

# ハイパフォーマンスコンピューティングの進展による プラズマ乱流研究のブレークスルー

## Breakthrough in plasma turbulence research with progress of high performance computing

(独) 日本原子力研究開発機構  
システム計算科学センター高度計算機技術開発室  
前山 伸也

磁場閉じ込め型核融合装置におけるプラズマの閉じ込め特性はプラズマ中で生じる乱流輸送により大きく左右される。近年の超並列計算機の性能向上と並列計算技術の開発により、プラズマ乱流シミュレーション研究は大きく進展してきている。本稿では、京コンピュータにおけるプラズマ乱流シミュレーションコードGKVの最適化手法と並列演算性能向上に対する効果について解説する。さらに、コードの大幅な性能向上により実現された、電子/イオン系マルチスケール乱流シミュレーション解析について紹介する。

### 1. はじめに

磁場閉じ込め型核融合炉開発においては、炉心プラズマ物理、超伝導技術、熱流体、炉壁材料、システム技術等の多様な物理的・工学的研究課題が存在するが、中でも大規模な数値計算を必要とするのがプラズマ乱流シミュレーションである。そのため、プラズマ乱流シミュレーション研究では、物理モデルの拡張とともに並列計算手法の開発が精力的に進められている。近年では、スーパーコンピュータ「京」を中核としたハイパフォーマンスコンピューティングインフラストラクチャー (HPCI) の活用を目的としたHPCI戦略プログラム分野4「次世代ものづくり」(2011年度～) や、核融合シミュレーションコードのエクサスケールに向けた大規模並列化・高性能化を多国間協力関係の下で進めるG8多国間国際研究協力事業NuFuSE (2011年度～2013年度) といった、計算科学との連携も活発に行われており、その研究成果はプラズマ・核融合分野のみならず、計算科学分野においても高く評価されている [1]。

以下では、磁場閉じ込め型核融合装置とプ

ラズマ乱流について簡単に触れ (第2節)、プラズマ乱流の数値シミュレーションについて説明する (第3節)。その後、京コンピュータにおける並列計算の最適化手法 (第4節)、パフォーマンス向上 (第5節) について解説した後、コードの大幅な性能向上により新たに実現された電子/イオン系マルチスケール乱流シミュレーション解析について紹介する (第6節)。

### 2. 磁場閉じ込め型核融合装置とプラズマ乱流

核融合エネルギーは、燃料資源が豊富であることや高レベル放射性廃棄物が少なく環境負荷が低いことから、長期的な代替エネルギー源として期待されている。最も研究開発の進んでいる核融合エネルギーへのアプローチは、強力な磁場によって高温・高圧のプラズマを環状装置に閉じ込めて、熱核融合反応を引き起こす方法である (図1)。このような磁場閉じ込め核融合装置の閉じ込め性能は、プラズマ中の電磁的な揺らぎを伴う乱流による輸送に大きく影響される。そのため、プラズマ乱流は核融合研究の中心的課題の一つであ

