

令和2年度高性能汎用計算機高度利用事業
「富岳」成果創出加速プログラム
「核燃焼プラズマ閉じ込め物理の開拓」
成果報告書

令和3年5月28日
国立大学法人東海国立大学機構
名古屋大学

渡邊智彦

目次

1. 補助事業の目的	- 2 -
2. 令和2年度（報告年度）の実施内容	- 2 -
2-1. 当該年度（令和2年度）の事業実施計画	- 2 -
2-2. 実施内容（成果）	- 3 -
2-3. 活動（研究会の活動等）	- 28 -
2-4. 実施体制	- 28 -

補助事業の名称

「富岳」成果創出加速プログラム 核燃焼プラズマ閉じ込め物理の開拓

1. 補助事業の目的

人類初の持続的核融合燃焼プラズマの実現を目指し、国際熱核融合実験炉 ITER の建設がフランスで進められている。ITER などの核燃焼状態の維持には、装置内部のプラズマ密度や温度分布がいかんにして形成され、また、電磁場揺らぎをともなって自発的に発生する擾乱に対してプラズマがどのように応答するかを理解することが極めて重要となる。こうした核燃焼プラズマ挙動の本質的理解と予測性能の向上が求められている状況を踏まえ、本課題では以下の4つのサブテーマに関し、「富岳」を活用した超大規模シミュレーションによる研究開発を推進する。

このため、代表機関の国立大学法人東海国立大学機構は、協力機関の国立研究開発法人日本原子力研究開発機構、大学共同利用機関法人自然科学研究機構核融合科学研究所、国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構、と共同で業務を実施する。

国立大学法人東海国立大学機構は、上記の目的を達成するため、以下の4つのサブテーマ（[1]，[2]，[3]，[4]）に関する研究開発とそのとりまとめを行うとともに、プロジェクトの全体推進を担当する。

2. 令和2年度（報告年度）の実施内容

2-1. 当該年度（令和2年度）の事業実施計画

(1) サブテーマ[1] 核燃焼プラズマのマルチスケール乱流輸送シミュレーション

(1-A) 「富岳」での局所乱流輸送解析コードの性能評価および検証の実施

「富岳」において局所乱流輸送解析コード GKV の実行環境を整備し、多粒子種マルチスケールシミュレーションの実行性能評価と検証を行う。

(1-B) イオンスケール乱流計算による重イオン輸送の数値実験

重イオン成分を導入しイオンの運動スケールに対して分解能を持つプラズマ乱流シミュレーションを実施し熱および粒子輸送特性の評価を行う。

(2) サブテーマ[2] 核燃焼プラズマの自発回転と過渡応答

(2-A) 「富岳」での大域的乱流輸送解析コードの性能評価および検証の実施<協力機関：国立研究開発法人日本原子力研究開発機構>

「富岳」において大域的乱流輸送解析コード GT5D の実行環境を整備し、磁場閉じ込めプラズマ乱流シミュレーションの実行性能評価と検証を行う。

(2-B) プラズマ自発回転の予備数値実験<協力機関：大学共同利用機関法人自然科学研究機構核融合科学研究所>

小型トカマクプラズマを対象に、プラズマ自発回転解析に向けた実験データおよび計算条件の検討ならびに予備数値実験を行う。

(3) サブテーマ[3] 核燃焼生成高エネルギー粒子の閉じ込め解析

高エネルギー粒子閉じ込め解析の実証研究と核燃焼プラズマ解析に向けた性能検証

<協力機関：大学共同利用機関法人自然科学研究機構核融合科学研究所>

「富岳」において高エネルギー粒子閉じ込め解析コード MEGA の実行環境を整備し、高エネルギー粒子シミュレーションの実行性能評価と検証を行う。トカマクおよびヘリカル型プラズマを対象とした高エネルギー粒子閉じ込め解析の予備数値実験を行う。

(4) サブテーマ[4] 核融合大規模シミュレーションへの AI/データ科学の融合的アプローチ

大規模データの可視化による乱流輸送解析手法の開発<協力機関：国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構>

「富岳」における大規模データ取得に備えた環境整備、ならびに機械学習プログラムの開発と整備を行う。

(5) プロジェクトの全体推進

本事業を効率的かつ効果的に推進するため、プロジェクト推進会議を適宜開催し、参加各機関の連携・調整を実施する。具体的にはプロジェクト全体の管理・調整業務（会計・総務・連絡・調整等）、全サブテーマに共通的な課題の推進支援業務を行う。

2-2. 実施内容（成果）

2-2-1. サブテーマ[1]の成果概要

本サブテーマでは、将来の核融合実験研究に向けた理論的指針の確立を目指し、「富岳」を活用した 5 次元位相空間シミュレーションにより、核燃焼を想定した多種粒子からなるプラズマ中における異なる時空間スケールをもった乱流、すなわち、マルチスケール乱流輸送の機構解明とその検証に挑戦する。これは、プラズマ中の微視的乱流輸送研究の最先端課題である。これとともに、「富岳」に向けて最適化した GKV コードを用い、ITER や先進超伝導トカマク装置(JT-60SA)実験の重要課題であるタングステンなどの不純物輸送解析に取り組む計画である。令和 2 年度には、以下の成果を達成した。

- (1) 「富岳」における GKV の実行性能評価を行い、 10^{12} 格子点規模の問題に対する良好なスケーリングを達成した。
- (2) 核燃焼プラズマを想定した多粒子種高解像度乱流シミュレーションにより、マルチスケール相互作用を介した総電子熱輸送束の低減を明らかにし、その重要性を明示した。
- (3) タングステン（重イオン）不純物の乱流輸送解析を行い、不純物混入比率に対するトレーサー近似の妥当性、および不純物密度勾配に対する不純物粒子輸送束の依存性を同定した。

2-2-1-1. 「富岳」における GKV の性能評価

これまでに局所乱流輸送解析コード GKV は、「京」における Tofu ネットワークでの区分化プロセス配置最適化と通信と演算のオーバーラップを実施することで 100 万コア級の強スケーリングを達成してきた。これに加え、インターコネクトバンド幅対 CPU 演算性能比がさらに低下する「富岳」に向け、並列スペクトル法計算の通信最適化と MPI 通信フリー反復法による衝突項陰解法実装をポスト「京」重点課題の枠組みで進めてきた。この GKV コードを「富岳」に実装し、弱スケーリング性能測定を行った結果

を Fig. 2.2.1-1 に示す。目標としていた最大問題規模 1.24×10^{12} 格子点までの良好なスケーリングが得られ、富岳 12,288 ノード、589,824 コアの利用、49,152MPI \times 12OpenMP 並列で、演算性能 3.1PFLOPS、理論ピーク演算性能比 7.5%、並列効率 83.7%を達成した。「京」での理論ピーク演算性能比が 8.29%であったことと比較しても、「富岳」においても高い演算性能を確認できた。

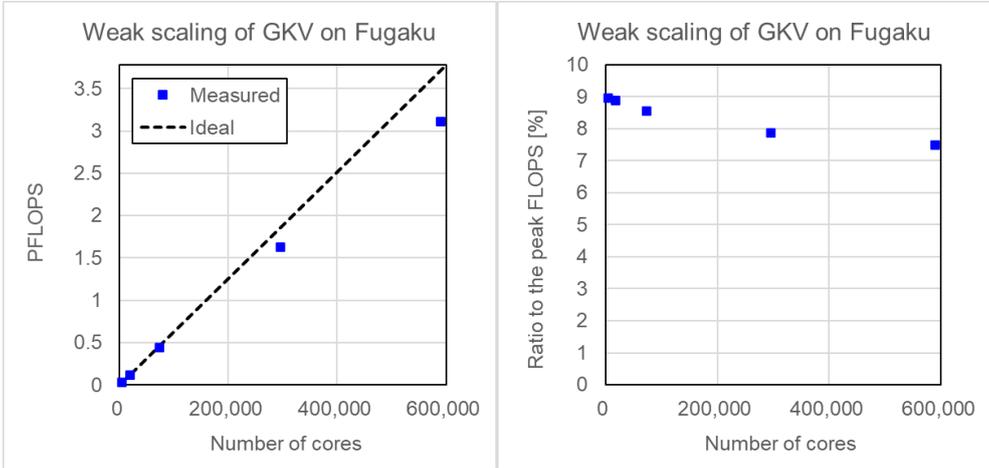


Fig 2.2.1-1: Weak scaling of GKV on the supercomputer Fugaku. Computational performance in PFLOPS (left) and its ratio to the theoretical peak performance (right) are plotted against the number of cores.

このとき、全体の処理時間に対する MPI 通信や演算のコストの内訳を調査した結果を Fig. 2.2.1-2 に示す。まず、12,288 ノードにおけるランクマップの有無の違いを比較すると、衝突項に関わる転置通信のコストは変わらないのに対し、ランクマップ有りでは非線形項に関わる転置通信や線形項に関わる 1 対 1 通信のコストが削減されており、「富岳」でも「京」同様の 3 次元トラスネットワークにおける 5 次元位相空間の区分化プロセス配置[Maeyama, Parallel Comput. (2015)]が有効であることが確認できた。弱スケーリング計測におけるノード数の増大とともに、MPI 通信の時間が伸びていくが、GKV コードでは通信コストの隠蔽を目的とした通信と演算のオーバーラップが実装されている。しかし、線形項および非線形項部分は MPI 通信時間の増大分だけ総処理時間が伸びることが確認でき、通信を隠蔽できるほどの演算が割り当てられていないことが原因と考えられる。これは、「京」に比べてインターコネクトバンド幅/CPU 演算 FLOPS が小さくなる「富岳」では予測されていた問題点である。これに対し、求解時間の短縮と演算密度の向上の両立を目指して開発された衝突項陰解法[Maeyama, Comput. Phys. Commun. (2018)]部分はコスト全体の 6 割強を占めており、ポスト「京」性能予測ツールによる事前予測とおおよそ一致している。衝突項陰解法については密度向上した演算とのオーバーラップにより MPI 通信は隠蔽できおり、GKV のスケーラビリティの維持に有効であることが確認された。

さらに、GKV コードを用いたプラズマ乱流シミュレーションで得られたデータから、乱流輸送の物理過程についての理解を深めるため、3 波結合伝達関数解析や射影演算子法を用い、多次元位相空間上のマルチスケール相互作用を解析する手法を新たに開発した[1-5]。

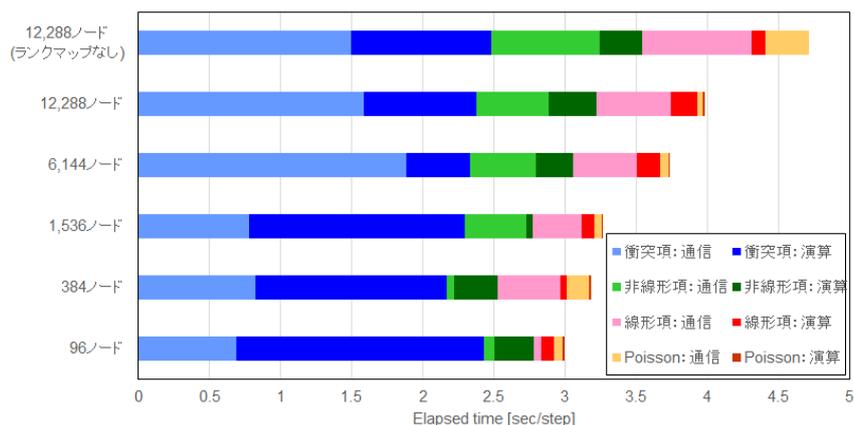


Fig. 2.2.1-2: Cost analysis of GKV. Note that the measured computational cost is partially masked by computation-communication overlap, because the computation cost is evaluated by subtracting MPI communication cost from the elapsed time of whole calculation.

2-2-1-2. 核燃焼プラズママルチスケール乱流シミュレーション

核燃焼プラズマ実験では、高電子温度状態や重水素・三重水素の混合状態など、これまでの核融合プラズマ実験を超えたパラメータ領域やプラズマ状態を扱う。これまで「京」を用いたマルチスケール乱流シミュレーションにより、乱流のスケール間相互作用の重要性を指摘してきたが、その核燃焼プラズマへの外挿性は自明ではない。核燃焼を想定したプラズマでのマルチスケール乱流シミュレーションは、多粒子種・高解像度を要する計算のため、「京」での実施は困難であったが、上述のように「富岳」における高い演算性能を実現した GKV コードにより解析が可能となる。「富岳」に最適化された GKV コードの検証を兼ね、核燃焼プラズマのマルチスケール乱流シミュレーションを先行実施した。

高い電子温度と急峻な温度勾配を持つ核融合プラズマでは、捕捉電子モード (TEM) と呼ばれる比較的大きな (イオンスケールの) 揺らぎとともに、電子温度勾配モード (ETG) と呼ばれるさらに細かな (電子スケールの) 揺らぎが自発的に発達する。Fig. 2.2.1-3 は、本シミュレーションにより得られた電子圧力揺動のカラーマップと、乱流揺動の流線を示したものである。Fig. 2.2.1-3 左には、TEM と呼ばれる比較的大きなスケールの揺らぎが発生し、流線が半径方向に長く伸び、それと重なるように高温部分が外側へ、低温部分が内側へ輸送されていることが分かる。一方、Fig. 2.2.1-3 右の拡大図を見ると、さらに微細な揺らぎ (ETG) が共存していることが確認できる。このことは、TEM が作る半径方向への流れに乗って移送される電子圧力揺らぎが、小さなスケールの ETG 乱流によって乱されることで、TEM 乱流の発達が阻害されるという物理過程を示唆する。

こうした電子スケール乱流揺動は正味の熱輸送束にも影響を与える。Fig. 2.2.1-4 は乱流による電子熱輸送束のスペクトルを示したものである。マルチスケール乱流によるスペクトル (緑) は、電子スケール乱流が卓越している状態 (橙) やイオンスケール乱流のみ扱う解析 (青) と比べて、ピーク値が低下している。これはマルチスケール相互作用により総電子熱輸送束が低減しうることを初めて示した事例である。さらに、水素プラズマの場合を含めた一連の研究により、核燃焼パラメータ領域でのマルチスケール相互作用の重要性を示すと同時に、電子スケール乱流によるイオンスケール乱流発達の阻害過程を明らかにした[6-10]。

