

jh170020-NAJ

Optimisation of Fusion Plasma Turbulence Code toward Post-Petascale Era II

前山伸也 (名古屋大学)

概要 本研究課題は、プラズマ乱流シミュレーションコードの高度化とそれを利用した物理解析を行い、核融合プラズマ研究に資することを目的とする。コードの高度化に関して、前年度開発した GPU 版コードを CUDA/Thrust 系へ移植するとともに、通信演算オーバーラップを実装することで、~2 倍の性能向上を得た。また、アルゴリズム拡張として衝突項の陰解法化を行い、演算密度増大による計算効率の向上と、大きな時間刻み幅による求解時間 (Time to solution) の短縮の両立を実現した。物理解析に関しては、近年核融合分野で議論されている局所モデルによる輸送予測が装置周辺領域では過小評価になるという、Shortfall 問題に対して 2 つの異なる観点から解析した。第一に、磁力線方向への乱流自己相関を緩和した改良局所モデルを適用し、輸送増大が起こることを示した。第二に、大域的モデルを適用し、微視的乱流揺動と大域的古典輸送の相互作用により輸送増大が起こることを示した。従来の局所モデル解析に含まれていなかったこれらの効果は、Shortfall 問題を解消する糸口になり得ると期待される。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

東京工業大学
名古屋大学

担当する。青木尊之 (東京工業大学) と荻野正雄 (名古屋大学) は、それぞれ TSUBAME 上での GPU への最適化および FX100 上での CPU への最適化支援を担当する。

(2) 共同研究分野

- 超大規模数値計算系応用分野
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

2. 研究の目的と意義

本研究課題は、将来の基幹エネルギー源の候補の一つと期待される核融合プラズマの研究開発に資することを目的とし、シミュレーションコードの高度化とそれを利用した物理解析を行う。

計算科学の観点からは、核融合プラズマの乱流解析に用いられる 5 次元ステンシル計算を如何にして最先端のメニーコアアーキテクチャ上で高速実行するかという問題があり、異なるアーキテクチャの特性を考慮したマルチプラットフォーム開発を行うことで、問題の特性と対策を明らかにする。本年度は特に、次世代のエクサスケール流体コード開発に資することを目的とし、メニーコアアーキテクチャ環境における転置通信の最適化手法について調べた。

核融合学の観点からは、異なる特徴を持つ

(3) 参加研究者の役割分担

代表者の前山伸也 (名古屋大学) は核融合プラズマ中の乱流輸送現象に関する物理解析を担当する。副代表者の朝比祐一 (フランス原子力庁) はシミュレーションコードのマルチプラットフォーム開発およびコードの最適化を担当する。課題参加者の Xavier Garbet と Guillaume Latu (フランス原子力庁) は大域的プラズマ乱流シミュレーションに関した、渡邊智彦 (名古屋大学) は局所的プラズマ乱流シミュレーションに関した物理解析支援を

コード（大域的コード GYSELA 及び局所的コード GKV）を用いた相互補完的な解析により、閉じ込め性能の予測モデルの高度化を目指す。具体的には、今年度は従来局所的コードで予測が困難とされてきた、熱輸送の Shortfall 問題（局所的コードの予測は、炉心部分について輸送レベルの実験値を再現するものの、プラズマ周辺領域では実験値を大きく下回ることが知られ、問題となっている）に取り組んだ。

これらは計算科学および核融合学が直面している挑戦的課題であり、将来の HPC に対する核融合プラズマシミュレーションコードの適応性を明らかにするとともに、核融合エネルギー開発に資する物理的知見を得るという点から、学術的・社会的意義が高い。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

JHPCN では、FX100、TSUBAME3.0 など最先端のメニーコアアーキテクチャ利用環境が複数提供されており、本研究で行うマルチプラットフォーム開発に最適の環境である。マルチプラットフォームでアプリ開発を行い、アーキテクチャの特性を活かした最適化手法を確立することは、ポストペタスケールでの研究展開の礎となる。また、国際協力に基づき複数コードで最適化を行うことで、最適化手法ごとの利点・欠点などの比較を行うことができる。

まず、GKV コードと GYSELA コードで実装されている転置通信のパターンを比較し、GYSELA コードで実装されている転置通信の方が通信コストの観点で効率的なことを明らかにした。新たに開発された GPU 版 GKV コードでは、転置通信を GYSELA コードの手法で実装し、通信コストを従来版の 1/3 程度に削減した。同様に、転置通信部分に関するオーバーラップを KNL 版の GYSELA コードに適用したところ、最大 5%程度の性能向