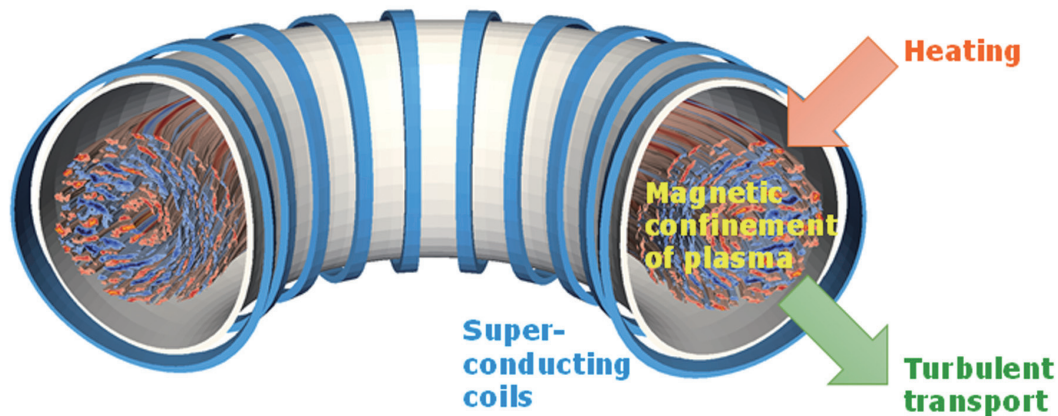


図1 磁場閉じ込め核融合装置概念図。環状に配置した超伝導コイルの作る強力な磁場でプラズマを閉じ込め、外部加熱（または核融合反応による内部加熱）により高温・高圧に保つことで熱核融合反応を引き起こす。プラズマ中で生じる電磁的揺らぎが作る乱流輸送によって閉じ込め特性が左右される。

る。高温・高圧のプラズマ内部で起こる微細な乱流構造の直接計測は困難であるため、数値シミュレーションによる乱流輸送の評価・予測が求められる。

核融合プラズマは装置サイズ（～数m）に比べて格段に長い平均自由行程（～10km）を持つため粒子軌道や波・粒子共鳴といった流体モデルでは表せない粒子の運動論的効果が重要となる。そのため、プラズマ乱流を記述する第一原理的方程式として、理論・数値解析に広く用いられているのがジャイロ運動論である。ジャイロ運動論は、プラズマ乱流の時間スケールが強力な閉じ込め磁場のローレンツ力による荷電粒子の旋回運動（サイクロトロン運動）の周期よりも非常に長いことを利用して、旋回位相について平均化した方程式である。粒子速度は磁力線平行方向速度  $v$  と磁気モーメント  $\mu$ （磁力線垂直方向速さに関連した量）のみで記述されるように簡約化される。同時に、旋回位相やサイクロトロン周波数の依存性が方程式系から除去されるため、数値計算コストが削減されるという利点がある。しかしながら、粒子位置3次元に加

えて、粒子速度2次元を考慮しなければならないため、通常の3次元流体シミュレーションと比較すると大規模な数値計算が必要となる。

プラズマ乱流の空間スケールは荷電粒子の旋回半径と同程度であり、燃料水素イオンでは～数mm程度、電子では～0.1mm程度である。両者は質量比の平方根  $(m_i/m_e)^{1/2} \sim 43$ （水素イオンの場合）倍だけスケールが離れているため、従来はスケール分離を仮定した単一スケール乱流解析が主に行われてきたが、両者は中間スケールの波との非線形結合を介して相互作用しうる。そのため、プラズマ乱流は本質的に電子スケールとイオンスケールを同時に含むマルチスケール物理である。しかしながら、電子とイオンの時間・空間スケールを同時に解像したマルチスケールシミュレーションは、単一スケールシミュレーションと比べて大幅に計算コストが増大する。