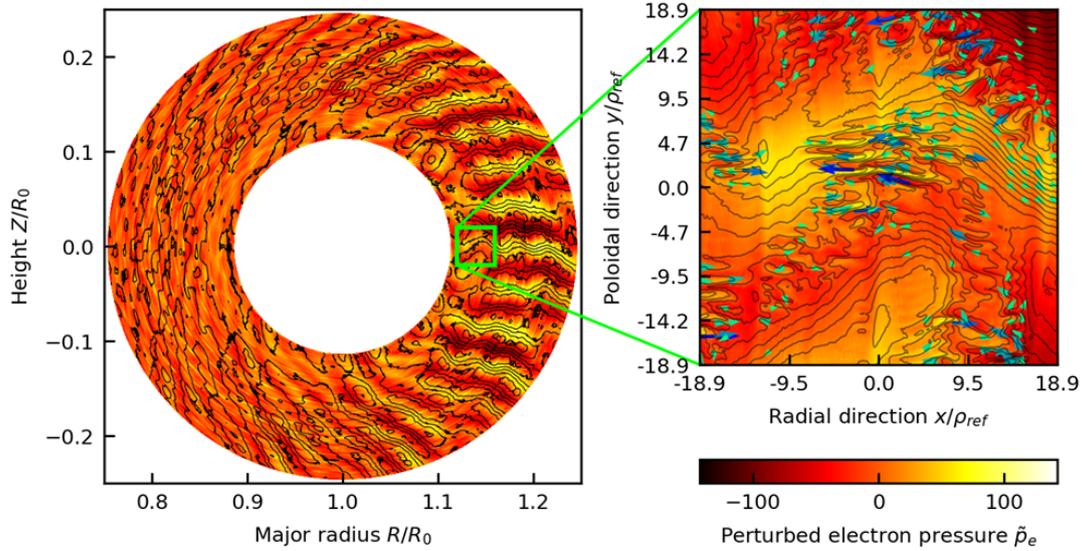


Fig. 2.2.1-3: Color map of perturbed electron pressure \tilde{p}_e and streamlines of turbulent flows (solid black lines) at the poloidal cross section. Arrows in magnified picture represent direction and amplitude of turbulent flows.

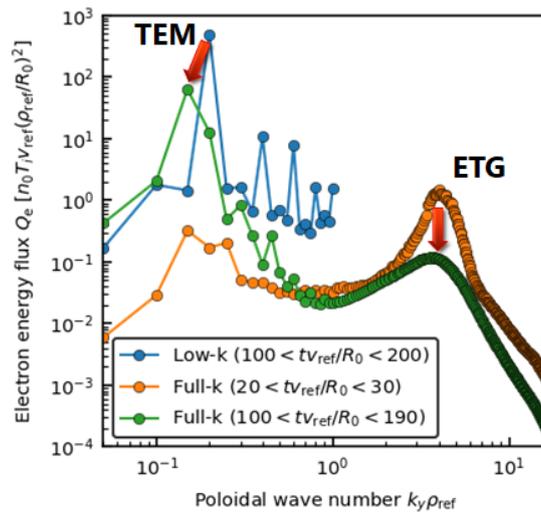


Fig. 2.2.1-4: Comparison of poloidal wavenumber spectra of electron energy flux. Green, orange, blue dots correspond to the results of saturated state of multi-scale simulation (averaged over $100 < tv_{ref}/R_0 < 190$), early electron-scale turbulence dominated state of multi-scale simulation (averaged over $20 < tv_{ref}/R_0 < 30$), and the result of ion-scale simulation (averaged over $100 < tv_{ref}/R_0 < 200$), respectively.

2-2-1-3. 重イオン不純物輸送解析

ITER ではプラズマと接する機器（ダイバータと呼ばれる）にタングステンを用いる。重イオンであるタングステン不純物が炉心に蓄積すると放射冷却によるプラズマ性能劣化が懸念されるため、重イオン不純物の輸送解析は重要な研究課題である。本研究では多種粒子衝突を導入した GKV コードを用い、タ

ングステン不純物密度割合が実験値に近い 10^{-4} 以下では、微視的不安定性の成長率変化は1%以下であり、不純物イオンの電磁場へのフィードバックを扱わないトレーサーモデルが有効な近似になるという指標を得た[図 2.2.1-5(a)参照]。さらに、不純物密度勾配に対する不純物粒子輸送束の依存性を調べ、準線形と非線形計算では粒子輸送束の向きを反転させる臨界密度勾配値（実線と波線の交点を与える密度勾配値）が変化することを新たに見出した[Fig. 2.2.1-5 (b)参照]。これは、広く用いられている準線形解析を超えた輸送特性を示唆する結果である。

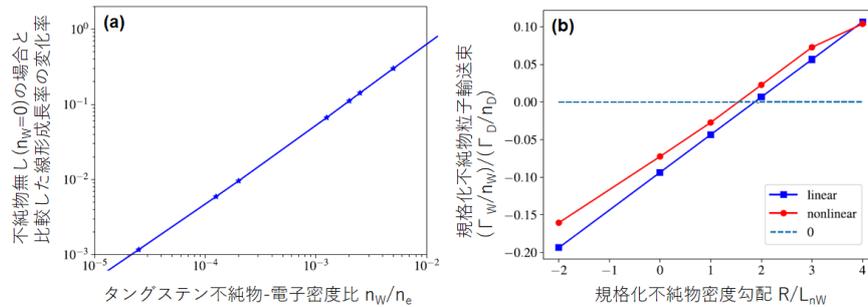


Fig. 2.2.1-5: (a) Dependence of the linear growth rate of micro-instability on the ratio of tungsten and electron density. (b) Dependence of the normalized tungsten particle flux on the impurity density gradient, where blue and red lines mean the linear and nonlinear results, respectively.

【参考文献】

- [1] 前山伸也, "射影演算子法による時系列データ統計解析とその一般化 Langevin 描像", 統計数理研究所共同研究集会「諸科学における大規模データと統計数理モデリング」(オンライン開催, 2020年8月3日).
- [2] 前山伸也, 渡邊智彦, "射影演算子法を用いた長谷川-若谷プラズマ乱流相互作用の解析", 日本物理学会2020年秋季大会(オンライン開催, 2020年9月10日).
- [3] S. Maeyama, "Toward a systematic understanding of multi-scale interactions between ion and electron-scale turbulence", 4th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics (AAPPS-DPP2020), (e-conference, October 29, 2020). (招待講演, 国際学会)
- [4] S. Maeyama, M. Sasaki, K. Fujii, T. Kobayashi, R. O. Dendy, Y. Kawachi, H. Arakawa, S. Inagaki, "On the triad transfer analysis of plasma turbulence: symmetrization, coarse graining, and directional representation", New Journal of Physics, in press (2021). <https://doi.org/10.1088/1367-2630/abeffc> (査読付き論文).
- [5] 前山伸也, 佐々木真, 藤井恵介, 小林達哉, R. O. Dendy, 河内裕一, 荒川弘之, 稲垣滋, 日本物理学会第76回年次大会(オンライン開催, 2021年3月14日).
- [6] T.-H. Watanabe, "Multi-scale gyrokinetic simulation of TEM/ETG turbulence", 24th Transport and Confinement Topical Group Meeting (Online, July 3, 2020).
- [7] 渡邊智彦, 前山伸也, 仲田資季, "電子温度勾配と捕捉電子モード不安定性の競合とマルチスケール乱流輸送", 日本物理学会2020年秋季大会(オンライン, 2020年9月10日).
- [8] T.-H. Watanabe, S. Maeyama, and M. Nakata, "Cross-scale interactions of TEM/ETG instabilities in H/D plasmas", The 29th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (Online,

October 29, 2020).

- [9] 渡邊智彦, 前山伸也, 仲田資季, “捕捉電子モードと電子温度勾配乱流の相互作用と同位体効果”, プラズマ・核融合学会第 37 回年会 (オンライン, 2020 年 12 月 3 日) .
- [10] 渡邊智彦, 前山伸也, 仲田資季, “電子温度勾配乱流中の捕捉電子モードの安定化”, 日本物理学会第 76 回年次大会 (オンライン, 2021 年 3 月 14 日).

2-2-2. サブテーマ[2]の成果概要

本サブテーマでは、磁場閉じ込めプラズマの自発回転と過渡応答の解明に挑戦する。磁場閉じ込めプラズマではプラズマ回転による炉心プラズマの安定性向上が閉じ込め性能の向上に大きく影響するため、ITER や将来の原型炉の炉心性能を決定する重要な因子となっている。本研究では既存装置の実験で得られているプラズマ境界からの運動量輸送によって形成される自発プラズマ回転の定常分布、および外部加熱に対するプラズマ回転の過渡応答に関する実験データを第一原理乱流計算によって解析し、省エネルギーのプラズマ回転の維持・制御手法の構築に必要な、プラズマ乱流による運動量輸送機構を解明する。本課題では、大域的プラズマ分布の効果や粒子輸送、運動量輸送、および、イオンと電子の熱輸送を含む複数輸送チャンネルの相互作用を解析するために、複数輸送チャンネルの乱流輸送と大域的プラズマ分布を第一原理モデルで無撞着に発展させる full-f ジャイロ運動論モデルの大域的乱流輸送解析コード GT5D を用いる。本サブテーマに関して、令和 2 年度は以下の成果を達成した。

- (1) 「富岳」向けの省通信型行列解法を新たに開発し、GT5D の差分陰解法ソルバを従来手法の約 3.5 倍高速化するとともに、1,440-5,760 ノードを用いた ITER 規模 (約 1,000 億格子) のテスト計算において良好な強スケーリングを達成した。
- (2) 自発プラズマ回転の形成・維持機構の解析に向け、フランス原子力・代替エネルギー庁(CEA)が管轄する ToreSupra 装置におけるジュール加熱実験を対象とした計算条件検討を行い、予備的数値実験を実施した。

2-2-2-1. 「富岳」での大域的乱流輸送解析コードの性能評価および検証の実施

GT5D にはプラズマ分布、磁場配位等の実験データに対するインターフェースおよび不純物イオンを含む多種イオン系プラズマモデルが実装されており、これまでに多種イオン系プラズマにおける衝突性輸送等の基礎的なモデル検証を実施してきた。今年度は ToreSupra 装置のジュール加熱実験の解析に向けた予備的な物理モデルの検証として、不純物を含む多種イオン系プラズマにおけるイオン温度勾配駆動 (ITG) 乱流の数値実験を実施し、多種イオン系プラズマにおける衝突性輸送と乱流輸送の相互作用に関する新たな物理機構を発見した[1-3]。これ以外にも GT5D を活用した応用研究の成果として電子系乱流の自己組織化[4]や ITG 乱流の水素同位体効果[5]に関する成果を発表した。

計算技術に関しても「富岳」ではじめて利用可能となった可変精度演算を活用して新たな省通信型行列解法を構築し、「富岳」数千ノードを用いて ITER 規模の数値実験を現実的な計算時間で実行できることを実証した。この成果を SC20 国際会議のテクニカルペーパー (採択率~25%) をはじめとする計算機科学分野の成果[6-9]として発表した。また、GT5D の膨大な計算データを解析する新しい機械学習技術としてテラバイト級の大規模データに対する主成分分析手法を開発し、成果を[10-13]に発表した。以上の成果により「富岳」における GT5D の整備を完了した。以下に「富岳」向け省通信型行列解法の開発に

関する成果を示す。

「富岳」に代表されるメニーコア型スーパーコンピュータでは多数の演算器を集積したメニーコアプロセッサによって計算ノードあたりの演算性能を従来の数 10 倍に向上しているが、計算ノード間の通信性能は従来の数倍程度に留まっており、通信処理がエクサスケール計算のボトルネックとなっている。このような背景から省通信アルゴリズムを開発し、それをメニーコアプロセッサ向けに最適化することが必須となっている。本研究では GT5D で最も計算コストが大きい電子の 4 次元線形移流項に対する差分陰解法ソルバを対象として、「富岳」向けの省通信型行列解法を開発した。

従来の差分陰解法ソルバで用いられてきた前処理無し一般化共役残差 (GCR) 法は袖通信を伴う疎行列ベクトル積 (SpMV)、基底ベクトルの直交化に必要な縮約通信を伴う 3 つの内積処理、および 4 つのベクトル計算 (AXPY) により構成される (Fig.2.2.2-1)。GCR 法は演算性能と通信性能がバランスした従来の CPU 環境では、メモリ使用量と計算速度の観点から最適な行列解法の一つであったが、メニーコアプロセッサや GPU に基づく近年の演算加速環境では、縮約通信がボトルネックとなってきた。この問題を解決するために、本研究では省通信一般化最小残差 (CA-GMRES) 法[Hoemmen,PhD2010]を導入し、縮約通信のボトルネックを解決することに成功した[Idomura,ScalA17]。CA-GMRES 法では s 本の基底ベクトルを一度に生成、直交化し、縮約通信の回数を $1/s$ に削減する。ここで s は省通信ステップ数を示す。このような通信削減に加えて、CA-GMRES 法では複数ベクトルをまとめて処理する計算カーネルが密行列演算となるため、AXPY が主要な計算カーネルとなる GCR 法に比べて演算密度が高く処理効率も向上する。CA-GMRES 法は縮約通信の回数を大幅に削減するが、袖通信が残された課題となる。この課題に対して、本研究では通信隠蔽手法[Idomura,IJHPCA2014]を適用してきた。この手法は差分計算を計算領域の中心部分と袖通信データを参照する表面部分に分割し、OpenMP のマスタースレッドに実装した袖通信とスレーブスレッドに割り当てた中心部分の差分計算を同時処理し、その後、表面部分の差分計算を処理することによって通信コストを隠蔽する。この手法は従来の CPU 環境では有効に機能したが、最先端演算加速環境では演算加速のために通信コストを完全に隠蔽することが難しくなっており、袖通信が「富岳」における新たな課題となってきた。この課題を解決するために、新たに FP16 (半精度) 省通信型前処理を開発し、収束特性を改善することで反復回数および袖通信回数を削減した。