上が得られた。GPU 版 GKV コード向けに開発した技術の大部分は FX100 版にも適用可能であり、FX100 版の高速化も見込まれる。また、本年度新たに FX100 において開発されたノード間通信フリーの衝突項ソルバーは、演算密度が高く GPU に極めて適した実装と言える。

これらは、JHPCN の枠組みで提供されるマルチプラットフォームの利点を生かした研究と言える。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

前年度は“Multi-platform Development of Fusion Plasma Turbulence”（課題番号：jh160028-NAJ）の研究課題において、まず、プラズマ乱流シミュレーションコード GKV の TSUBAME2.5 への移植および性能評価を行い、通信律速の性能劣化が課題として顕在化した。次に、FX100 におけるアシスタントコアを利用した通信・演算オーバーラップ手法の性能評価を行い、チャンクサイズ依存性を明らかにした。また、物理応用として、経済性に優れた高圧力プラズマで顕著になると考えられるマイクロティアリングモードの線形・非線形解析を行った。

以上の成果を受けて、今年度は GPU 環境での通信最適化、アルゴリズムの拡張、および開発したコードを利用した物理解析を展開した。

5. 今年度の研究成果の詳細

今年度は、GKV・GYSELA コードの通信最適化（5.1, 5.2 節）、衝突項陰解法の高効率実装（5.3, 5.4 節）、物理解析への応用（5.5, 5.6 節）の 3 つに取り組んだ。

5.1. GKV・GYSELA コードの通信最適化（前期）

GPU や Xeon Phi KNL を始めとする次世

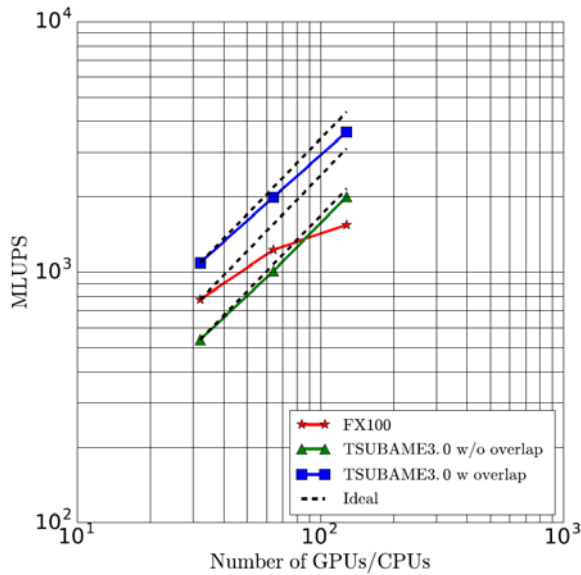


図 1. FX100 及び TSUBAME3.0 におけるストロングスケーリング。性能は MLUPS (Mega Lattice Update Per Second) で評価。

代のアーキテクチャにおける転置通信の最適化を行った。前年度開発した GPU 版 GKV コードを CUDA/Thrust 系へと移植するとともに、畳み込み積分、移流計算実行時の通信と演算のオーバーラップを実装した。高次元ステンシル計算であることに着目し、演算と無関係な次元についてパイプライン化を行うことで、従来よりも効率的にオーバーラップできることが明らかとなった。これに加えて転置通信を最適化したことで、TSUBAME3.0 では、FX100 と比べ 2 倍程度の性能向上に成功した。約 5 倍のプロセッサの演算性能差 (TSUBAME3.0 ~ 5TFlops, FX100 ~ 1TFlops) に対し低い性能向上率となっているのは、ノード間通信の性能差が 2 倍であることによると考えられる (TSUBAME3.0 ~ 4x12.5GB/s, FX100 ~ 2x12.5GB/s)。特に GPU 版においては、全体のコストのおよそ 50% がノード間通信コストとなっているため、ノード間通信の性能がコード全体の性能を大きく左右する。

図 1 は、FX100 及び TSUBAME3.0 における、格子解像度 109 点 (= 128 x 128 x 64 x 32 x 16 x 2)、32 ~ 128 CPU/GPU でのストロン

グスケーリングの性能測定結果である。畳み込み積分において必要となる転置通信に関するスケーラビリティを調べるため、波数空間における並列度を変化させた。TSUBAME3.0 におけるオーバーラップの効果は主に、ホストデバイス通信とノード間 MPI 通信のオーバーラップに起因する。TSUBAME3.0 においてはオーバーラップ版、非オーバーラップ版ともに高いスケーラビリティが得られている。FX100 における性能劣化は、転置通信のコストが最適化済みの GPU 版と比べ 3 倍程度であることに加え、ノード数が TSUBAME3.0 と比べ 4 倍であることによると考えられる。