上述のように、プラズマ乱流を理論的・数値的に解析するには、運動論効果とマルチスケール性が課題となる。これらを解き明かす一つの直接的な手段であるジャイロ運動論に

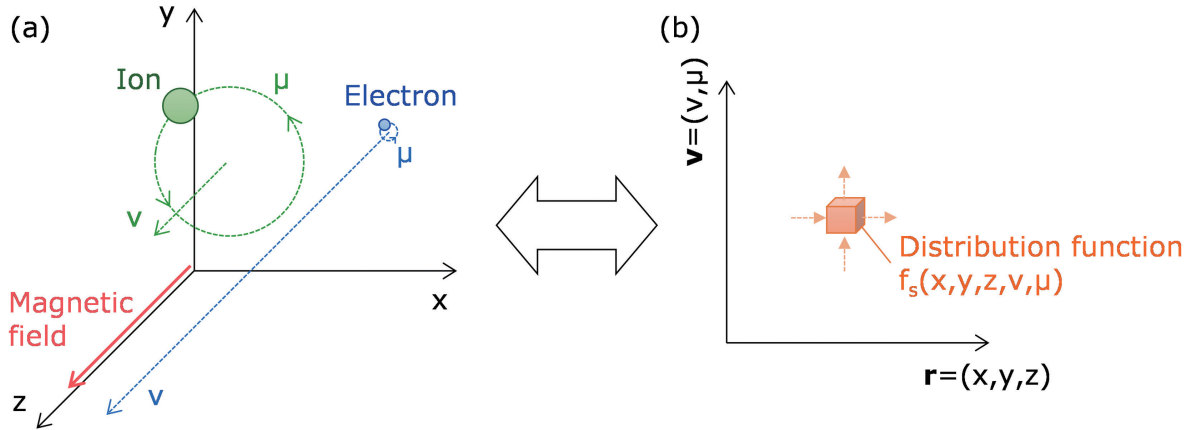


図2 (a) Lagrange的(粒子的)描像:様々な位置(x, y, z)にいる様々な速度(v,  $\mu$ )を持った電子やイオン(s=i, e)の運動としてプラズマの挙動を扱う。(b) Euler的(連続体的)描像:ある位置、ある速度の粒子の存在確率を表す分布関数  $\tilde{f}_s(t; x, y, z, v, \mu)$  の変化としてプラズマの挙動を扱う。

基づくマルチスケール乱流シミュレーションは、ハイパフォーマンスコンピューティングとしても挑戦的な課題である。マルチスケール性による空間高解像度に加え、速い電子の運動と遅いイオンの応答を同時に取り扱うために大きな時間ステップ数を必要とするため、現実的な時間で計算を行うためにはストロングスケリングの向上が極めて重要となる。

### 3. プラズマ乱流の数値シミュレーション

ジャイロ運動論に基づくプラズマ乱流シミュレーションは、歴史的にはLagrange的(粒子的)描像に基づいたParticle in Cell (PIC) 法によるシミュレーション [図2 (a)] が先行して開発された。その背景としてPIC法は比較的小さなメモリでも計算が可能であったことが挙げられる。一方、近年のメモリ容量の増大により、Euler的(連続体的)描像に基づいた格子法によるシミュレーション [図2 (b)] が可能となった。粒子ノイズ除去や計算精度の安定性向上などの理由から、現在では後者が主流となっている。

その基礎方程式は5次元位相空間における分布関数揺動  $\tilde{f}_s(t; x, y, z, v, \mu)$  の時間発展を表すVlasov方程式である。

$$\frac{\partial \tilde{f}_s}{\partial t} + \mathbf{v}_{gy} \cdot \nabla \tilde{f}_s + \frac{dv}{dt} \frac{\partial \tilde{f}_s}{\partial v} = C_s + S_s, \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{v}_{gy}$  はジャイロ中心速度を表し、プラズマは電磁揺動による力を受けて磁力線垂直方向にドリフト運動する。 $dv/dt, C_s, S_s$  はそれぞれ磁力線平行方向加速度、粒子間のクーロン衝突を表す衝突項、平衡分布による寄与を表す。電磁揺動ポテンシャル  $\tilde{\phi}, \tilde{A}$  は、分布関数揺動の速度モーメントとして与えられる電荷密度・電流密度揺動  $e_s \tilde{n}_s, e_s \tilde{u}_{\parallel s}$  によって、以下のPoisson-Ampère方程式から自己無撞着に決定される。

$$\nabla_{\perp}^2 \tilde{\phi} = -\frac{1}{\epsilon_0} \sum_{s=i,e} e_s (\tilde{n}_s + \tilde{n}_{s,pol}), \quad (2)$$

$$\nabla_{\perp}^2 \tilde{A} = -\mu_0 \sum_{s=i,e} e_s \tilde{u}_{\parallel s}, \quad (3)$$

(ここで、 $\tilde{n}_{s,pol}$  はジャイロ中心位置と粒子位

置のずれによる分極密度である。)式(1-3)によって閉じた方程式系が構成される。物理的には、平衡分布における密度勾配や温度勾配といった熱力学的な力がプラズマ中の揺らぎの駆動源として働く。そうして駆動された電磁揺動による分布関数揺動の非線形移流過程によって、揺らぎの非線形混合が起こり乱流状態へと発展する。