前処理手法として不完全 LU 分解、マルチグリッド法等、複数の手法をテストした結果、対称逐次加速緩和 (SSOR) 法により反復回数の大幅な削減が確認できた。しかしながら、FP64 (倍精度) 処理による実装では SSOR 前処理付き CA-GMRES (CA-PGMRES) 法は前処理無し CA-GMRES 法よりも計算コストが増大した。この計算コストを削減するために、A64FX で新たにサポートされた FP16 処理を活用して FP16SSOR 前処理を開発した (Fig.2.2.2-1)。並列処理設計にあたっては、ブロックヤコビ法を用いてノード間通信を回避する省通信型前処理を実現するとともに、各ブロック内で細粒度の赤黒オーダリングを適用し、多スレッドの並列処理を可能とした。また、FP16SSOR の設計にあたっては、4 次元線形移流項の演算子が位相空間内で磁場の非一様性に依存して緩やかに変化すること、CFL 条件を律速する速い移流は実空間における磁力線方向の熱運動に由来し、速度空間の移流速度が小さいことを用いた。前者の性質により行列係数の変化が緩やかであることから、前処理の前後で連立一次方程式 $Ax=b$ を適切に規格化し、桁落ちを回避することで FP16 処理でも FP64 処理と同程度の収束特性を維持できることがわかった。また、後者の性質により SSOR 前処理を全 4 次元方向ではなく、移流速度が小さい速度空間を外した 3 次元実空間に近似することでスレッド並列処理効率を向上した。GT5D では 4 次元間

題の連立一次方程式 $Ax=b$ におけるベクトルを配列 $x(l,k,j,i)$ として保持する。ここで、 (i,j,k) は実空間、 l は速度空間のインデックスであり、 l 方向が連続メモリアクセスとなる。A64FX における SIMD 幅 512bit (FP16×32 変数) の FP16SIMD 演算では、 l 方向のステンシル計算を含む 4 次元 SSOR では L1 キャッシュの競合による性能劣化がプロファイラによって示されたが、 l 方向を無視する 3 次元 SSOR ではこの問題が回避される。また、GPU では 3 次元 SSOR にすることで l 方向もスレッド並列処理が可能となり、SSOR 前処理の並列度が約 100 倍向上する。

開発した各ソルバを実装した GT5D の性能評価を Fig.2.2.2-2 に示す。性能評価は ITER の炉心プラズマ規模を想定した、実質量比の電子と重水素からなる約 1,000 億格子の 2 成分プラズマに対して行い、コスト分布としては衝突項 (Collision)、ポアソン方程式 (Field)、4 次元非線形移流項 (Nonlinear)、4 次元線形移流項 (Krylov)、およびその他の処理 (Other) について 1 ステップあたりの経過時間を計測した。このうち、「Summit」における GPU 環境では高コストの Krylov と Collision のみを OpenACC を用いて GPU に移植した。Fig.2.2.2-2(a) では「Oakforest-PACS」(KNL、Intel Omni Path インターコネクト)、「富岳」(A64FX、TofuD インターコネクト)、および「Summit」(V100、dual-rail EDR InfiniBand)、それぞれ 1,440CPU を用いた処理性能を比較した。ここで、KNL(3.05TFLOPS、480GB/s) と比べて、A64FX (3.0TFLOPS、1,024GB/s) および V100 (7.8TFLOPS、900GB/s) の演算性能/メモリバンド幅の性能比はそれぞれ 0.98 倍/2.13 倍および 2.62 倍/1.99 倍となる。各環境で比較している GCR 法、CA-GMRES 法、CA-PGMRES 法の反復回数はそれぞれ約 1,500 回、約 1,800 回、約 200 回となり、FP16SSOR 前処理によって反復回数が一桁削減された。Oakforest-PACS において GCR 法の処理性能は 60.8 秒/ステップとなった。これを基準として各ソルバの性能を議論する。「富岳」ではメモリバンド幅の向上により GCR 法で 1.56 倍の性能向上が得られたが、CA-GMRES 法では演算密度の向上により 1.6 倍に性能向上が拡大した。さらに CA-PGMRES 法では収束特性の向上により 5.53 倍という飛躍的な性能向上が得られた。「Summit」でも同様の性能向上が確認され、GCR 法、CA-GMRES 法、CA-PGMRES 法でそれぞれ 1.38 倍、1.89 倍、3.53 倍の性能向上が得られた。このように、CA-PGMRES 法は従来の GCR 法や CA-GMRES 法に比べてハードウェアの性能比を上回る大幅な性能向上を示しており、メモリアクセス CPU および GPU に基づく最先端演算加速環境である「富岳」と「Summit」で共通に適用できる省通信アルゴリズムとしての有効性が示された。

Fig.2.2.2-2(b) は「富岳」1,440、2,880、5,760CPU における GCR 法と CA-PGMRES 法を用いた GT5D の強スケーリングを示す。CA-PGMRES 法は GCR 法の 3.54 倍の性能となり、この性能比を維持したまま良好な強スケーリングが得られた。ここで、CPU 数 4 倍に対する加速率は GCR 法、CA-PGMRES 法でそれぞれ 3.13 倍、2.95 倍となり、ITER 規模問題を約 4.7 秒/ステップという処理速度まで加速することに成功した。これにより、ITER 規模の数値実験を現実的な処理時間で実行する見通しが得られた。実行性能に関しては、富岳 1,440、2,880、5,760CPU における GCR 法は FP64 ピーク演算性能の 3.2%、3.0%、2.5% となったが、CA-PGMRES 法ではそれぞれ 18.9%、17.0%、14.5% へと大幅な改善が見られた。このように、CA-PGMRES 法は処理速度の向上だけでなく処理効率の向上にも有効であることがわかった。

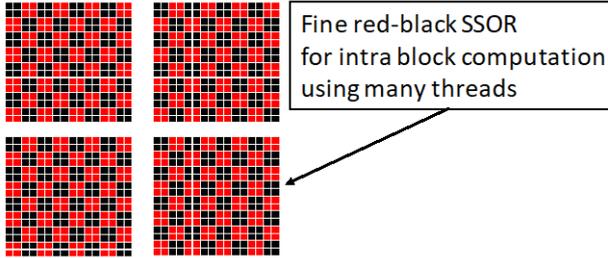
Algorithm Generalized Conjugate Residual method

Require: $Ax = b$, Initial guess x_0

- 1: $r_0 := b - Ax_0, p_0 := r_0$
- 2: for $j = 0, 1, 2, \dots$ until convergence do
- 3: $\alpha_j := \langle Ap_j, r_j \rangle / \langle Ap_j, Ap_j \rangle$
- 4: $x_{j+1} := x_j + \alpha_j p_j$
- 5: $r_{j+1} := r_j - \alpha_j Ap_j$
- 6: $\beta_j := \langle Ap_j, Ar_{j+1} \rangle / \langle Ap_j, Ap_j \rangle$
- 7: $p_{j+1} := r_{j+1} + \beta_j p_j$
- 8: $Ap_{j+1} := Ar_{j+1} + \beta_j Ap_j$
- 9: end for

SpMV
4-DAXPY

A: nonsymmetric block diagonal matrix for stiff linear 4D convection operator in structured grids



Block Jacobi preconditioner M_{FP16} w/o halo data communication

Algorithm Mixed precision CA-PGMRES method

Require: $Ax = b$, Initial guess x_1

- 1: $\hat{A} = D^{-1}A$ ($D_{ii} = \max(|A_{i1}|, |A_{i2}|, \dots, |A_{in}|)$)
- 2: $d = D^{-1}b / |D^{-1}b|$
- 3: $z = x / |D^{-1}b|$
- 4: $B = [e_2, e_3, \dots, e_{s+1}]$
- 5: for $i = 1, 2, \dots$ until convergence do
- 6: $r := d - Az_i$
- 7: $r' := M_{FP16}^{-1}r, \beta := \|r'\|, q := r' / \beta, \zeta := \beta e_1$
- 8: Compute SpMVs $\hat{V} := [M_{FP16}^{-1}\hat{A}q, \dots, M_{FP16}^{-1}\hat{A}^s q]$
- 9: $V := [q, \hat{V}]$
- 10: Compute QR factorization via ($W := V^T V$;
- 11: Cholesky decomposition $W = R^T R$; $Q := VR^{-1}$)
- 12: $H := RBR^{-1}$
- 13: $\bar{H} := \text{Givens rotation}(H) = G_1 G_2 \dots G_s H$
- 14: $\bar{\zeta} := G_1 G_2 \dots G_s \zeta$
- 15: $y := \bar{H}^{-1} \bar{\zeta}$
- 16: $z_{i+1} = z_i + Qy = z_i + VR^{-1}y$
- 17: end for
- 18: $x := |D^{-1}b|z$

Normalize
Precon+SpMV
DSYRK
DGEMV

Two types of SSOR preconditioners

SSOR1: SSOR in all 4D-FD operator in $(N_{R1}, N_{R2}, N_\varphi, N_{v//})$
 SSOR2: SSOR only in 3D-FD operator in $(N_{R1}, N_{R2}, N_\varphi)$
 → avoid L1\$ thrashing in the inner most $v_{//}$ direction

Fig.2.2.2-1: The Generalized Conjugate Residual method (GCR) and the Communication-Avoiding Generalized Minimum RESidual method with FP16 Symmetric Successive Over Relaxation (SSOR) preconditioner (CA-PGMRES). The Block-Jacobi method with fine red-black SSOR is designed for CA preconditioner with many thread parallelization. In SSOR, SSOR1 computes stencils in all 4D directions, while SSOR2 uses a 3D approximation, which avoids L1 cache thrashing in the inner most velocity direction.

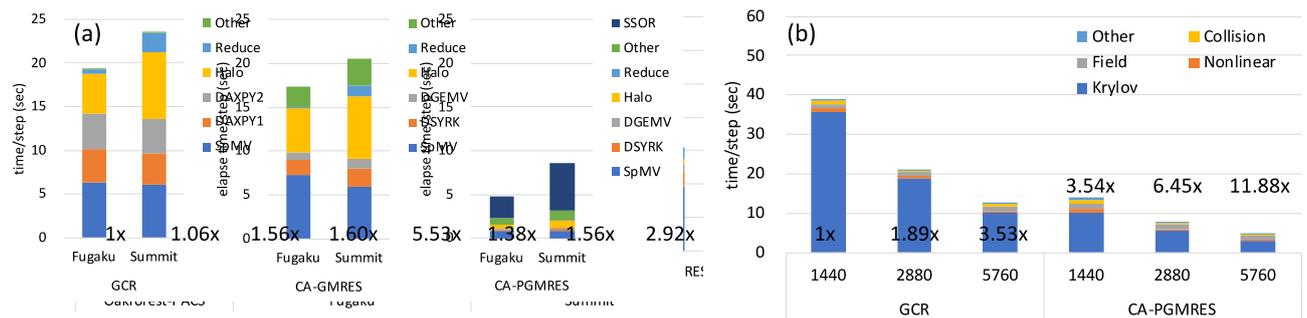


Fig.2.2.2-2: Performance tests of GT5D with GCR, CA-GMRES, and CA-PGMRES. Cost distributions for a single time step are plotted for the ITER size case with $\sim 10^{11}$ grids. (a) shows cross-platform comparisons using 1,440 processors on Oakforest-PACS (KNL, Omni Path interconnect), Fugaku (A64FX, TofuD interconnect), and Summit (V100, dual-rail EDR Infiniband). (b) shows strong scaling tests using 1,440, 2,880, and 5,760 processors on Fugaku.