5.2. GKV・GYSELA コードの通信最適化 (後期)

前期は、GKV の Cuda/Thrust への移植とパイプライン化による通信演算オーバーラップの並列 FFT への適用を行った。後期は、コア数に比べて小メモリであるメニーコア環境に対応するため、並列 FFT の最適化を進めた。具体的には、パイプライン処理において、メモリ削減と高速処理を両立するために、ポイントのスワップを利用して、メモリコピーを行わずに作業配列を再利用するように改良を施した。これにより、作業配列のサイズをバッチ数分の 1 へと削減でき、処理速度を損なうことなくメモリの大幅な削減が実現された。

さらに、GYSELA コードにも同種の通信演算オーバーラップを実装した。この際、独立次元方向へのパイプライン化処理だけでなく、タスクレベルでの通信演算オーバーラップも試した。後者では、通信用コアが MPI 通信を行っている間に、その他の演算用コアが独立な演算タスクを実行する。今回は簡易に手法の適用性を確認するために、通信・演算タスクの組み合わせはコード中で静的に記述した。通信演算オーバーラップの実装により、GYSELA コードにおいても演算性能の向上が実現された (表 1)。しかしながら、並列度

表 1. GYSELA コードのタスクレベル通信演算オーバーラップによるスピードアップ。

Nodes	Original	Overlap	Speedup
64	47.1 s	31.9 s	1.48
128	43.4 s	30.4 s	1.43
256	28.7 s	23.4 s	1.22
512	24.6 s	22.1 s	1.11

に応じて MPI 通信や各演算タスクの比率が変化していくため、単一の静的コーディングでは必ずしも最良のタスクレベル通信演算オーバーラップが実現されないという課題も明らかとなった。このため、有向非巡回グラフに基づくアルゴリズムや StarPU のようなタスク処理フレームワークを利用してタスクの依存関係の解決を自動化することで、並列度に応じてタスク処理比率が変化しても、その都度ロードインバランスを最小化することが望まれる。

5.3. 衝突項陰解法の高効率実装（前期）

次に、GKV コードのアルゴリズム拡張として、衝突項の陰解法化を行った。この拡張の動機は、特に Shortfall 問題で対象とするような装置周辺領域では、プラズマの温度が低くなり、衝突周波数が高くなることに起因する。速度分布関数を扱う運動論的シミュレーションでは、衝突周波数が粒子速度の 3 乗の逆数に比例するような依存性を持つため、低速の電子の扱いにおいて衝突項の CFL 条件が時間刻み幅を律速する。この制約を解消するため、作用素分割法を利用して、無衝突項は従来通りの陽解法で、衝突項は陰解法で解くアルゴリズムの実装を行った。ここで、衝突項は速度空間に対する微積分オペレータであることに着目し、速度空間並列プロセスに対するデータの転置通信を行い、実空間を細分化し速度空間を大域的に持つようなデータの持ち替えを行う。これは、MPI 分割の部分集合に対する転置通信であるので、他の次元方向

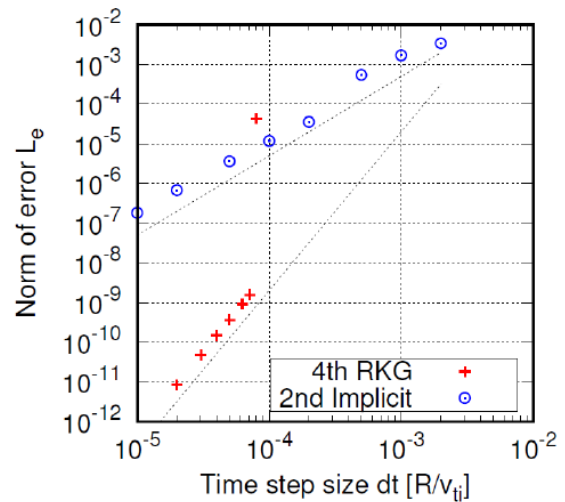


図 2. 時間刻み幅に対する誤差の収束性。赤が従来の陽解法、青が今回実装した陰解法によるシミュレーション結果。

へのスケーラビリティは確保しつつ、衝突項の陰解法による反復法ソルバーは MPI 通信フリーで計算できるというメリットがある。図 2 は従来の陽解法（4th RKG）と新たに実装した陰解法（2nd Implicit）による、時間刻み幅に対する誤差を図示したものである。陽解法では衝突項の CFL 条件により、 $dt=8 \times 10^{-5} R/v_{ti}$ 程度の小さな時間刻み幅までしか安定に解けないのに対し、陰解法では衝突項による律速を超え、移流項による CFL 条件の限界 $dt=2 \times 10^{-3} R/v_{ti}$ 程度まで安定に解けている。また、誤差のスケールから、今回設計した通りの 2 次精度の収束性が確認された。