数値計算の観点からは、式(1)は各粒子種(s)についての5次元位相空間(x, y, z, v,  $\mu$ )における数値流体力学(CFD)計算とみなすことができる。磁力線垂直方向への局所性や統計的一様性を仮定することで、中性流体と同様にフーリエスペクトル法による高精度計算が適用される。乱流のダイナミクスが重要となる磁力線垂直方向にはフーリエスペクトル法を、その他の次元方向には差分法を用いてプラズマ乱流の数値解析を行うのが、ジャイロ運動論的シミュレーションコードGKV [2, 3]である。主要な計算は磁力線垂直方向座標x, yに関するフーリエスペクトル法、磁力線平行方向座標zおよび速度空間座標v,  $\mu$ に関する4次または5次精度差分法、電荷密度・電流密度を求めるための速度空間・粒子種v,  $\mu$ , sに関する積分であり、これと4次精度陽的Runge-Kutta-Gill法を組み合わせて乱流揺動の時間発展を計算する。

#### 4. GKVコードの並列計算モデルと京コンピュータにおける最適化

##### 4.1 分散・共有メモリ型並列計算機におけるハイブリッド並列モデル

京コンピュータは82,944の計算ノードからなる大規模分散・共有メモリ型並列計算機である。計算ノード間はTofuインターコネクトと呼ばれる6次元メッシュトラスポロジーを持ったネットワークで接続されており、適応性の高い3次元トラスネットワークをユーザに提供する。計算ノードは8つの

プロセッサコアを内蔵したCPUと16GBの共有メモリ、ノード間データ通信用インターコネクトコントローラで構成されている。このような階層的メモリ構造を持った並列計算機においては、ノード間の分散メモリ並列にはMessage Passing Interface (MPI)を、ノード内の共有メモリ並列にはOpen Multi-Processing (OpenMP)を用いる方法が効果的である。GKVコードでもMPI/OpenMPハイブリッド並列を実装し、計算ノードあたり1つのMPIプロセスを割り当て、さらに計算ノード内で8つのOpenMPスレッドを立ち上げることで8つのプロセッサコアで並列処理を行う。

##### 4.2 多次元領域分割

MPIを用いた並列化には、各MPIプロセスが異なる計算領域を担当するように領域分割を用いる。多次元・多粒子種の問題であることを活用し、図3のようにx(またはy), z, v,  $\mu$ , sについての5次元領域分割を適用する。複数の次元で領域分割することは、各ノード間の通信量を低く抑えるとともに、通信に参加するMPIプロセスの部分集合の要素数が小さくなるためMPI通信におけるレイテンシ(データ転送を要求してから実際に転送されるまでの遅延時間のこと。通信に参加するMPIプロセス数に比例。)を抑える観点からも効果的である。

5次元領域分割を適用するにあたり、フーリエスペクトル法におけるx, y方向の並列高速フーリエ変換(FFT)のための転置通信、z, v,  $\mu$ 方向の差分演算のための一対一通信、v,  $\mu$ , s方向の積分のための総和通信といった複数のMPI通信が必要になる。MPI通信は領域分割により生じた余剰の処理なので、演算に比べてできるだけ低く抑えたい。しかし、並列数の増加に伴い、通信コストと演算コストの比は一般的に増大していく。そのため、数万ノード規模の並列スケラビリティ