2-2-2-2. プラズマ自発回転の予備数値実験

定期的なプラズマ自発回転を形成・維持する運動量輸送機構を理解するために、自発プラズマ回転の遷移現象が観測されている ToreSupra 装置 (CEA) のジュール加熱実験[Bernardo,PPCF2015] (Fig.2.2.2-3) を対象として、CEA と共同で計算条件の検討を進めた。この実験は最も基礎的な誘導電場によるジュール加熱でプラズマを立ち上げる運転方式の放電であるが、放電の初期にプラズマ密度の増大に伴って、低密度の LOC (Liner Ohmic Confinement) フェーズと高密度の SOC (Saturated Ohmic Confinement) フェーズで乱流輸送特性の遷移が観測されている。まず、自発プラズマ回転分布に関しては離散的なトロイダルコイルに起因するリップル摂動磁場によるトロイダル粘性効果によって決まる周辺領域 ($r/a=0.8-0.9$) のプラズマ回転速度を基準として LOC フェーズでは負方向の自発プラズマ回転が形成されるのに対し、SOC フェーズでは正方向の自発プラズマ回転に遷移する。ここで、プラズマ回転の符号はプラズマ電流の方向を基準に定義される。これ以外にも、蓄積エネルギー W の時間発展を見ると、LOC フェーズでは密度の増大に伴い蓄積エネルギーも単調に増加するが、SOC フェーズでは蓄積エネルギーが飽和する。また、不純物輸送に関しては、LOC フェーズと SOC フェーズの間で炭素不純物が吐き出されて燃料純度が向上し、炭素と重水素の比率で決まる実効電荷数が $Z_{\text{eff}}\sim 3.1$ から $Z_{\text{eff}}\sim 1.3$ に低下する。このように、この実験では運動量輸送のみならず不純物輸送やエネルギー輸送の観点からも ITER の輸送特性に関係する重要な現象が観測されている。

この実験データの解析に向けて計算条件の検討を実施した。まず、このデータは放電初期の比較的低温なプラズマを対象とするため、乱流のスケール長を決めるイオンジャイロ半径 ρ で規格化したプラズマサイズが $a/\rho\sim 500$ となり、ITER 規模 $a/\rho\sim 800$ の $2/3$ 程度というかなり計算コストの大きいデータとなる。このため、 a/ρ を半分程度に縮小した数値実験用パラメータを作成し、計算コストを約 80 万ノード時間/ケースまで削減した。これにより、実験データに対応する複数の解析モデルを検証する、あるいは、プラズマパラメータの系統的なスキャンによって乱流遷移現象のパラメータ依存性を評価できるようになった。次に、ソース/シンクおよび境界条件の検討を行った。プラズマ回転の境界条件としては境界付近の回転を模擬するために、実験的に観測される周辺領域の回転速度で剛体回転する平衡分布関数を実装した。ソース/シンクモデルとしては実験解析から得られたジュール加熱分布に従う電子加熱モデルおよび電磁波による放射損失分布に従うシンクモデルを新たに実装した。

上記の計算条件の整備を完了後、LOC フェーズの $t_1\sim 3.1\text{s}$ および SOC フェーズの $t_2\sim 6.1\text{s}$ を対象とする予備的解析を実施した。最初に大域的線形解析を実施し、先行研究[Citrin,PPCF2017]で示された局所的線形解析と同様に、LOC フェーズと SOC フェーズの間で支配的な乱流が捕捉電子モード (TEM) からイオン温度勾配駆動 (ITG) モードに遷移することを確認した。これは、LOC フェーズでは炭素不純物による重水素イオンの希釈効果が大きく ITG モードが安定化され、さらに低密度では電子衝突周波数 ν_{e^*} が小さく TEM が不安定化するのに対し、SOC フェーズでは逆の傾向によって ITG モードが不安定化、TEM が安定化するためである。ただし、上記先行研究ではプラズマ半径 $r/a\sim 0.37$ の炉心領域を対象とする局所的線形解析が行われていたが、今回の大域的線形解析では密度勾配や温度勾配が大きいプラズマ周辺領域で TEM と ITG モードの固有関数がピークすることがわかった。次に、LOC フェーズと SOC フェーズの数値実験を開始した。令和 2 年度は約 4msec までの数値実験が完了し、各時刻のプラズマ乱流の特徴がわかってきた。LOC フェーズでは TEM 乱流が強く励起され、電子熱流束 Q_e が卓越する。一方、SOC フェーズでは ITG 乱流が励起され、イオン熱流束 Q_i が卓越する。Fig. 2.2.2-4 に示す乱

流場の振幅は LOC フェーズの TEM 乱流が SOC フェーズの ITG 乱流の 2 倍程度となり、閉じ込め時間 $\tau=W/(Q_e+Q_i)$ の比率は実験と同様に約 1.3 倍程度となることが確認できた。

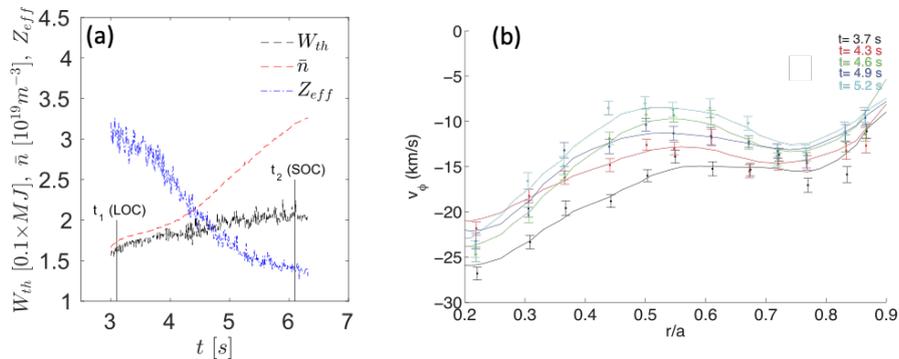


Fig.2.2.2-3: LOC-SOC (Linear and Saturated Ohmic Confinement) transition in the ohmic heating experiment on ToreSupra tokamak. (a) shows the saturation of stored energy W and the exhaust of carbon impurities shown by the effective charge number Z_{eff} along with the increase of electron density n [Citrin,PPCF2017]. (b) shows variations of the intrinsic rotation during the LOC-SOC transition [Bernardo,PPCF2015].

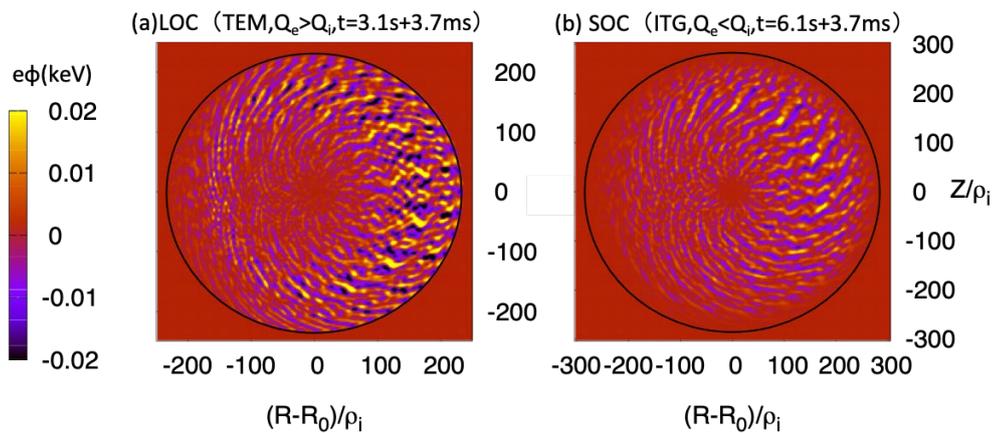


Fig.2.2.2-4: Turbulent electrostatic potentials observed in numerical experiments for (a) LOC phase and (b) SOC phase.

【参考文献】

- [1] Y. Idomura, K. Obrejan, Y. Asahi, and M. Honda, "Dynamics of enhanced neoclassical particle transport of tracer impurity ions in ion temperature gradient driven turbulence", Physics of Plasmas, Vol. 28, 012501 (2021) (査読付き論文) .
- [2] Y. Idomura, "Dynamics of enhanced neoclassical particle transport of tracer impurity ions in ion temperature gradient driven turbulence", 26th ITPA Transport and Confinement Topical Group Meeting (Online, 32.2.25) (国際会議)
- [3] 井戸村泰宏、Kevin Obrejan、朝比祐一、本多充、"イオン温度勾配駆動乱流と新古典粒子輸送の相互

作用機構"、日本物理学会 第 76 回年次大会（オンライン、3/12-15）（国内会議）

- [4] C. Kawai, Y. Idomura, Y. Ogawa, H. Yamada, "Self-organization of zonal flows and isotropic eddies in toroidal electron temperature gradient driven turbulence", *Physics of Plasmas* (Editor's pick), Vol. 27, 082302 (2020)（査読付き論文）.
- [5] Y. Idomura, "Global Full-f Gyrokinetic Simulations of Isotope Scaling in Ion Temperature Gradient Driven Turbulence", 4th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics (Invited, Online, 10/26-31)（国際会議、招待講演）
- [6] Y. Idomura, T. Ina, Y. Ali and T. Imamura, "Acceleration of Fusion Plasma Turbulence Simulations using the Mixed-Precision Communication-Avoiding Krylov Method," in 2020 SC20: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC), Atlanta, GA, US, 2020 pp. 1318-1330（査読付き論文）.
- [7] Y. Idomura, T. Ina, Y. Ali, T. Imamura, "Communication-avoiding Krylov solvers for extreme scale nuclear CFD simulations", *Proceedings of SNA+MC2020* (Tokyo, Japan, 5/18-22), pp.225-230 (2020)（査読付き論文）.
- [8] Y. Asahi, G. Latu, V. Grandgirard, and J. Bigot, "Performance portable implementation of a kinetic plasma simulation mini- app with a higher level abstraction and directives", *Proceedings of SNA+MC2020* (Tokyo, Japan, 5/18-22), pp.218-224 (2020)（査読付き論文）.
- [9] 井戸村泰宏、伊奈拓哉、Y. Ali、今村俊幸、"富岳および Summit における核融合プラズマ流体解析の高速化"、第 34 回数値流体力学シンポジウム（オンライン、12/21-23）（国内会議）
- [10] Yuuichi Asahi, Keisuke Fujii, Dennis Manuel Heim, Shinya Maeyama, Xavier Garbet, Virginie Grandgirard, Yanick Sarazin, Guilhem Dif-Pradalier, Yasuhiro Idomura, and Masatoshi Yagi, "Compressing the time series of five dimensional distribution function data from gyrokinetic simulation using principal component analysis", *Physics of Plasmas*, Vol. 28, 012304 (2021)（査読付き論文）.
- [11] Y. Asahi, G. Latu, V. Grandgirard, and J. Bigot, "Accumulating knowledge for a performance portable kinetic plasma simulation code with Kokkos and directives", *IFERC Workshop on GPU Programming 2020* (Online, 12/16)（国際会議）
- [12] 朝比祐一、藤井恵介、D.M.Heim、前山伸也、井戸村泰宏、"主成分分析によるジャイロ運動論的シミュレーションの位相空間構造データの圧縮"、日本物理学会 2020 年秋季大会（オンライン、9/9-11）（国内会議）
- [13] 朝比祐一、"5 次元分布関数時系列データの低次元表現"、プラズマ・核融合学会第 37 回年会（オンライン、12/1-4）（国内会議）

2-2-3. サブテーマ[3]の成果概要

本サブテーマでは、高エネルギー粒子・磁気流体(MHD)ハイブリッドシミュレーションコードMEGAを用いて核燃焼プラズマにおける α 粒子に代表される高エネルギー粒子挙動解析を実施する。高エネルギー粒子は燃料プラズマを加熱して核融合反応に必要な高温状態を維持する役割を担う一方、プラズマのMHD的な振動との相互作用によってプラズマ外部へ損失する可能性がある。このため、核燃焼で発生する高エネルギー α 粒子の閉じ込め性能評価、ならびに α 粒子損失の物理機構解明は、核融合エネルギー実現を目指す上で重要な研究課題である。MEGAは高エネルギー粒子駆動MHD現象の実証研究において、独自に開発したマルチフェーズ法を用いた長時間計算により、臨界プラズマ試験装置(JT-60U)、大型ヘリカル装置(LHD)、DIII-D National Fusion Facilityを対象として世界で唯一と言える優れた実績を上げてきた。令和2年度には、事業実施計画に沿って研究を推進し、「富岳」におけるMEGAの実行環境整備・実行性能評価・検証として(1)、トカマクおよびヘリカル型プラズマを対象とした予備数値実験として(2)～(5)、MEGAと関連した「富岳」向け粒子法の開発として(6)の成果をそれぞれ達成した。

- (1) 「富岳」において高エネルギー粒子閉じ込め解析コードMEGAの実行環境を整備し、性能評価を実施した。「富岳」において実行効率6%が32,768ノード、157万コアまで保持される良好なスケールリングを確認した。
- (2) トカマク型装置JETにおける高エネルギー粒子駆動不安定性についてポルトガルISTと協力して実証研究を実施した。
- (3) トカマク型装置における高エネルギー粒子駆動不安定性のシミュレーションと分布関数解析を実施し、線形成長時と非線形飽和時における分布関数揺動を明らかにした。
- (4) ヘリカル型装置における高エネルギー粒子駆動不安定性のシミュレーション研究を実施し、高エネルギー粒子輸送過程を解明した。
- (5) 大型ヘリカル装置におけるMHD不安定性に対する熱イオンの運動論的効果をシミュレーションによって解明した。
- (6) 国際共同研究により粒子法に関する計算技術開発を進め、X-point Gyrokinetic Code (XGC)コードの主要カーネルである粒子軌道計算部分を「富岳」において最適化し良好な性能を確認した。

2-2-3-1. 「富岳」での高エネルギー粒子閉じ込め解析コードの性能評価および検証の実施

「富岳」において高エネルギー粒子閉じ込め解析コードMEGAの実行環境を整備し、性能評価を実施した[1]。「富岳」の1024ノードから32,768ノードまでの弱スケールリングの評価では、32,768ノードの計算において円柱座標系(R, ϕ, z)の格子点数を(512, 256, 512)とし、1格子1粒子種あたりの計算粒子数を1024とした。この計算では2粒子種を用いたので、全粒子数は 1.37×10^{11} 、粒子物理量はその5倍の 6.87×10^{11} であり、達成指標である 10^{12} 粒子物理量を用いた計算に対して明瞭な展望を得た。Fig. 2.2.3-1(左)は他の計算機での結果を含む性能スケールリングの測定結果を示しており、「富岳」の32,768ノード、157万コアまで良好なスケールリングが保持されていることが確認できる。実行演算性能は最高で6PFが達成されている。Fig. 2.2.3-1(右)はピーク計算性能に対する実行計算効率を示しており、「富岳」上で実行計算効率6%が達成されている。

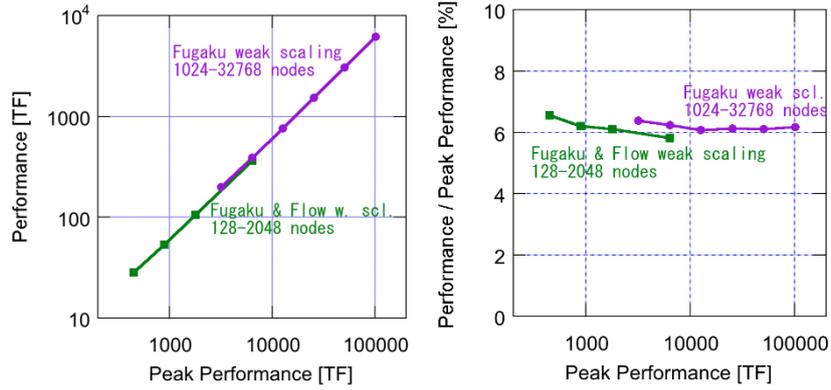


Fig. 2.2.3-1: Computational performance of MEGA (left) and effective performance ratio (right) versus the peak performance on Fugaku.

