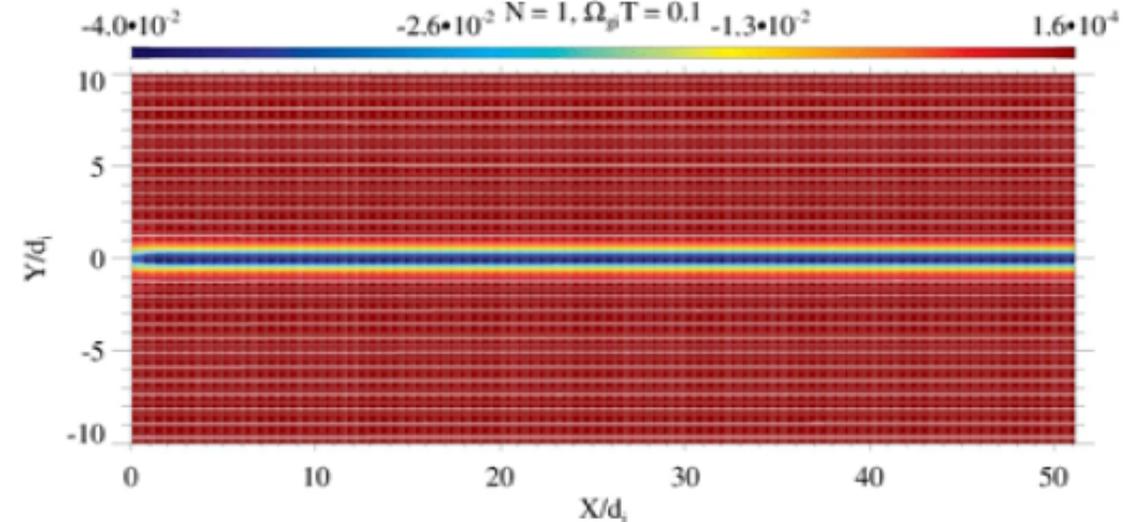
$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = c\nabla \times \mathbf{B} - 4\pi \mathbf{J} \quad \mathbf{J} = \sum_s q_s \int \frac{\mathbf{v}}{\gamma} f_s d^3\mathbf{v}$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -c\nabla \times \mathbf{E}$$

■ Vlasov-Maxwell simulation

- free from shot noise seen in the PIC simulation
- free from the constraint of the minimum scale to the Debye length
- consistent simulation from the kinetic scale to the MHD scale.

■ Vlasov-Maxwell simulation of magnetic reconnection



(simulation by T. Minoshima)

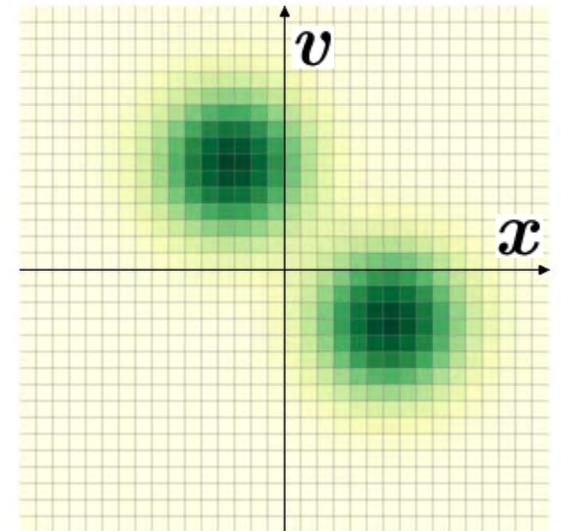
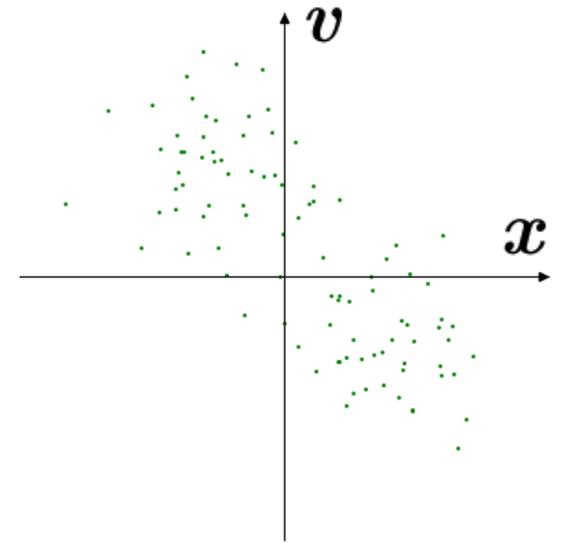
Toward Boltzmann Simulation

- collision term in the Boltzmann equation

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} - \nabla \phi(\mathbf{x}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = Q[f]$$

$$Q[f](\mathbf{v}_1) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{S}^2} [f(\mathbf{v}'_1) f(\mathbf{v}'_2) - f(\mathbf{v}_1) f(\mathbf{v}_2)] |\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1| \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega d^3 \mathbf{v}_2$$

- self-interacting dark matter (SIDM) as a remedy for the CDM crisis in galaxy scales
 - collisional plasma
 - particle-based approach will miss the interaction where particles do not reside in the velocity space
- calculation of the collision term can be significantly accelerated by GPUs
 - we can now conduct the Boltzmann-Poisson simulation in 6D phase space