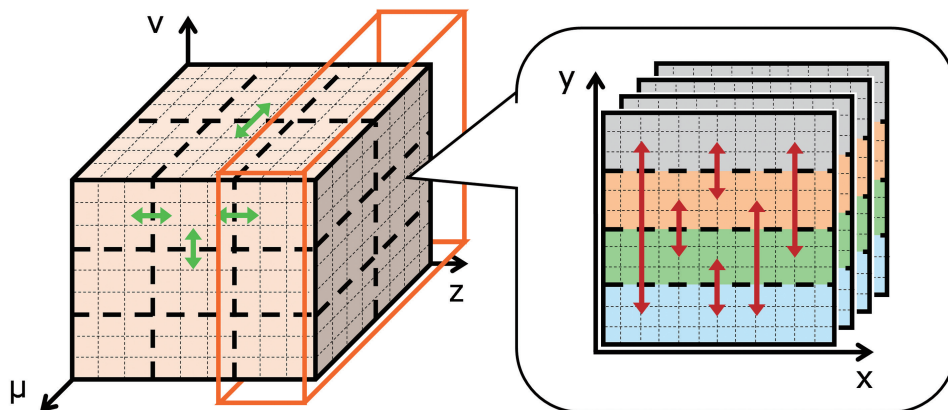


図3 5次元位相空間における領域分割。それぞれの粒子種 $s$ について、 $z, v, \mu$ 方向は3次元ボックス状に分割し、それぞれのボックス内でさらに $x$ （または $y$ ）方向への1次元領域分割を行う。全体として粒子種1次元+空間4次元の5次元領域分割となる。必要となるMPI通信として、並列FFTに関する転置通信（赤矢印）、差分演算に関する1対1通信（緑矢印）、電化密度・電流密度を求める総和通信（橙棒）を代表的に示す。

を実現するにはMPI通信のコストを削減することが重要となる。

#### 4.3 3次元トラスネットワークにおけるMPIプロセス配置最適化

格子計算を行うCFDアプリケーションを数万ノード上で並列実行する際に、メッシュ/トラストポロジーを持つネットワーク構造はよいスケーラビリティを得やすい。インターコネクットの性能を最大限に引き出すためにはネットワークトポロジーに留意した最適化が必要となるが、その効果は具体的なアプリケーションに依存する。ここでは、多次元・多粒子種問題における通信コストを3次元トラスネットワーク上で最小化すべく、セグメント化プロセス配置を考案した（図4）。キーとなるアイデアは、最も負荷の大きい $x, y$ 方向の転置通信に関与するMPIプロセスを3次元ネットワーク上で個別に密集させることである（その集団の単位をセグメントと呼ぶことにする）。これにより、それぞ

れの転置通信を各セグメント内に閉じ込めることができ、通信帯域を最大限に活用して通信コストを最小化できる。さらに $z, v, \mu$ 方向の1対1通信も隣接するセグメント間のみで行い、かつ、 $v, \mu, s$ 方向の総和通信も3次元ネットワークの各平面内に収まるようにMPIプロセス配置を設計することで、これらの通信コストも極小化する。これにより通信コストを大幅に減少させることが可能となった。

#### 4.4 通信と演算のオーバーラップ

さらに、通信コストを実効的にマスクするためには、通信と演算のオーバーラップが有効である。ここでは、図5に示すように、OpenMPの1スレッドを通信スレッドとして利用する方法[4]を用い、並列FFTや差分演算における通信と演算の同時処理のために、異なる次元方向に関する計算の独立性を用いて、パイプライン化オーバーラップを適用した[5]。通信スレッドを利用して、通

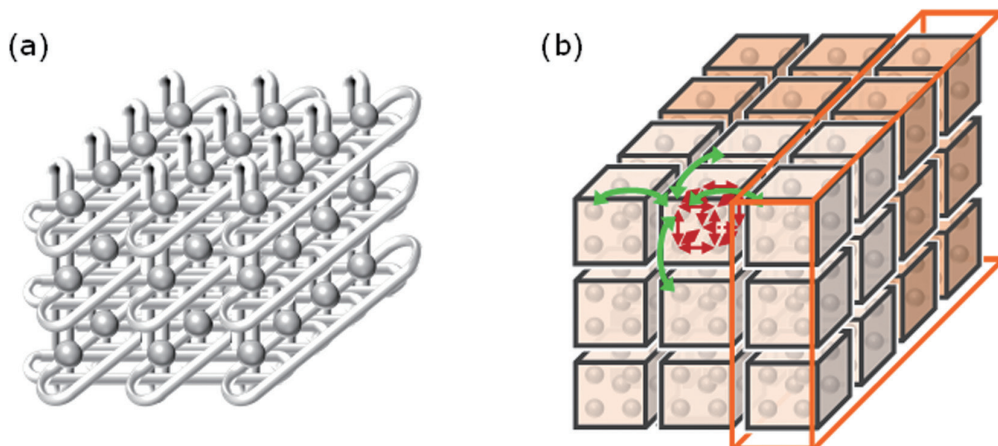


図4 (a) 3次元トーラスネットワーク構造と(b)セグメント化プロセス配置最適化。並列FFTに関する転置通信(赤矢印)、差分演算に関する1対1通信(緑矢印)、電化密度・電流密度を求める総和通信(橙枠)を代表的に示す。