2-2-3-2. トカマク型装置 JET における高エネルギー粒子駆動不安定性に関する実証研究

欧州のトカマク型実験装置 JET での重水素-三重水素実験の解析に向けた準備として、ポルトガルの研究機関 IST と協力して、JET で実施された三重水素実験におけるアルフベン固有モードを解析した。JET での実験#43014 に基づいた実形状 MHD 平衡データ、電子密度分布、電子温度分布を使用した。アルフベン固有モードの空間分布について、IST のグループが線形安定性解析コード CASTOR-K を用いて解析した結果と MEGA の結果を Fig. 2.2.3-2 に比較する。アルフベン固有モードの空間分布について、ポロイダルモード数を含む両者の整合性が確認できた。このアルフベン固有モードの周波数はそれぞれ 43.7 kHz (CASTOR-K) と 53.2 kHz (MEGA) である。両者の違いは、CASTOR-K が非圧縮 MHD を仮定しているのに対して、MEGA が圧縮性 MHD を採用していることに起因すると解釈される。

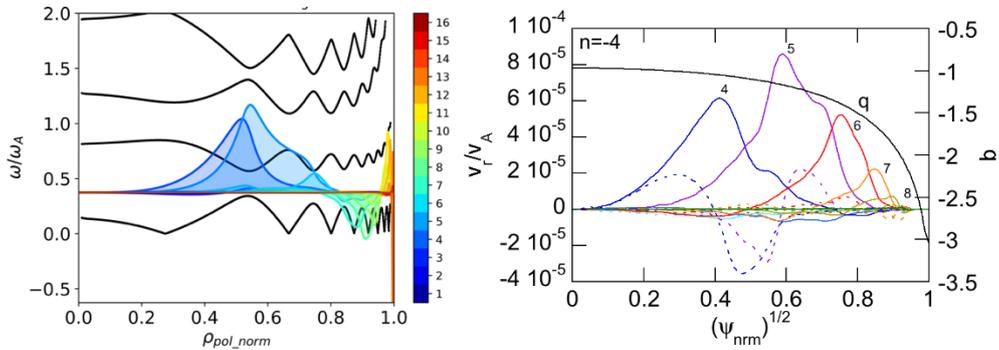


Fig. 2.2.3-2: Comparison of radial MHD velocity fluctuations of an Alfvén eigenmode between CASTOR-K (left) and MEGA (right). The toroidal mode number is $n=4$. The shear Alfvén continuous spectra and the safety factor profile are shown in left and right panels, respectively.

2-2-3-3. トカマク型装置における高エネルギー粒子駆動不安定性のシミュレーションと分布関数解析

高エネルギー粒子と熱イオンの双方を運動論的に取り扱えるように拡張した MEGA コードを用いて、トカマクプラズマにおけるアルフベン固有モードのシミュレーションを実行し、アルフベン固有モードと相互作用する高速イオンと熱イオンの分布関数を詳細に解析した[2, 3]。このシミュレーションにより、

アルフベン固有モードを介した高速イオンから熱イオンへのエネルギーチャネリングを実証した。熱イオンと高速イオンの双方について分布関数揺動と共鳴条件を解析し、アルフベン固有モードとの強い相互作用が発生する条件を見出した。Fig. 2.2.3-3はアルフベン固有モードの時間発展における高速イオンの分布関数揺動をポロイダル面(R, z)において示しており、共鳴粒子軌道と共鳴ポロイダルモード数もあわせて表示されている。Fig. 2.2.3-3の左から右に時間が発展し、(a)-(d)はプラズマ電流方向に進行する粒子、(e)-(h)は逆方向に進行する粒子の分布関数揺動である。Fig. 2.2.3-3(a),(e)に示されている線形成長局面では、分布関数揺動のポロイダルモード数は共鳴ポロイダルモード数と一致しており、高速イオンとアルフベン固有モードの共鳴が確認できる。Fig. 2.2.3-3(b),(c),(f),(g)はアルフベン固有モードによる粒子捕捉の過程を示している。Fig. 2.2.3-3(d),(h)ではトロイダルモード数/ポロイダルモード数=0/0の揺動が支配的となっており、分布関数が半径方向に平坦化して不安定性の自由エネルギー源が減少していることを示している。

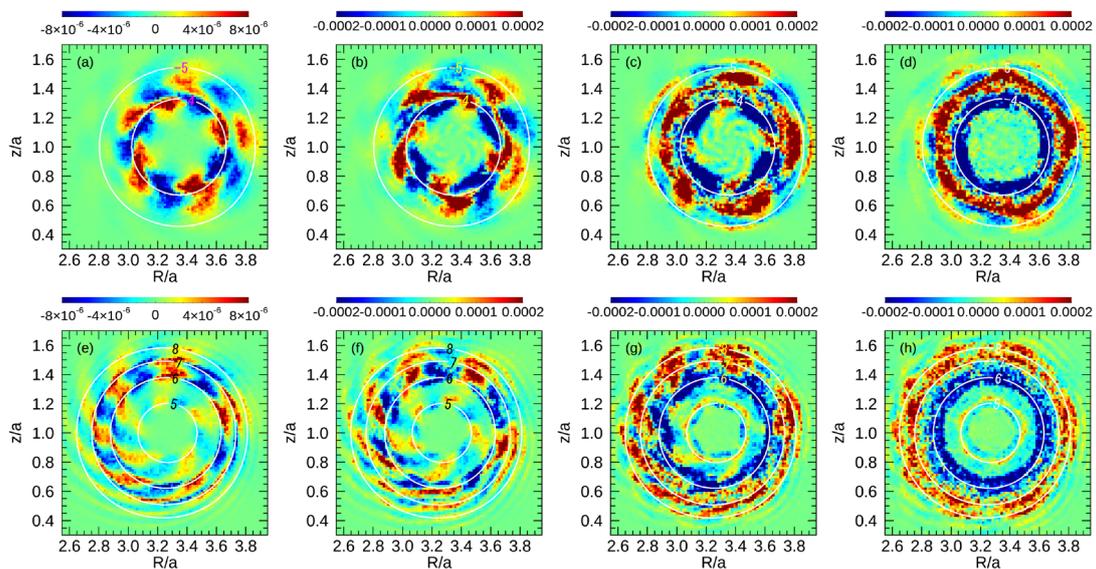


Fig. 2.2.3-3: Fluctuations of fast ion distribution function interacting with Alfvén eigenmodes plotted on the poloidal (R, z) plane. Upper and lower panels show particles drifting in the co- and counter-directions with respect to the plasma current. Time advances from the left to the right for the linear growth [(a) and (e)], nonlinear saturation [(d) and (h)] phases, respectively.

2-2-3-4. ヘリカル型装置における高エネルギー粒子駆動不安定性のシミュレーション研究

核融合科学研究所のLHDプラズマにおいて垂直中性ビーム入射(NBI)によって生成された捕捉高速イオンが励起するMHD不安定性についてMEGAコードを用いたシミュレーションを実施した[4, 5]。シミュレーションにおいて $m/n=2/1$ モードが急速に成長し、高速イオンの急激な輸送が観測された。Fig. 2.2.3-4の左図はプラズマ中心部において高速イオン垂直圧力が大幅に減少することを示している。不安定性の周波数は非線形飽和局面において急速に下方変調し、符号が反転する。Fig. 2.2.3-4の中図と右図は、ヘリカルリップルに捕捉されている高速イオンの歳差運動の方向が不安定性の電場との相互作用によって反転し、この歳差運動の反転とその後の元の方向に回復する過程において、捕捉高速イオンがプラズマ中心部から周辺部に向かって急激に輸送されることを示している。また、核融合科学研究所と西南交通大学(中国)が協力して建設中の先進ヘリカル型装置CFQSにおける高エネルギー粒子駆動不安定性

について MEGA を用いたシミュレーションを実行し、CFQS におけるアルフベン固有モードの物理特性を解明した[6-9]。

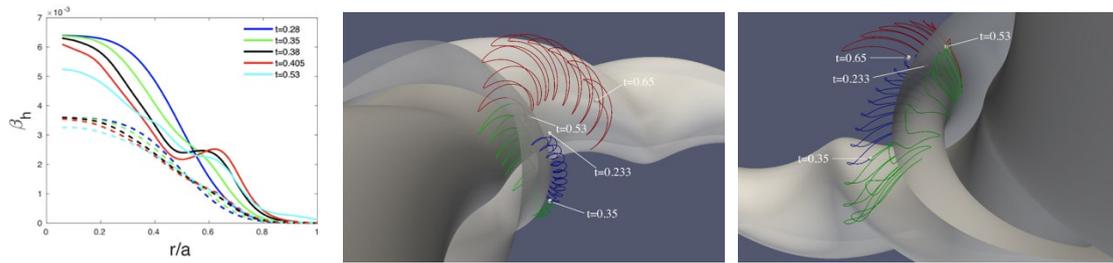


Fig. 2.2.3-4: Left panel shows fast ion pressure profiles versus normalized radius for various time. Solid (dashed) line represents perpendicular (parallel) pressure profiles to the magnetic field. The perpendicular pressure is significantly reduced at the plasma center due to the interaction with the MHD mode. Middle and right panels show a trapped fast ion orbit transported by the MHD mode from different viewpoints. The particle orbit changes the precession drift direction from the regular precession drift (blue) to the reversed precession drift (green) and moves outward to another precession drift orbit (red) located closer to the edge.

2-2-3-5. 大型ヘリカル装置における磁気流体力学不安定性に対する熱イオンの運動論的效果

LHD では、核融合炉として必要な体積平均規格化圧力 (β) 値 5% のプラズマを得ることに成功している。しかしながら、このような高 β 値 LHD プラズマに対して、MHD モデルに基づくシミュレーション解析を行うと、圧力勾配駆動型 MHD 不安定性が強く不安定化される結果が得られ、実験結果と一致しない。シミュレーションと実験結果との不一致の原因を明らかにするため、熱イオンを運動論的に取り扱えるように拡張した MEGA コードを用いてシミュレーション解析を行った[10, 11]。その結果、LHD プラズマ中の捕捉熱イオンが、不安定性を抑制する効果があることを新たに見出した。さらに、実験に対応した高磁気レイノルズ数では、不安定性の影響が著しく低下し、高 β 値を保つプラズマを維持し続けることを初めて示した (Fig. 2.2.3-5)。

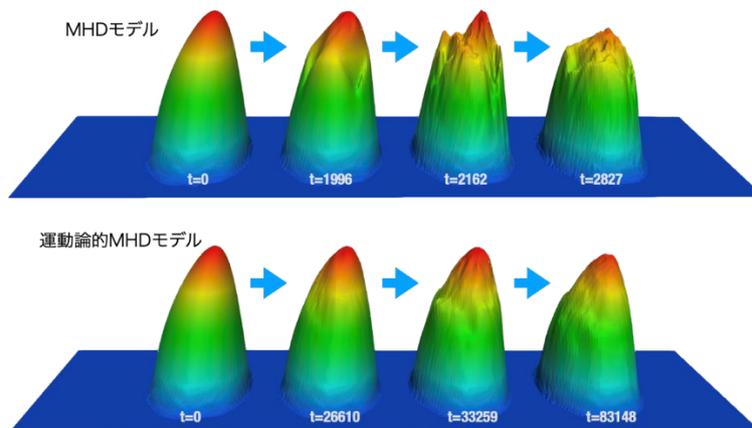


Fig. 2.2.3-5: Pressure profile evolution on a poloidal plane in MHD simulation (top) and kinetic-MHD hybrid simulation (bottom) for a high-beta LHD plasma. The central pressure decreases significantly in the MHD simulation while the high pressure is maintained in the kinetic-MHD

hybrid simulation.

2-2-3-6. 国際共同研究による粒子法の計算技術開発

プリンストンプラズマ物理研究所およびオークリッジ国立研究所との国際協力にもとづき、ジャイロ運動論粒子コード **XGC** を用いて、粒子法に関する計算技術開発を行なった[12-15]。XGC の主要カーネルである粒子軌道計算部分を最適化し、「富岳」での大規模計算実現の見通しを得た。個々の粒子計算を行うループ構造を最適化することで、単体性能では理論ピーク比 9.5%程度の実効性能が得られた。また並列化効率については、スレッド並列で 99.8% (6→12 スレッド)、プロセス並列では並列化効率 97.8% (8192→16384 プロセス) を達成した (Fig. 2.2.3-6)。

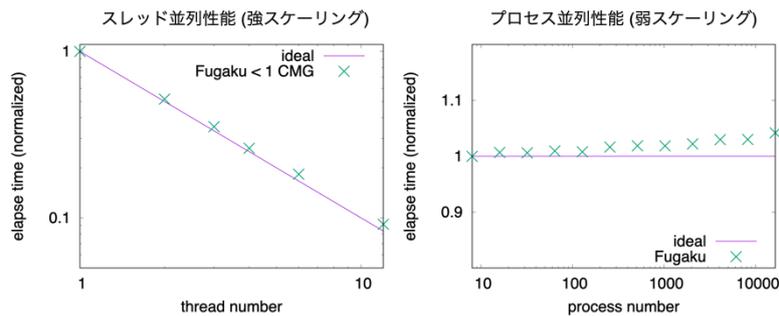


Fig. 2.2.3-6: Normalized elapsed time versus number of threads for strong scaling with thread parallelization (left) and versus number of processes for weak scaling with MPI parallelization (right) of XGC on Fugaku.