スペクトル法による衝突項の計算

- フーリエ変換で波数空間へ変換した衝突項を、分布関数の増加に寄与する部分と、減少に寄与する部分で分解する

$$Q[f](\mathbf{v}_1) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} [f(\mathbf{v}'_1)f(\mathbf{v}'_2) - f(\mathbf{v}_1)f(\mathbf{v}_2)] |\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1| \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega d^3\mathbf{v}_2$$

gain項 loss項

フーリエ変換 / 離散化



$$\hat{Q}(\mathbf{k}) = \hat{Q}^+(\mathbf{k}) - \hat{Q}^-(\mathbf{k})$$

gain項

$$\hat{Q}^+(\mathbf{k}) \approx \sum_{r=1}^R \sum_{m=1}^M w_r w_m F(\mathbf{k}, u_r, \hat{\mathbf{n}}_m) \sum_{\mathbf{k}_1=\mathbf{k}-\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_2} \hat{f}(\mathbf{k}_1) \exp\left[-\frac{\mathbf{k}_1 u_r \hat{\mathbf{n}}_m}{2V} \pi i\right] \hat{f}(\mathbf{k}_2) \exp\left[\frac{\mathbf{k}_2 u_r \hat{\mathbf{n}}_m}{2V} \pi i\right]$$

loss項

$$\hat{Q}^-(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}_1=\mathbf{k}-\mathbf{k}_2} \sum_{\mathbf{k}_2} \hat{f}(\mathbf{k}_1) \hat{f}(\mathbf{k}_2) B(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_2)$$

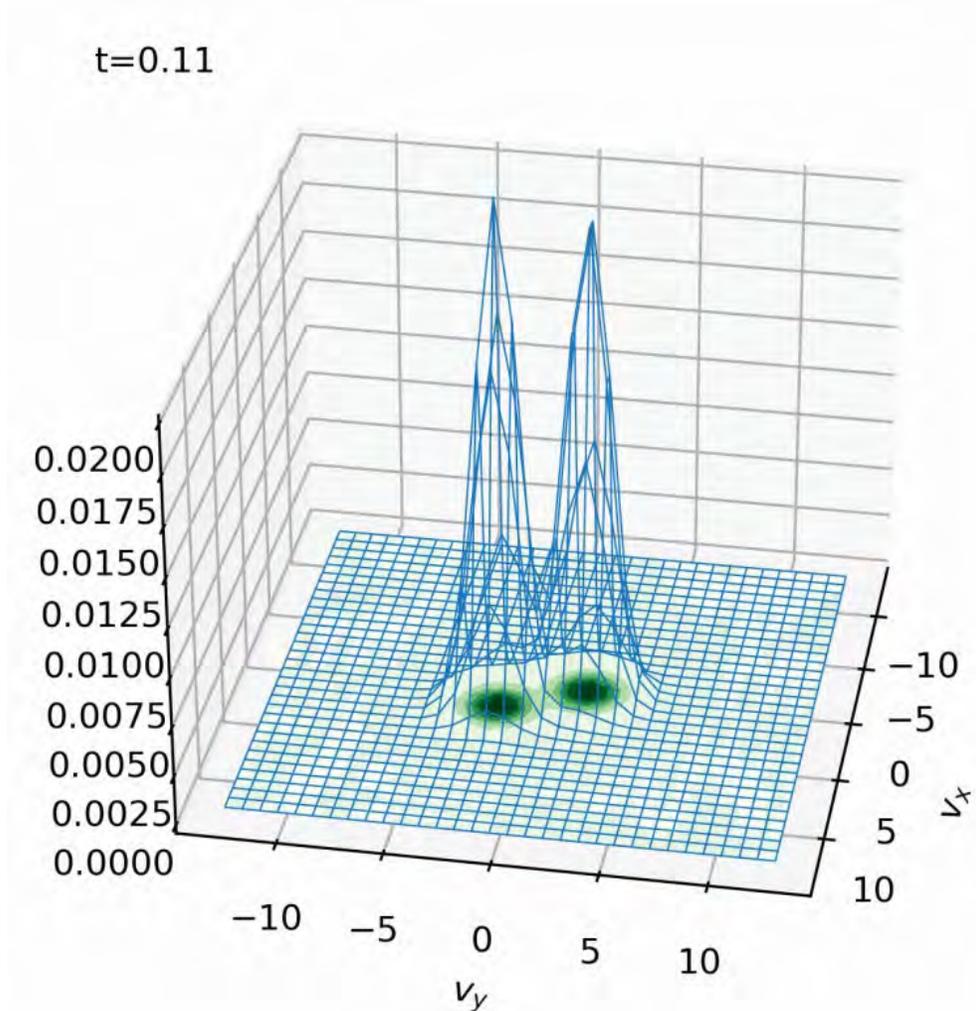
畳み込み計算

- 畳み込み計算をFFTで高速化
- まともに計算すると計算コスト $\propto N^6$ 。FFTを用いることで計算コスト $\propto MN^4 \log N$ ($M \ll N^2$)

スペクトル法による衝突項の計算

	空間メッシュ数 (mesh)	衝突項の計算時間 [msec/step]	Effective wall time [msec/step/mesh]
GPU(A100)	512	593	1.15
CPU	1	1126	1126

- 複数の空間メッシュ内での衝突項の計算を並列化
- 高速フーリエ変換の並列化
- GPUの利用で空間メッシュあたり数百倍の高速化
- 3次元空間(6次元位相空間)でのボルツマン方程式の時間発展の数値シミュレーションが可能。



まとめ

- 6次元位相空間上でのVlasov-Poissonシミュレーションを世界で初めて実現。
- 宇宙大規模構造に付随するニュートリノのダイナミクスのシミュレーションに応用。
- 磁気プラズマの数値シミュレーションにも応用が可能。
- SIMD命令を用いたVlasovシミュレーションの高速化。
- 衝突項を取り入れたBoltzmann シミュレーションへの拡張。