信と演算のオーバーラップを行うというアイデア自体は従来も研究されてきた。しかし、効果的に通信コストをマスクするためには注意深い実装が必要である。具体的には、通信コストをマスクするのに十分な量の演算処理を確保するために演算カーネルの再配置を行うこと、パイプライン数を適切に選ぶこと(細かいパイプライン化はオーバーラップできる演算量を増やすが、同時にMPIレイテンシの増加も招く)、スレッド並列におけるタスクの粒度を適切に調整すること(小さな粒度への細分化はロードバランスを向上させるが、同時にスケジューリングに関わるオーバーヘッドの増加も招く)などに注意が必要である。GKVコードにおいては、5次元空間に対応した多重ループに対して、パイプライン数・タスク並列化の粒度の調整を行った。さらにOpenMPのDYNAMICスケジューリングを用いることで、通信スレッドも通信完了後に演算処理に加わるようコーディングを行った。これにより、MPIのレイテンシの増

加やOpenMPのロードインバランス、スケジューリングオーバーヘッドを抑制しつつ、効率的な通信と演算の同時処理が可能となった。

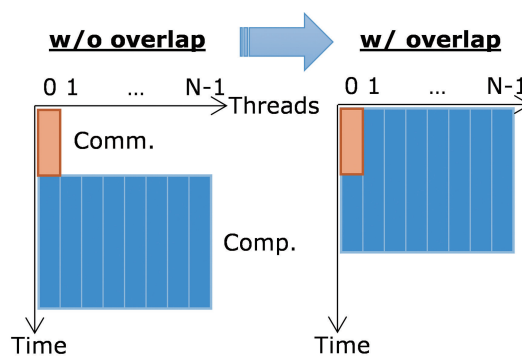


図5 通信スレッドを利用した通信と演算の同時処理。

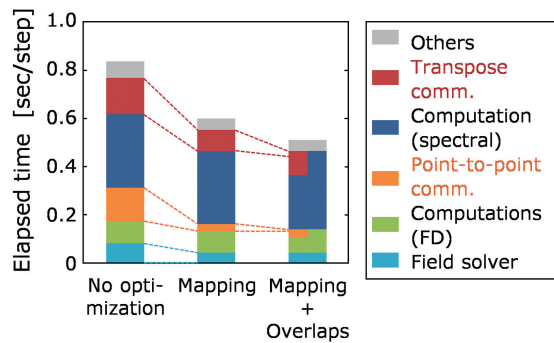


図6 最適化なし、プロセス配置最適化、通信と演算の同時処理の場合の性能比較。(問題規模： $256 \times 256 \times 32 \times 32 \times 32 \times 2 = 43$ 億格子点、並列数：4096コア)

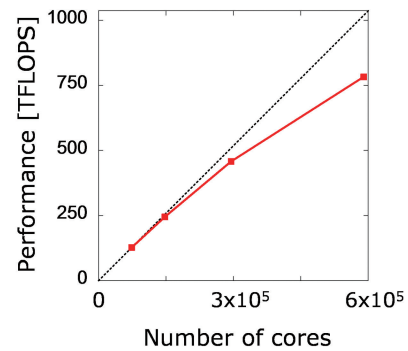


図7 京コンピュータにおけるGKVコードのストロングスケーリング。(問題規模： $1024 \times 1024 \times 96 \times 96 \times 32 \times 2 = 6200$ 億格子点)