【参考文献】

- [1] Y. Todo, “Comparison among JFRS-1, Plasma Simulator, and Fugaku”, IFERC Workshop on GPUs Programming (Online, 16 Dec. 2020) (国際会議)
- [2] 藤堂泰, 佐藤雅彦, 王灝, 關良輔, 「アルフベン固有モードと相互作用する高エネルギー粒子と熱イオンの分布関数解析」, 日本物理学会 2020 年秋季大会 (オンライン開催, 2020 年 9 月 8 日) (国内会議)
- [3] Y. Todo, M. Sato, Hao Wang, M. Idouakass, and R. Seki, “Magnetohydrodynamic hybrid simulation model with kinetic thermal ions and energetic particles”, to appear in Plasma Physics and Controlled Fusion (査読付き論文)
- [4] M. Idouakass, Y. Todo, H. Wang, J. Wang, “Numerical Observation of an $m/n=2/1$ Mode with Strong Energetic Particle Redistribution in LHD”, 29th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (Online, 27-30 Oct. 2020) (国際会議)
- [5] M. Idouakass, Y. Todo, H. Wang, J. Wang, R. Seki, “Nonlinear simulations of a $m/n=2/1$ mode with strong energetic particle pressure redistribution in LHD”, 2021 Max-Planck-Princeton Center for Fusion and Astro Plasma Physics Workshop (Online, 19-26 Jan. 2021) (国際会議)

- [6] 王 灝, 藤堂 泰, HUANG Jie, 鈴木康浩, 清水昭博, WANG Xianqu, and CFQS Team, “Simulations of energetic particle driven instabilities in the quasi-axisymmetric plasmas”, 日本物理学会 2020 年秋季大会 (オンライン開催, 2020 年 9 月 8 日) (国内会議)
- [7] Hao WANG, Yasushi TODO, Jie HUANG, Yasuhiro SUZUKI, Akihiro SHIMIZU, Kunihiro OGAWA, Xianqu WANG, and CFQS Team, “Simulations of energetic particle driven instabilities in CFQS plasmas”, プラズマシミュレータシンポジウム (オンライン開催, 2020 年 9 月 17 日) (国内会議)
- [8] Hao WANG, Yasushi TODO, Jie HUANG, Yasuhiro SUZUKI, Akihiro SHIMIZU, Xianqu WANG, and CFQS Team, “Simulations of energetic particle driven instabilities in CFQS”, 29th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (Online, 27-30 Oct. 2020) (国際会議)
- [9] Hao WANG, Yasushi TODO, Jie HUANG, Yasuhiro SUZUKI, Akihiro SHIMIZU, Kunihiro OGAWA, Xianqu WANG, and CFQS Team, “Simulations of energetic particle driven instability in the quasi-axisymmetric stellarator”, 第 37 回プラズマ・核融合学会年会(オンライン開催, 2020 年 12 月 1 日~4 日) (国内会議)
- [10] 佐藤雅彦, 「高ベータ LHD プラズマにおける圧力駆動型モードの数値解析」, プラズマシミュレータシンポジウム (オンライン開催, 2020 年 9 月 17 日) (国内会議)
- [11] 佐藤雅彦, 藤堂泰, 「LHD における圧力駆動型不安定製の非線形飽和機構に対するイオンの運動論的効果」, 第 37 回プラズマ・核融合学会年会 (オンライン開催, 2020 年 12 月 1 日~4 日) (国内会議)
- [12] T. Moritaka, M. Cole, R. Hager et al, “Improving gyrokinetic field solvers toward whole-volume modeling of stellarators”, Plasma and Fusion Research, accepted (査読付き論文)
- [13] T. Moritaka, M. Cole, R. Hager et al, “Isotope effects in ion temperature gradient modes with radial electric field in Large Helical Device”, 28th IAEA Fusion Energy Conference (Online, 10-15 May 2021) (国際会議)
- [14] T. Moritaka, M. Cole, R. Hager et al, “Improved Field Solver for Gyrokinetic Simulation in Stellarator Edge Region”, The 29th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (Online, October 27-30, 2020) (国際会議)
- [15] 森高外征雄、Robert Hager、Michael Cole 他, “様々なプラズマ環境への応用に向けたジャイロ運動論 PIC 法の開発”、第 37 回プラズマ・核融合学会年会 (オンライン開催, 2020 年 12 月 1 日) (国内会議, 招待講演)

2-2-4. サブテーマ[4]の成果概要

5 次元位相空間の情報を扱う核融合プラズマの第一原理シミュレーションは、スーパーコンピュータによる長時間計算を必要とする。プラズマの初期状態に擾乱を与え、ジャイロ運動論方程式に従う時間発展をプラズマの揺動レベルが平均的に定常となる飽和状態に至るまで続ける事で、乱流が生み出す流束を算出している。スーパーコンピュータを用いても飽和に至るまでに長時間を要する上に、一般にいつ飽和

に至るかを計算前もしくは計算の最初期段階で得られる情報から推定する方法は知られていない。ジャイロ運動論シミュレーションと輸送シミュレーションを組み合わせることでプラズマの全放電時間に渡る予測を行うには非現実的な計算時間がかかる。この問題を克服する手法として、ジャイロ運動論方程式が記述する物理描像をできるだけ保ちつつ、使用する計算資源を省力化しつつも高速に予測する、縮約型乱流輸送モデルの開発が進められてきた。本手法は大きな成功を収めているが、多くの物理を包含したモデルほど計算時間を要するトレードオフの関係があるため、縮約型乱流輸送モデルですらも輸送コードに組み込んで全放電時間シミュレーションを行うには計算時間がかかる。更なる高速化を図るため、深層学習の手法であるニューラルネットワークモデルを用いた代理モデルの開発と応用を進めてきた[1-3]。一方で、これまでジャイロ運動論シミュレーションそのものの効率化・高速化に繋がる取り組みは広がっておらず、そこにデータ科学の応用の場があるのではないかと着想した。

ジャイロ運動論シミュレーションは飽和に至るまでの過程で膨大なデータを生み出す。これまでは研究者が自身の経験と直感に頼って解析対象を選定し、絞り込んだ上で、物理現象を引き出す解析を行ってきた。一方、データ科学的手法である機械学習は、人間の能力の限界から生じていた軛を脱し、解析手法の新たな地平を切り開く方法として近年広く取り組まれてきている。本サブテーマでは、「富岳」を用いた大規模計算結果の効率的な解析と計算効率の向上を目指し、核融合プラズマの大規模シミュレーションと AI/データ科学の融合的アプローチを開発する。令和 2 年度には、以下の成果を達成した。

- (1) GKV によるシミュレーション結果を画像データ化し、畳み込みニューラルネットワーク (CNN) を用いた機械学習プログラムの開発・整備を行なった。
- (2) 画像データを学習した CNN を用いて、GKV による乱流輸送シミュレーションの飽和時刻予測を試み、シミュレーション時間の効率化の可能性を示した。
- (3) 数値最適化手法を適用したフラックスマッチング法を用い、少数の GKV シミュレーション結果を介して輸送モデルを最適化する新たな輸送予測法を開発した。

2-2-4-1. 畳み込みニューラルネットワークを用いた機械学習プログラムの開発・整備

データ科学の観点から、GKV シミュレーションのデータ解析とシミュレーションの最適化を試みるべく、まずは GKV のポスト処理プログラムを改良し、HDF5 形式で大量のデータを加工しやすい形で出力するプログラムの整備を行った。得られる 5 次元空間データを任意の物理量の組み合わせの 2 次元の画像に落とし込み、任意の時間間隔で画像が出力できるようになった。以下では、複数の組み合わせの中でも、径方向とポロイダル方向の波数空間(k_x, k_y)における揺動振幅の二乗 f^2 をプロットした図に着目して研究を進めた。今回用いたケースでは、1 回の GKV シミュレーションで約 5TB の数値データが出力されるが、(k_x, k_y)画像に落とし込むことで 68MB へと縮減された。この画像には絶対値の情報は含まれていない。振幅の二乗は各スナップショット中の最大値で規格化されているため、図に含まれる情報は二乗振幅の空間パターンのみである。

画像化することで大幅なデータ量の縮約が達成され下記に詳述する深層学習モデルでの訓練・推論が現実的な時間内で実行可能となっているが、学習の基となるデータそのものは細かい時間刻み幅で多様な出力が必要である。そのようなシミュレーションの実行は「富岳」規模の大規模シミュレーションでなければ困難である。

この画像を認識し、分類・回帰を行うため、我々は深層学習モデルの一つである、畳み込みニューラ

ルネットワーク (CNN) を用いることにした。広く使われている CNN は一般的に ImageNet と呼ばれる自然界の膨大な数の画像によってあらかじめ訓練された重みの実装されているが、そのままでは GKV のシミュレーション画像を分類することはできない。そこで、転移学習という手法を用いることにした。CNN の中で ImageNet のクラス分類に用いられる出力層を取り外し、新しく GKV データの解析のための出力層を追加した上で、その間を取り持つための全結合層やバッチ正規化層を付け加えた。そして、新しく付け加えた層以外の重みは固定し、GKV データによる学習の影響は新しく追加した層のみに及ぼした。これにより、ImageNet で学習した CNN を GKV データにカスタマイズすることができる。この作業だけで転移学習は可能であるが、以前までの層と出力層をそのまま接いでしまうと木に竹を接ぐようになってしまい、性能が芳しくない場合があることが知られている。それを解消するため、Fine-tuning という技法を取り入れた。ImageNet によって訓練された CNN は、そのネットワークモデルの下流 (深いところ) で学習した画像の抽象的な要素を保持し、上流 (出力層に近いところ) で具象的な要素を保持している。そこで、CNN の下流の階層の重みを固定したうえで、比較的上流の階層の重みを新しいデータで訓練可能とし、新しく追加した全結合層や出力層と馴染ませるようにする。どの階層まで“解凍” (新しいデータによる重みの学習を許可すること) するかはモデル制作者次第であり、やり方次第で性能が左右される工夫のしどころである。この CNN に GKV の画像データを学習させることで、ImageNet で得られた画像の分類能力を活用しつつも、GKV の画像に特化した転移学習モデルを構築することが出来る。転移学習のメリットは、少ない画像枚数でも高い性能を発揮できることであり、我々のケースでは CNN を一から訓練するほどに十分な数の画像が得られるわけではないため、転移学習は適した手法であると言える。

我々は最新の CNN モデルである EfficientNet を用いることにした。従来型の CNN と比べ、少ない内部パラメータ数で高い性能を示しており、転移学習への適用も容易である。EfficientNet はモデルの規模、すなわち入力画像の解像度、により B0 から B8 まで分かれているが、ここでは従来型 CNN の代表格である Inception v3 と同程度の内部パラメータ数を持ち、現在用いている画像の解像度に適した EfficientNet-B4 を採用した。

まず始めに、GKV 非線形シミュレーションにおいて、画像を線形成長、非線形成長、飽和の 3 フェーズに分け、ある $f^2(k_x, k_y)$ の画像を与えたときにその画像がどのフェーズに属しているかを分類するための CNN を構築した。訓練、妥当性検証に用いたデータ数はそれぞれ 5,403 と 1,543 であり、テストデータ 722 に対してモデルの性能を評価した。テストデータは訓練に用いられておらず、CNN が知らない画像となる。訓練に掛かる時間は、GPGPU を活用することで高々 1 時間程度に抑えられる。訓練済みの CNN を用いた推論は、秒程度の時間で済む。その結果、分類の正答率は 99.9% でほぼ間違えず、分類に対して高い性能を示した。Fig. 2.2.4-1 はその例であり左図は時刻 1.4 の $f^2(k_x, k_y)$ 画像であるが、それは確率 1.0000 で線形成長フェーズであると判定される。正しく判定されていることは分かったが、CNN がどこに注目してその判断を下しているのかまでは分からない。それを視覚化するため、Grad-CAM という手法を用いて強調画像を作成した。Grad-CAM はクラス判定の出力値に寄与が大きい、すなわち強度の勾配が大きい箇所が、クラス判定において重要な箇所である、という考えに基づいた手法である。Fig. 2.2.4-1 の中図に Grad-CAM によって処理した画像が示されており、Fig. 2.2.4-1 の画像を線形成長フェーズと判定するに当たって、高波数領域における k_x 方向に広く大きな揺動振幅と $k_x = 0$ 近傍の低波数領域の揺動振幅の情報が、判定において重要な役割を果たしていることが視覚的に分かる。一方、Grad-

CAM から出力される強調画像は解像度が低いという問題点があり、重要な箇所を明瞭に捉えることができない。その問題点を克服するために、Guided Grad-CAM という、Guided Backpropagation と Grad-CAM を組み合わせた手法が開発された。Guided Backpropagation は入力画像から情報が上流に流れる際に、判定に負の影響を与える箇所を零に置換して、判定に正の影響を与える箇所のみを強調させる手法である。クラス判定において重要な役割を果たしている箇所の輪郭を強調表示できる特徴がある。Guided Grad-CAM によって処理した画像が Fig. 2.2.4-1 の右図に掲載してあり、CNN がどこを注視しているかがはっきりとした輪郭で示されていることが分かる。

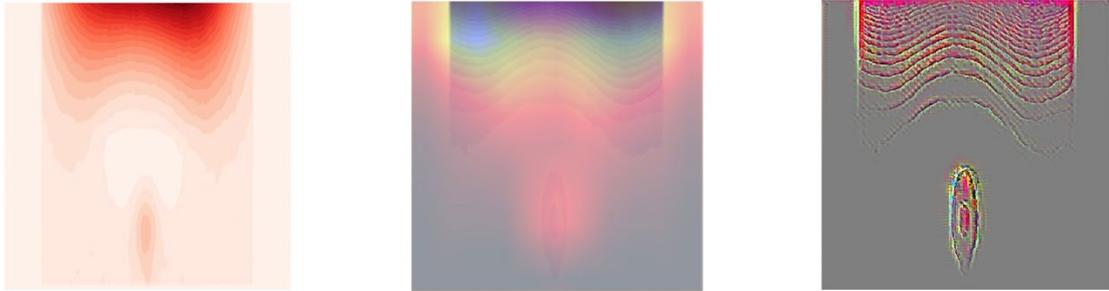


Fig. 2.2.4-1: Image of $f^2(k_x, k_y)$ at $t = 1.4$ with the original data (left), enhanced image by Grad-CAM (middle), and that by Guided Grad-CAM.