さらに、開発した手法を非線形乱流解析に適用した際の演算性能や求解時間の評価を FX100 上で行った。その結果を表 2 にまとめる。陰解法では、その反復法ソルバーのために多数の演算を必要とするが、前述したように、この反復演算は MPI 通信フリーに計算できるため、演算密度が大幅に向上しており、FLOPS 値は約 3 倍に向上している。全体の演算数が増えるために時間ステップあたりの処理時間は 8 割ほど増加した。しかしながら、この例では時間刻み幅を 20 倍ほど大きくとれるため、最終的な求解時間としては約 10 倍

表 2. FX100 上での非線形計算の性能評価。格子解像度は 1.8×10^9 点で、FX100 の 192 ノードを利用して計測。プラズマパラメータは Shortfall 問題の解析に用いられる実験的パラメータとした。

	4th Explicit	2nd Implicit
FLOPS (/PEAK)	8.67 TFLOPS (4.01%)	25.78 TFLOPS (12.5%)
Elapsed time per step	1.76 sec/step	3.13 sec/step
Time step size	$5 \times 10^{-5} R/v_{ti}$	$1 \times 10^{-3} R/v_{ti}$
Speed-up to solution	1	10 times faster

の高速化が実現された。以上のように、衝突項の陰解法実装は物理的にも計算効率的にもメリットがあることが示された。このような省 MPI 通信および高演算密度の実装はメニーコアアーキテクチャにおいて特に有用と期待される。

5.4. 衝突項陰解法の高効率実装（後期）

衝突項陰解法の開発に関しては前期で一通り完了し、後期は開発した手法が非線形乱流の物理解析に適用可能であることを実証するため、長時間の非線形シミュレーションを行い、乱流揺動により引き起こされる熱輸送フラックスの評価を行った。図 3 に示す通り、従来の陽解法と新たに実装した陰解法は、線形の範囲ではほぼ完全に一致していることが示された。長時間の振る舞い ($t > 55R/v_{ti}$) ではごく僅かにずれが生じるが、これは非線形現象に見られる初期値鋭敏性のためであり、時間積分法の違いによる数値誤差が長時間の振る舞いのずれを生み出す。しかしながら、期待される通り、乱流揺動の時間スケールや

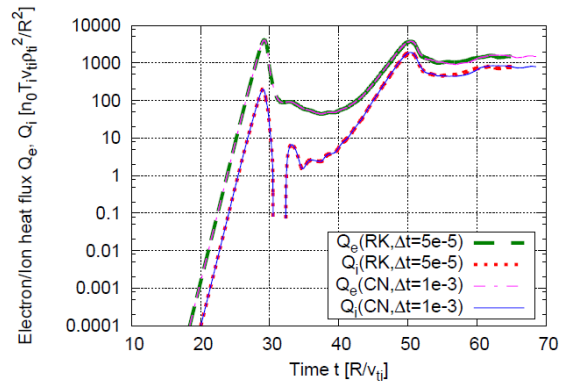


図 3. 非線形乱流シミュレーションにおける熱輸送フラックスの時間発展。電子およびイオン熱輸送について、緑破線、赤点線が従来の陽解法による結果、桃一点鎖線、青実線が今回実装した陰解法による結果を示す。

熱輸送フラックスは小さなずれ（時系列データの標準偏差内）にとどまっている。このことから、今回開発した衝突項陰解法が、計算を～10 倍程度高速化しつつ、プラズマ乱流の振る舞いを解析するうえで十分な精度を持つことが確認された。