## 5. パフォーマンス

マルチスケール乱流計算の性能評価を行う前に、スケールダウンしたテストケースで、最適化手法による性能向上の効果を検証した。通信と演算の同時処理は分散・共有メモリ型並列計算機における共通技術のため、京コンピュータのみならず、原子力機構のBX900 (2134計算ノード、4プロセッサコア/計算ノード、ファットツリーインフィニバンド)においても性能向上が得られることが確認された。しかしながら、並列FFTを行うx, y方向に高解像度を必要とするマルチスケール乱流計算をBX900上で実行した場合、転置通信のコストがFFTの演算コストに比べて大きく、そのため通信コストを十分にマスクできないという結果になった。一方、3次元トラスネットワークを持つ京コンピュータ上では、図6に示すようにプロセス配置の最適化により通信コストが大幅に削減された。そのため、演算とのオーバーラップにより通信コストは実効的にマスクされ、演算性能の向上が実現された。

GKVコードの京コンピュータにおけるストロングスケーリングを図7に示す。多次元領域分割、プロセス配置最適化、通信と演算

のオーバーラップにより、京コンピュータのフルシステム規模の約60万コアまでの良好なストロングスケーリングが得られた。60万並列実行における並列化効率は76.8%、演算性能は786.4TFLOPS、理論ピーク性能比は10.79-8.29%で推移し、アムダール則より見積もられる実効並列化率は99.99994%となり、100万コア級並列への適用可能性を実証した。こうして、大幅な並列性能向上により、電子/イオン系マルチスケール乱流シミュレーションを実行する見通しを得た。

## 6. マルチスケール乱流シミュレーション

これまでの多くのプラズマ乱流シミュレーションでは、スケール分離を仮定して電子またはイオンの単一スケールのみの解析が行われてきた。これは、乱流を駆動する微視的不安定性の線形解析において、イオンスケールで起こるイオン温度勾配不安定性と電子スケールで起こる電子温度勾配不安定性は時間・空間スケールとも質量比の平方根 ( $m_i/m_e$ )<sup>1/2</sup>~43倍だけ離れているためである。しかしながら、両者の間には非線形性を介したマルチスケール相互作用が存在しうるため、スケール分離の仮定は自明ではない。マルチスケ

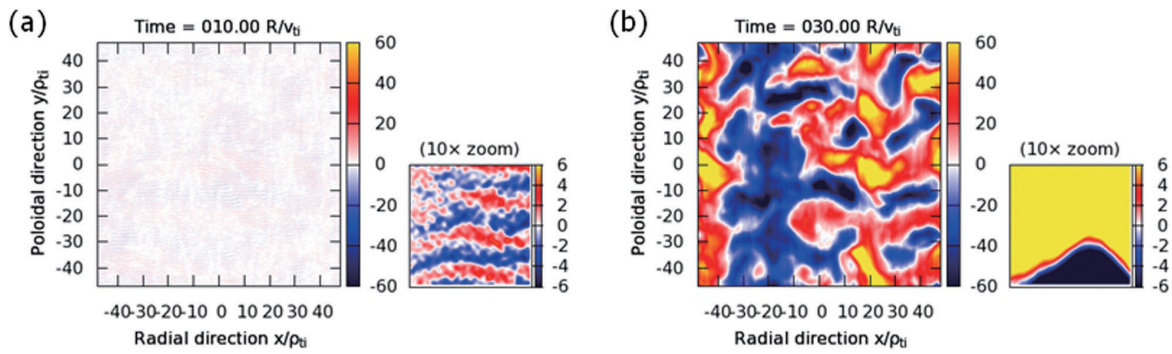


図8 電子／イオン系マルチスケール乱流シミュレーションにおける静電ポテンシャル揺動のスナップショット [(a)初期飽和時と(b)定常時]。図はトラス垂直断面の局所領域(イオン旋回半径の100倍程度)と、それをさらに10倍に拡大した領域を表示している。(a)初期は成長率の大きい電子スケール乱流が卓越するが、(b)定常状態ではイオンスケール乱流が支配的になる。