次に、画像からシミュレーション時刻を予測することを試みた。先のクラス分類がほぼ完全に成功しているということは、CNN は GKV シミュレーションの乱流発展段階を正しく理解していることを意味しており、それは画像に対応するシミュレーション時刻すらも予測できる可能性がある、ということである。非線形シミュレーションにおける揺動振幅の成長が飽和して乱流状態に遷移したときの時刻を 1 として規格化した時刻の予測を試みる。乱流状態となれば画像と時刻の紐付きが無くなってしまうため、目標を乱流状態への遷移までに絞る。先程の分類問題と異なり、時刻の予測は回帰問題となる。分類と異なり回帰となると具体的な数値が出力されるため、出力層の活性化関数の選択が重要となる。線形関数を用いると、負の時刻や 1 を超える時刻を予想することが考えられるため、出力層の活性化関数はシグモイド関数とした。適切な数の全結合層を加えるのは、先程の分類問題と同じである。訓練、妥当性検証に用いたデータ数はそれぞれ 2,016 と 576 であり、テストデータ 288 に対してモデルの性能を評価した。飽和以降のデータが省かれているため、先程の分類問題よりもより少ない画像数で訓練を行う必要がある。訓練された CNN による時刻予測の結果を Fig. 2.2.4-2 に示す。図に示した画像はテストデータであり、CNN の学習には用いられていない。それぞれの図には対応するシミュレーション内における時刻が **true** として掲載されており、その画像を与えたときに CNN が予測した時刻が **pred** として示されている。

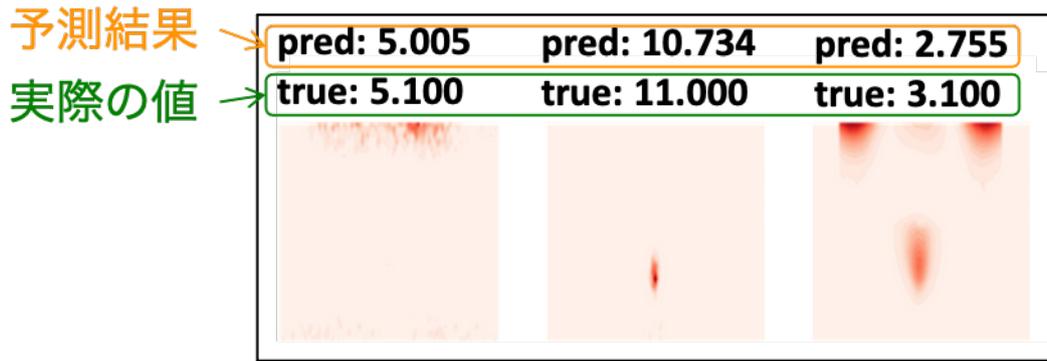


Fig. 2.2.4-2: Snapshots of $f^2(k_x, k_y)$ at three different times, and predicted times by the CNN model.

図から明らかなおおりに CNN が予測した時刻は実際の時刻と極めて近く、このことから分かることは、我々が開発した CNN は極めて高い予測性能を有していることであるが、もう一つ重要な事実、線形・非線形成長フェーズでは揺動振幅成長の履歴が存在し、画像には陰にその情報が含まれている、ということである。つまり、画像を与えると、その現在時刻は発展段階のどの位置にあるか、そして飽和まであとどれほどの時間が掛かるか、についての情報が引き出せる、ということになる。Fig. 2.2.4-2 に示した極めて良好な予測性能は偶然ではなく、全テストデータに対する予測結果を Fig. 2.2.4-3 に示しているが、シミュレーションの初期の線形成長フェーズから飽和直前まで、あらゆる時刻でその高い予測性能にむらが無い。決定係数は $R^2 = 0.9949$ であり、時刻の予測のズレは実用上誤差レベルであると言える。このような高い性能が高々 2 千枚程度の画像で得られていることは瞠目すべき点である。

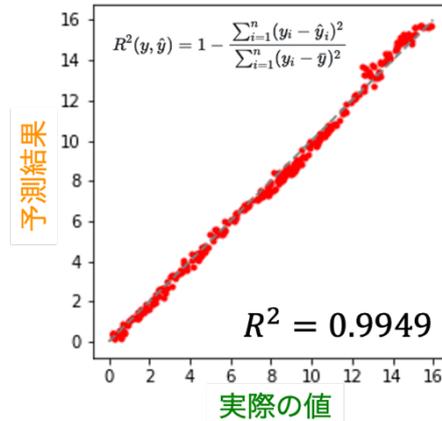


Fig. 2.2.4-3: Prediction time by CNN and its coefficient of determination R^2 for all test data.

2-2-4-2. CNN を用いた乱流輸送シミュレーションの飽和時刻予測

初期段階の画像においても時刻の予測が正確に行えるのであれば、初期の段階で、後どの程度の計算時間で飽和に至るかを推測することが可能となる。GKV のシミュレーションにおいて初期条件を変えた複数のシミュレーションを同時に実行し、ある程度進んだ段階で得られた画像から残り時刻を計算し、飽和に至るまでに掛かる時間が最も少ないシミュレーションのみを継続すれば、飽和に至るまでの計算時間を縮減し、GKV シミュレーションを効率的に実行することが可能となる。Fig. 2.2.4-4 は CNN の訓練に用いた GKV シミュレーションを Base として、初期に与える揺動振幅強度を千倍 (High)、千分の 1 倍

(Low) にした 3 つのケースの揺動振幅時間発展を示している。十分飽和するまでシミュレーションを継続すると全ケースで同レベルの揺動振幅水準に到達しており、その中で明らかに High のケースが一番早く (時刻 8) 飽和に至っている。そこで、全ケースで飽和に至っていない時刻 5 における画像を切り出して、CNN で時刻を予測させた。その結果、飽和規格化時刻を 1 としたときに、High のケースは 0.892、Low のケースは 0.222 と予測し、このことから求めた飽和時刻は High で 6.726、Low で 17.437 となった。飽和の瞬間を厳密に判断することは困難であるが、Low の飽和時刻を 25 と見做すと、良好な飽和時刻予測がなされていることが分かる。重要なのは、CNN は時刻 5 の画像を見て、High のケースは飽和直前、Low のケースは飽和に至るまでまだ長い時間が掛かると判断したことである。ユーザはこの結果を見て、Low のケースを棄却して High のケースのみシミュレーションを実行すれば良い事がわかる。この判断は機械的になされ、人間の判断を入れ込む必要はない。これにより飽和を得るためのシミュレーション時間を大幅に効率化することが可能であることが示された[4]。

今後さらに、CNN モデルを発展させ、事前にシミュレーションしたことの無いケースにおいても良好な予測が可能なモデルの構築に努めていく予定である。さらに、マルチモーダル入力によるモデルの更なる精度向上を目指す。

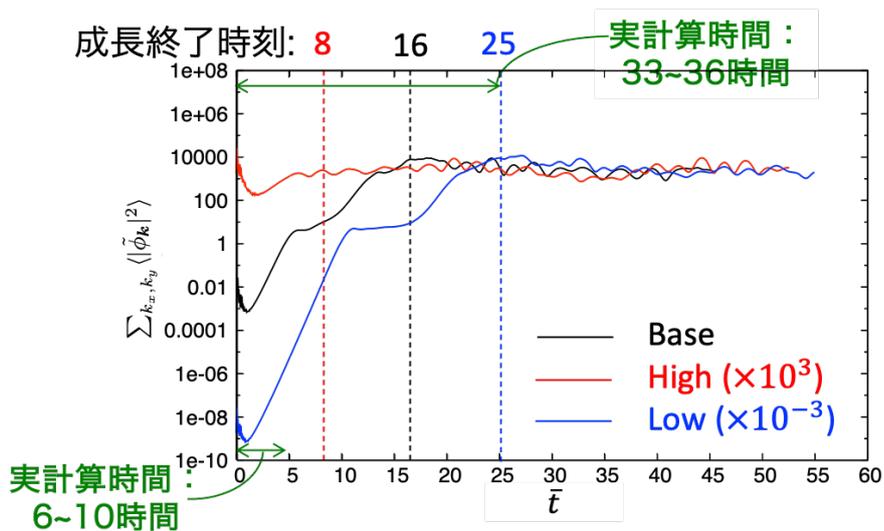


Fig. 2.2.4-4: Time-history of fluctuation amplitudes resulted from three GKV simulation runs with different initial conditions.

2-2-4-3. 第一原理シミュレーションとデータ科学による新しい輸送予測法の開発

乱流輸送レベルの評価は局所ジャイロ運動論に基づく第一原理シミュレーションによって確立されつつある。富岳を筆頭にスーパーコンピュータの演算性能向上と大規模化により、イオンスケールから電子スケールに至る広範な領域を同時に扱うことや、速度空間においてもこれまでにない高精度計算に手が届くようになってきた。一方で、実際のプラズマ実験の結果と比較可能な定量輸送評価では、フラックスマッチングと呼ばれる手法に基づいて、プラズマ温度および密度の勾配分布に対する広いパラメータ空間上で、上述の大規模計算を多数回実行する必要がある、最高性能の計算機を以てしても解析には限界がある。輸送評価の計算量低減を目指した簡約輸送モデルも開発されているが、シミュレーションや実験の

データを統計的に処理して構築された簡約モデルは、必ず一定の予測誤差が存在する。そこで、本研究では、プラズマ輸送の定量的評価に関する上述の課題の解決を目指し、データ科学における数理最適化手法を利用した新しいモデル最適化法を開発した[5-7]。

本手法は大きく3つに分けられる。まず、従来の簡約輸送モデルを初期モデルとして、これに数理最適化手法を利用してフラックスマッチングを適用し、プラズマの分布パラメータを推測する。次に、推測した分布パラメータの下でGKVコードを用いたジャイロ運動論シミュレーションを実行する。最後に、シミュレーション結果を用いて簡約モデルを再び、修正・最適化する。以上により、対象とするプラズマに応じて最適化されたモデルが得られる(Fig. 2.2.4-5)。ここで得られた最適化モデルは、従来のGKVコードでのシミュレーションを多数回実行した際に得られる輸送係数を非常に高い精度で再現する。さらに、本手法で得られた最適化モデルと大域的な分布の時間発展が計算できる統合輸送コードTASK3Dを組み合わせ、LHDプラズマのイオン温度分布の時間発展解析を行なった。その結果、ジャイロ運動論シミュレーションの実行回数を必要最小限に抑えながらも、多くのシミュレーションを実行した時と同等の精度を以て、温度分布の発展計算が可能になった。

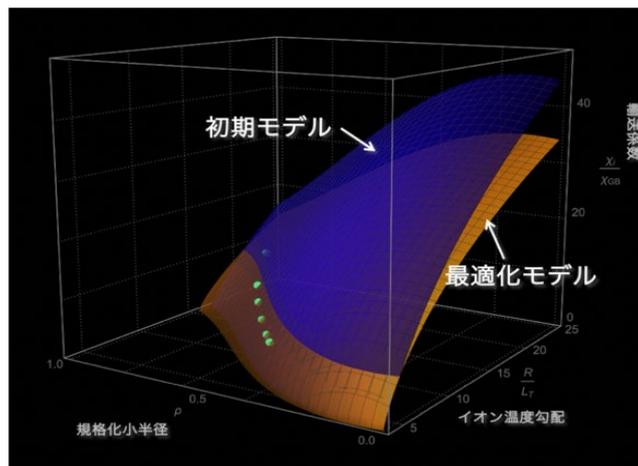


Fig. 2.2.4-5: Transport model for LHD plasma by means of the newly developed optimization method. From the primitive model (blue surface), the optimized model (orange surface) is obtained through a single GKV simulation run for each radial position (green dots).

【参考文献】

- [1] E. Narita and M. Honda, “Machine-learning-based modeling for acquiring insights into turbulent transport in fusion plasmas”, 3rd International Conference on Data-Driven Plasma Science (ICDDPS-3), 1 Apr. 2021, online. (招待講演)
- [2] M. Honda and E. Narita, “Development of a Surrogate Turbulent Transport Model and Its Usefulness in Transport Simulations”, The 29th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (ITC-29), 30 Oct. 2020, online. (招待講演)
- [3] M. Honda and E. Narita, “Development of a Surrogate Turbulent Transport Model and Its Usefulness in Transport Simulations”, Plasma Fus. Res. **16**, 2403002 (2021). (査読付き論文)
- [4] 成田絵美、本多充、前山伸也、渡邊智彦、「乱流揺動の非線形飽和過程の可視化と特徴抽出」、第37回プラズマ・核融合学会年会、2020年12月4日、オンライン。(口頭発表)

- [5] M. Nunami, S. Toda, H. Sugama, “Pinpoint gyrokinetic simulation for turbulent transport prediction assisted by machine learning and transport model”, 29th International Toki Conference (Online, October 27-30, 2020).
- [6] M. Nunami, “Turbulence Simulations for Stellarator Plasma Transport”, 30th Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases (Online, August 24-28, 2020). (招待講演)
- [7] 沼波政倫, “不純物粒子輸送の解明に向けた運動論的シミュレーション研究”, プラズマシミュレーターシンポジウム 2020 (オンライン, 2020年9月17日) .