5.5. 物理解析への応用成果（前期）

物理応用課題として、Shortfall 問題の原因究明に向けて、Flux tube train モデルと呼ばれる改良局所モデルを解析に適用した。Flux tube train モデルでは、従来の局所モデルで想定される磁力線方向の乱流相関について緩和して、磁力線方向に長いシミュレーション領域をとることで、長い自己相関を持つ乱流揺動を扱うことができるモデルである。特に、Shortfall 問題のパラメータ領域で不安定化される補足電子モードは磁力線方向に長い相関を持ちうるため、Flux tube train モデルが有効となると期待される。表 3 は従来の局所モデルによる解析と Flux tube train モデルによる解析の比較を行った初期的結果である。Flux tube train モデルを用いることで、乱流輸送フラックスが 2 割程度増大していることが確認できる。この結果は、従来の局

表 3. Flux tube train モデルによる Shortfall 問題のイオン熱輸送フラックスの解析。トレインの長さ $Nt=1$ は従来の局所モデルに相当し、トレインを長くするほどイオン熱輸送が増大する傾向。

トレインの長さ Nt	イオン熱輸送フラックス Q_i
1	156.2
3	155.6
5	179.0
7	190.2

所モデルで仮定される磁力線方向の乱流相関が Shortfall 問題の要因の一つとなり得ることを示唆している。

5.6. 物理解析への応用成果（後期）

前期は Shortfall 問題に対して、GKV コードを利用し、局所モデルの改良という観点から議論した。後期は、GYSELA コードを利用し、大域モデルの観点から解析を行った。局所モデルでは、乱流揺動のスケールが大域的平衡のスケールに小さいという仮定の下でスケール分離を行い、乱流輸送と大域的新古典輸送を別々に取り扱うが、大域モデルでは両者の発展・相互作用を同時に取り扱う。

本課題では乱流が駆動する対流胞 (Convective cell) と新古典輸送との結合という、局所モデルでは表現できない物理過程に着目して解析した。図 4 は、数値フィルタにより Convective cell を排除した場合としない場合のポテンシャル構造の違いを示す。基本的なモード構造に違いは無いが、フィルタによりポロイダル方向に長波長を持つモードが排除出来ていることがわかる。続いて、図 5 に示すように新古典輸送レベルの比較をフィルタ有無の場合で行なった。図 5 右図に見られるようにフィルタを適用した時点 ($t = 350$) で、新古典輸送が大きく低減されることが明らかとなった。言い換えると、乱流

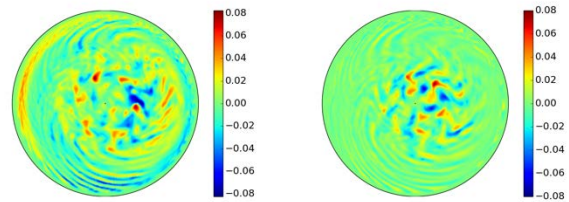


図 4. 数値フィルタにより Convective cell を排除しなかった場合 (左図)、排除した場合 (右図) の静電ポテンシャルのポロイダル断面図。

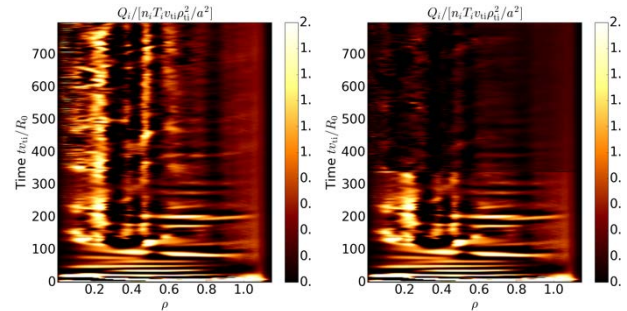


図 5. 数値フィルタにより Convective cell を排除しなかった場合 (左図)、排除した場合 (右図) の新古典輸送の時空間プロット。

駆動の Convective cell により新古典輸送が増大する。このプロセスは、Convective cell の有無によってプラズマの分布関数が異なる平衡状態へと緩和することに起因すると考えられる。本課題により、局所的コードでは表現できない物理過程による輸送増大 (Shortfall の解消) の可能性が示された。今後さらに、大域一局所モデル間の比較を進めることで、Shortfall 問題に対する新しい視点を与えると期待される。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

当初の計画通り、前年度開発した GPU 版 GKV コードを CUDA/Thrust 系へと移植するとともに、畳み込み積分、移流計算実行時の通信と演算のオーバーラップを実装した。これによって、TSUBAME3.0 では、FX100 と比べ 2 倍程度の性能向上に成功した。