ール乱流の直接シミュレーションでは、大きくスケールの離れた2つの乱流駆動源を同時に解像しつつ時間発展を解く必要があるため、京コンピュータ上で最適化されたGKVコードにより初めて解析が可能となった。典型的な計算量は $2 \times 10^{11}$ 格子点、 $3 \times 10^5$ 時間ステップ程度であり、12,288計算ノード(98,304プロセッサコア)を用いて120時間程度の計算コストがかかる。図8にマルチスケール乱流シミュレーションにおける静電ポテンシャル揺動のスナップショットを示す。初期は成長の速い電子温度勾配不安定性により電子スケールの乱流が卓越する。このとき、半径方向に長く伸びた渦構造を形成し、電子熱輸送を引き起こす。この構造はストリーマと呼ばれ、従来、電子熱輸送を担う物理過程と考えられてきた。しかし、成長の遅いイオン温度勾配不安定性によるイオンスケールの乱流が徐々に成長し、定常状態ではイオンスケール乱流が卓越する。同時に、電子スケールのストリーマが抑制されることがマルチスケール乱流シミュレーションにより明らかになった。そのため、最終的な定常状態ではイオンスケール乱流が電子熱輸送を担う。こうして、大きくスケールの離れた実質量比の電

子スケール乱流とイオンスケール乱流においてもマルチスケール相互作用が重要となり、イオンスケール乱流による電子スケール乱流の抑制が起こることが示された。

## 7. おわりに

超並列計算機と計算手法の進展により、従来は実現不可能であった大規模シミュレーション解析が核融合プラズマ研究にブレークスルーをもたらしている。しかし、演算性能を引き出すためには高度な並列アプリケーション開発が求められ、その実現のためには物理モデル・計算機の両方に対する深い理解が必要となる。ここでは、プラズマ乱流のジャイロ運動論的シミュレーションという多次元問題に合わせた5次元領域分割モデル、京コンピュータの3次元トラスネットワークに最適化したセグメント化プロセス配置、分散・共有メモリ型並列計算機に適合した通信スレッドを用いた通信と演算のパイプライン化オーバーラップといった並列計算手法を実装し、約60万コアまでの良好なストロングスケールリングと99.99994%という高い実効並列化率を達成した。ストロングスケールリングの向上は、多数の時間ステップを計算する必



要があるマルチスケール乱流シミュレーションの実現のために無くてはならない要素であった。こうして高速化されたGKVコードにより、実質量比の電子・水素系におけるマルチスケールプラズマ乱流シミュレーションを実現し、開発した計算手法の有効性を実証した。また、このシミュレーションの結果から、大きくスケールの離れた実質量比の電子・水素系においても両者の相互作用が重要であること、イオンスケール乱流によって電子スケールの乱流が抑制され、電子熱輸送においてもイオンスケール乱流が支配的になることを新たに明らかにした。こうした電子/イオン系マルチスケール乱流の直接シミュレーションはマルチスケール相互作用のモデル化や電子熱輸送評価に貢献する貴重なデータを提供すると期待される。

#### 謝辞

本研究はHPCI戦略プログラム分野4「次世代ものづくり」およびG8多国間国際研究協力事業NuFuSEの支援を受けました。また、筆者はJSPS科研費26800283の助成を受けました。本研究の主要な計算は理化学研究所の京コンピュータにおいて行われ、通信と演算の同時処理の汎用性検証には日本原子力機構のBX900を、マルチスケール乱流の線形解析には国際核融合エネルギー研究センター計算機シミュレーションセンター (IFERC-CSC) のHeliosを利用しました。

#### 参考文献

- [1] S. Maeyama, T.-H. Watanabe, Y. Idomura, M. Nakata, M. Nunami, A. Ishizawa, The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC13), Denver, USA (2013).
- [2] T.-H. Watanabe, H. Sugama, Nucl. Fusion 46 (2006) 24-32.
- [3] S. Maeyama, A. Ishizawa, T.-H. Watanabe, N. Nakajima, S. Tsujiiio, H. Tsutsui, Comput. Phys. Commun. 184 (2013) 2462-2473.
- [4] Y. Idomura, M. Nakata, S. Yamada, M. Machida, T. Imamura, T.-H. Watanabe, M. Nunami, H. Inoue, S. Tsutsumi, I. Miyoshi, N. Shida, Int. J. High Perform. Comput. Appl. 28 (2014) 73-86.
- [5] S. Maeyama, T.-H. Watanabe, Y. Idomura, M. Nakata, M. Nunami, A. Ishizawa, Plasma Fusion Res. 8 (2013) 1403150.