2-3. 活動（研究会の活動等）

本課題では、各サブテーマの推進状況の確認及び課題全体の調整のため、各サブテーマのリーダーによる幹事会、並びに、課題参加者による課題推進会議を下表のようにオンラインにて開催した。

一般社会への広報活動として、本課題の web サイトを立ち上げ、またシミュレーション結果の動画を公開する YouTube チャンネルを開設した (<https://www.youtube.com/channel/UC2jG7tBGsoNtGj120-1y9VA>)。また、本課題のサブテーマ[1]で開発を行なっている局所乱流輸送シミュレーション・コード GKV の普及活動の一環として、大学院生及び研究者を対象とした利用講習会を開催した。GKV コードについては、最新版を Github において公開した (<https://github.com/GKV-developers>)。

日程	会議・会合名
2020年7月11日	令和2年度第1回幹事会
2020年7月31日	令和2年度第1回課題推進会議
2020年11月19日	令和2年度第2回幹事会
2020年12月4日	令和2年度第2回課題推進会議
2021年2月2日	令和2年度第3回幹事会
2021年3月19日	令和2年度成果報告会
2021年3月22日	第5回GKV講習会

2-4. 実施体制

業務項目	担当機関	担当責任者
(1) サブテーマ[1] 核燃焼プラズマのマルチスケール乱流輸送シミュレーション	愛知県名古屋市千種区不老町 国立大学法人東海国立大学機構 名古屋大学大学院理学研究科	教授 渡邊 智彦
(2) サブテーマ[2] 核燃焼プラズマの自発回転と過渡応答	千葉県柏市若柴178-4 柏の葉 キャンパス148-4 国立研究開発法人日本原子力研 究開発機構 システム計算科学センター 岐阜県土岐市下石町322-6 大学共同利用機関法人自然科学 研究機構核融合科学研究所 ヘリカル研究部	室長 井戸村 泰宏 教授 藤堂 泰
(3) サブテーマ[3] 核燃焼生成高エネルギー粒子の閉じ込め解析	岐阜県土岐市下石町322-6 大学共同利用機関法人自然科学 研究機構核融合科学研究所	教授 藤堂 泰

	ヘリカル研究部	
(4) サブテーマ[4] 核融合 大規模シミュレーションへの AI/データ科学の融合的アプ ローチ	茨城県那珂市向山801-1 国立研究開発法人量子科学技術 研究開発機構那珂核融合研究所 先進プラズマ研究部	上席研究員 本多 充
(5) プロジェクトの全体推 進	愛知県名古屋市千種区不老町 国立大学法人東海国立大学機構 名古屋大学大学院理学研究科	教授 渡邊 智彦

別添 1 学会等発表実績

- [1] C. Kawai, Y. Idomura, Y. Ogawa, H. Yamada, “Self-organization of zonal flows and isotropic eddies in toroidal electron temperature gradient driven turbulence” , Physics of Plasmas, Vol. 27, pp.082302 (2020) (査読付き論文)
- [2] Y. Idomura, T. Ina, Y. Ali, T. Imamura, “Acceleration of Fusion Plasma Turbulence Simulations using the Mixed-Precision Communication-Avoiding Krylov Method”, SC20: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC), Atlanta, GA, US, 2020 pp.1318-1330 (2020) (査読付き論文)
- [3] Y. Asahi, K. Fujii, D.-M. Heim, S. Maeyama, X. Garbet, V. Grandgirard, Y. Sarazin, G. Dif-Pradalier, Y. Idomura, M. Yagi,” Compressing the time series of five dimensional distribution function data from gyrokinetic simulation using principal component analysis”, Physics of Plasmas, Vol. 28, pp.012304 (2021) (査読付き論文)
- [4] Y. Idomura, K. Obrejan, Y. Asahi, M. Honda, “Dynamics of enhanced neoclassical particle transport of tracer impurity ions in ion temperature gradient driven turbulence”, Physics of Plasmas, Vol. 28, pp.012501 (2021) (査読付き論文)
- [5] Y. Idomura, T. Ina, Y. Ali, T. Imamura, “Communication-avoiding Krylov solvers for extreme scale nuclear CFD simulations”, Proceedings of SNA+MC2020, pp.225-230 (2020) (査読付き論文)
- [6] Y. Asahi, G. Latu, V. Grandgirard, J. Bigot, “Performance portable implementation of a kinetic plasma simulation mini- app with a higher level abstraction and directives” Proceedings of SNA+MC2020, pp.218-224 (2020) (査読付き論文)
- [7] M. Honda, E. Narita, “Development of a Surrogate Turbulent Transport Model and Its Usefulness in Transport Simulations”, Plasma Fusion Research,16, 2403002 (2021) (査読付き論文)
- [8] T. Moritaka, M. Cole, R. Hager, S.-H. Ku, C. -S. Chang, S. Ishiguro, “Improving gyrokinetic field solvers toward whole-volume modeling of stellarators”, Plasma and Fusion Research,16, pp.2403054 (2021) (査読付き論文)
- [9] 井戸村泰宏, 伊奈拓哉, Y. Ali, 今村俊幸, “富岳および Summit における核融合プラズマ流体解析の高速化”、第 34 回数値流体力学シンポジウム (オンライン開催、2020 年 12 月 21 日～23 日)
- [10] Y. Idomura, “Global Full-f Gyrokinetic Simulations of Isotope Scaling in Ion Temperature Gradient Driven Turbulence” , 4th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics (Online, October 26-31,2020) (招待講演, 国際学会)
- [11] Y. Asahi, G. Latu, V. Grandgirard, J. Bigot, “Accumulating knowledge for a performance portable kinetic plasma simulation code with Kokkos and directives”, IFERC Workshop on GPU Programming 2020 (Online, December 16,2020)
- [12] 朝比祐一, 藤井恵介, D.M.Heim, 前山伸也, 井戸村泰宏, “主成分分析によるジャイロ運動論的シミュレーションの位相空間構造データの圧縮” 日本物理学会 2020 年秋季大会 (オンライン開催、2020 年 9 月 10 日)
- [13] 朝比祐一, “5 次元分布関数時系列データの低次元表現、” プラズマ・核融合学会第 37 回年会 (オン

ライン開催、2020年12月3日)

- [14] 井戸村泰宏, Kevin Obrejan, 朝比祐一, 本多充, ”イオン温度勾配駆動乱流と新古典粒子輸送の相互作用機構” 日本物理学会 第76回年次大会 (オンライン開催、2021年3月14日)
- [15] Y. Idomura, ”Dynamics of enhanced neoclassical particle transport of tracer impurity ions in ion temperature gradient driven turbulence” 26th ITPA Transport and Confinement Topical Group Meeting (Online, March, 2021)
- [16] T.-H. Watanabe, S. Maeyama, and M. Nakata, ”Multiscale TEM-ETG GK simulations” ITPA 24th Transport and Confinement Topical Group Meeting (Online, June 29 to July 3, 2020)
- [17] E. Narita, M. Honda, M. Nakata, M. Yoshida, N. Hayashi, ”Update on GKW neural network based on JT-60U data” 24th ITPA Transport and Confinement Topical Group Meeting (Online, June 29 to July 3, 2020)
- [18] 成田絵美, 本多充, 仲田資季, 吉田麻衣子, 林伸彦, ”乱流飽和則の開発によるニューラルネットワーク輸送モデリング” 日本物理学会 2020年秋季大会 (オンライン開催、2020年9月10日)
- [19] 成田絵美, 本多充, 前山伸也, 渡邊智彦, ”乱流揺動の非線形飽和過程の可視化と特徴抽出” 第37回プラズマ・核融合学会年会 (オンライン開催、2020年12月3日)
- [20] 成田絵美, 本多充, 仲田資季, 吉田麻衣子, 林伸彦, ”粒子・熱流束の実験値を考慮した準線形乱流輸送モデリング” 日本物理学会第76回年次大会 (オンライン開催、2021年3月14日)
- [21] E. Narita, M. Honda, ”Machine-learning-based modeling for acquiring insights into turbulent transport in fusion plasmas” 3rd International Conference on Data Driven Plasma Science (Online, March 15, 2021) (招待講演, 国際学会)
- [22] M. Honda, E. Narita, ”Development of a surrogate turbulent transport model and its usefulness in transport simulations” The 29th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (Online, October, 2020) (招待講演, 国際学会)
- [23] M. Nunami, ”Turbulence Simulations for Stellarator Plasma Transport” 30th Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases (SPIG2020) (Online, August 28, 2020) (招待講演, 国際学会)
- [24] M. Nunami, ”Pinpoint gyrokinetic simulation for turbulent transport prediction assisted by machine learning and transport model” The 29th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (Online, October 29, 2020).
- [25] 沼波政倫, ”不純物粒子輸送の解明に向けた運動論的シミュレーション研究” プラズマシミュレータシンポジウム 2020 (オンライン開催、2020年9月20日~25日)
- [26] M. Nunami, ”Large-scale Plasma Simulation by Using SX-Aurora TSUBASA” NEC User Group Meeting (NUG Meeting XXXII) (Online, September, 2020)
- [27] 沼波政倫, ”乱流抑制配位創成に向けた機械学習による乱流輸送モデルの効率的な最適化” 第37回プラズマ・核融合学会年会 (オンライン開催、2020年12月3日)
- [28] 佐藤雅彦, 藤堂泰, ”LHDにおける圧力駆動型不安定性の非線形飽和機構に対するイオンの運動論的效果” 第37回プラズマ核融合学会年会 (オンライン開催、2020年12月3日)
- [29] H. Wang, ”Simulations of energetic particle driven instabilities in the quasi-axisymmetric

- plasmas” 日本物理学会 2020 年秋季大会（オンライン開催，2020 年 9 月 10 日）
- [30] H. Wang,” Simulations of energetic particle driven instabilities in CFQS” The 29th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (Online, October 29, 2020).
- [31] H. Wang,” Simulations of energetic particle driven instabilities in the quasi-axisymmetric stellarator” 第 37 回プラズマ・核融合学会年会（オンライン開催，2020 年 12 月 3 日）
- [32] T. Moritaka, M. Cole, R. Hager, S-H. Ku, C. S. Chang. S. Ishiguro,” Improved Field Solver for Gyrokinetic Simulation in Stellarator Edge Region” The 29th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (Online, October 29, 2020).
- [33] 森高外征雄, M. Cole, R. Hager, S-H Ku, C. S. Chang, S. Ishiguro,” 様々なプラズマ環境への応用に向けたジャイロ運動論 PIC 法の開発” 第 37 回プラズマ・核融合学会年会（オンライン開催，2020 年 12 月 3 日）（招待講演，国内学会）
- [34] 森高外征雄, M. Cole, R. Hager, S. Lazerson, 佐竹真介, 松岡清吉, 沼波政倫, C-S. Chang, 石黒静児, 洲鎌英雄,” ヘリカル核融合炉全系輸送解析のためのジャイロ運動論粒子コードの開発” 日本物理学会 2020 年秋季大会（オンライン開催，2020 年 9 月 10 日）
- [35] M. Idouakass, Y. Todo, H. Wang, J. Wang, R. Seki,” Numerical observation of an $m/n=2/1$ mode with strong energetic particle redistribution in LHD” The 29th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (Online, October 29, 2020).
- [36] M. Idouakass, Y. Todo, H. Wang, J. Wang, R. Seki,” Numerical simulations of MHD modes with strong energetic particle pressure redistribution in the LHD” 2021 Max Planck Princeton Center Annual Meeting (Online, January 19-22,25-26,2021)
- [37] M. Idouakass, Y. Todo, H. Wang, J. Wang, R. Seki, M. Sato,” Nonlinear simulations of MHD modes with a strong energetic particle pressure redistribution in the LHD” 10th IFERC-CSC workshop (Online, April,2021)
- [38] 藤堂泰, 佐藤雅彦, 王灝, 關良輔, ” アルフベン固有モードと相互作用する高エネルギー粒子と熱イオンの分布関数解析” 日本物理学会 2020 年秋季大会（オンライン開催，2020 年 9 月 10 日）
- [39] Y. Todo,” Comparison among JFRS-1, Plasma Simulator, and Fugaku” IFERC-CSC Workshop on GPUs (Online, December 16,2020)
- [40] S. Maeyama, M. Sasaki, K. Fujii, T. Kobayashi, R. O. Dendy, Y. Kawachi, H. Arakawa, S. Inagaki, New Journal of Physics, in press (2021). <https://doi.org/10.1088/1367-2630/abeffc>（査読付き論文）
- [41] S. Maeyama, 4th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics (AAPPS-DPP2020), (e-conference, October 29, 2020) .（招待講演，国際学会）
- [42] 前山伸也, 佐々木真, 藤井恵介, 小林達哉, R. O. Dendy, 河内裕一, 荒川弘之, 稲垣滋, 日本物理学会 第 76 回年次大会（オンライン開催，2021 年 3 月 14 日）.
- [43] 前山伸也, 相羽信行, 渡邊智彦, 松山顕之, 矢木雅敏, 第 37 回プラズマ核融合学会年会（オンライン開催，2020 年 12 月 3 日）.
- [44] 前山伸也, 渡邊智彦, 日本物理学会 2020 年秋季大会（オンライン開催，2020 年 9 月 10 日）.
- [45] 前山伸也, 統計数理研究所共同研究集会「諸科学における大規模データと統計数理モデリング」（オンライン開催，2020 年 8 月 3 日）.

- [46] T.-H. Watanabe, “Multi-scale gyrokinetic simulation of TEM/ETG turbulence”, 24th Transport and Confinement Topical Group Meeting (Online, July 3, 2020).
- [47] 渡邊智彦, 前山伸也, 仲田資季, “電子温度勾配と捕捉電子モード不安定性の競合とマルチスケール乱流輸送”, 日本物理学会 2020 年秋季大会 (オンライン開催, 2020 年 9 月 10 日).
- [48] T.-H. Watanabe, S. Maeyama, and H. Sato, “Multi-scale and multi-directional turbulence simulation of fusion plasma”, Space-time topology behind formation of micro-macro magnetovortical structure manifested by Nambu mechanics (Online, September 28, 2020).
- [49] T.-H. Watanabe, S. Maeyama, and M. Nakata, “Cross-scale interactions of TEM/ETG instabilities in H/D plasmas”, The 29th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (Online, October 29, 2020).
- [50] 渡邊智彦, 前山伸也, 仲田資季, “捕捉電子モードと電子温度勾配乱流の相互作用と同位体効果”, 第 37 回プラズマ核融合学会年会 (オンライン, 2020 年 12 月 3 日) .
- [51] 渡邊智彦, 前山伸也, 仲田資季, “電子温度勾配乱流中の捕捉電子モードの安定化”, 日本物理学会第 76 回年次大会 (オンライン開催, 2021 年 3 月 14 日).