次に、Shortfall 問題で対象となる装置周辺

領域の解析に有用な衝突項の陰解法アルゴリズムの実装を行った。誤差評価と性能評価を行い、その物理的・計算効率的有用性を実証した。

以上より、コード開発に関しては今年度の当初計画以上の進展を達成した。さらに、今後の展望として、任意の問題規模・並列度において通信演算オーバーラップの効果を引き出すために、有向非巡回グラフに基づくアルゴリズムや StarPU のようなタスク処理フレームワークを利用して、タスクの依存関係の解決を自動化し、ロードインバランスを最小化することが有効となるだろうという開発指針を得た。

物理応用に関しては、従来の局所モデルシミュレーションで報告された Shortfall 問題（熱輸送の過小評価問題）に関して、拡張局所モデルにおける磁力線方向乱流相関の緩和や、大域モデルにおける乱流揺動・大域的古典輸送相互作用といった、従来の局所モデルに含まれない効果が輸送増大を導くことを示した。どの物理効果がどの程度支配的になるか、Shortfall 問題を定量的に解消しうるかは今後の研究課題として残された。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

- [1] (投稿中) S. Maeyama, T.-H. Watanabe, Y. Idomura, M. Nakata, and M. Nunami, “Implementation of a gyrokinetic collision operator with an implicit time integration scheme and its computational performance”, submitted to *Comput. Phys. Commun.* (2018).
- [2] S. Maeyama, T.-H. Watanabe, and A. Ishizawa, “Suppression of ion-scale microtearing modes by electron-scale turbulence via cross-scale nonlinear interactions in tokamak plasma”, *Phys. Rev.*

Lett. 119, 195002 (2017).

(2) 国際会議プロシーディングス

(3) 国際会議発表

- [3] (口頭, 招待講演) S. Maeyama, “Cross-scale interactions between electron and ion scale plasma turbulence via sub-ion-scale structures”, International Conference on Numerical Simulation of Plasmas, Leuven, Belgium, September 19, 2017.
- [4] (口頭) S. Maeyama, “Multi-scale turbulence simulations of micro-tearing modes and electron-temperature-gradient mode”, 3rd US-Japan JIFT Exascale Computing Workshop, Kashiwa, Japan, August 8, 2017.
- [5] (口頭) Y. Asahi, V. Grandgirard, Y. Idomura, X. Garbet, G. Latu, Y. Sarazin, G. Dif-Pradalier, P. Donnel, and C. Ehrlacher, “Benchmarking of GT5D and GYSELA”, the 3rd US-Japan JIFT Exascale Computing Workshop, Kashiwa, Japan, August 8, 2017.
- [6] (ポスター) S. Maeyama, T.-H. Watanabe, and A. Ishizawa, “Effects of electron-scale turbulence on micro-tearing modes”, 7th Asia Pacific Transport Working Group International Conference, Nagoya, Japan, June 6, 2017.
- [7] (ポスター) Y. Asahi, V. Grandgirard, Y. Idomura, X. Garbet, G. Latu, Y. Sarazin, G. Dif-Pradalier, P. Donnel, C. Ehrlacher, “Experience with GYSELA & Accelerators”, EoCoE workshop F2F meeting, 29-30 November, Toulouse, France.

(4) 国内会議発表

- [8] (口頭, 招待講演) 前山伸也, “マイクロティアリングモードが乱流輸送に与える影響”, 第 23 回 NEXT 研究会, 京都, 2018 年 3 月 1 日.

- [9] (口頭) 前山伸也, 國成希浩, 渡邊智彦,
“Fourier-Laguerre 展開による磁化プラズ
マ乱流中の位相空間カスケードの解析”, 第
73 回日本物理学会年次大会, 東京理科大学,
2018 年 3 月 23 日.
- [10] (口頭) 前山伸也, “Cross-scale
interactions between electron and ion scale
plasma turbulence via sub-ion-scale
structures”, 平成 29 年度閉じ込め・輸送研
究会, 核融合研, 2017 年 12 月 14 日.
- [11] (口頭) 前山伸也, “Effects of electron-
scale turbulence in magnetic fusion
plasma”, 実験室・宇宙プラズマ研究会「乱流・
輸送・粒子加速」, 名古屋大学, 2017 年 12 月
7 日.
- [12] (ポスター) 前山伸也, 渡邊智彦, 石澤
明宏, “Multi-scale interactions between
electron-temperature-gradient-mode and
micro-tearing-mode turbulence”, Plasma
Conference 2017, 姫路, 2017 年 11 月 23 日.
- (5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)
- [13] 前山伸也, 第 12 回日本物理学会若手奨励
賞 (2018 年 3 月).