

jh190004-MDJ

Whole-volume gyrokinetic simulation of magnetic fusion plasmas with in-situ data processing

森高 外征雄（核融合科学研究所）

概要

環境負荷が小さく安全性が高い次世代エネルギー源として注目されている核融合発電システムの実現に向け、磁場閉じ込め核融合炉の全系（炉心・周辺領域）を対象とした運動論的プラズマシミュレーションコードの開発と核融合実験炉「大型ヘリカル装置（LHD）」への応用を進めている。核融合炉の全系シミュレーションを行うためには、複雑な装置形状を取り入れるとともに非常に大きな計算資源が必要となる。本研究では、計算コード開発として（1）大型並列計算機における大規模データ処理の効率化と、それを利用したコード間結合シミュレーションに向けた検討、（2）ヘリカル型核融合炉が持つ複雑な三次元磁場形状に適合した非構造格子系の構築と、それに対応した新規計算スキームの開発を実施した。また、応用研究としては、（3）LHDにおける水素同位体プラズマの乱流輸送現象の解析に開発した計算コードを応用し、径電場が水素同位体プラズマにおけるイオン温度勾配不安定性と熱輸送にもたらす効果を明らかにした。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

自然科学研究機構・核融合科学研究所（核融合研）、アメリカ・オークリッジ国立研究所（ORNL）、アメリカ・プリンストンプラズマ物理研究所（PPPL）、国立研究開発法人・量子科学技術研究開発機構（QST）、東京工業大学の研究者が参加する共同研究であり、主に東京工業大学の大規模計算資源を利用する。

(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

(3) 参加研究者の役割分担

森高外征雄（核融合研）：総括・大型ヘリカル装置への応用

Jong Choi、Scott Klasky (ORNL)：大規模データI/Oライブラリ「ADIOS」の開発と計算コードへの応用

Eduardo D’Azevedo (ORNL)、Aaron Scheinberg (PPPL)、Choong-Seock Chang

(PPPL)：コード開発と最適化

青木尊之（東工大）：TSUBAME3.0での計算実行支援

井戸村泰宏（QST）、石黒静児（核融合研）：核融合実験炉における問題設定

2. 研究の目的と意義

核融合反応を用いた発電システムは、二酸化炭素や窒素酸化物の排出に伴う環境負荷が小さく、海水中から採取できる豊富な燃料から莫大なエネルギーが取り出すことができるため、持続可能な次世代のエネルギー源として注目されている。しかし、核融合反応を継続的に起こすためには、燃料となる水素同位体ガスを一億度を超える高温プラズマの状態で維持する必要があり、そのための核融合炉の開発は発展途上である。本研究では、その候補の一つである磁場閉じ込め核融合炉内部のプラズマを高精度に再現する計算コードを開発し、さらに核融合科学研究所の実験炉「大型ヘリカル装置（LHD）」に应用することを目的とし

ている。

磁場閉じ込め核融合炉は、外部コイルによって生成されるトーラス状の閉じた磁力線によって高温プラズマを保持する装置である。核融合炉内部のプラズマの振る舞いを詳細に調べるためには、複雑な磁場中の荷電粒子の運動や二体衝突に加え、電磁場の揺動を介した集団運動を扱う運動論シミュレーションが必要である。荷電粒子（イオン）が行うジャイロ運動の特徴スケールが数mmオーダーであることから、数メートル～数十メートル程度の大きさを持つ核融合炉全系規模のシミュレーションには高い空間解像度を要する。さらに、運動論シミュレーションでは、荷電粒子の速度分布関数を空間上の各点で直接扱うため、非常に大きな計算規模を持つシミュレーションが想定される。

X-point Gyrokinetic Code (XGC)は、軸対称な構造を持つトカマク型核融合炉の全系シミュレーションのために、プリンストンプラズマ物理研究所を中心に開発されてきた運動論プラズマシミュレーションコードである。本コードでは、核融合炉の詳細な形状を考慮した非構造格子と、荷電粒子のジャイロ運動を模擬した計算粒子をParticle-in-Cell法によって結合している。核融合炉の炉壁近傍（周辺領域）まで含めたシミュレーションを行うことができるため、従来の運動論シミュレーションで解析されてきたトーラス磁場内部へのプラズマ閉じ込め性能だけでなく、核融合炉の耐久性を評価し、より具体的な核融合炉の設計に貢献することが期待されている。XGCは主に現在建設中である世界最大のトカマク型核融合炉「ITER」に応用されている。オークリッジ国立研究所「TITAN」などの最先端の大型計算機でシミュレーションを実施されてきたが、ITERの場合、一つのパラメータに対して数日間、計算機全体を占有する必要があるため、広範な設計・実験条件での検証を行う状況には至っていない。

本研究では、二つの観点からXGCの開発を進展させ、様々な大型核融合実験装置を

対象とした効率的なシミュレーションを進める。一つは、大型計算のボトルネックとなるデータI/Oの効率化である。ITERの計算では、計算粒子のチェックポイントデータを中心にペタバイト級のデータが出力される。「ADIOS (ADaptive Input / Output System)」ライブラリを使い、SSD/NVMeによる高速な一時ストレージ階層を持つ最新の並列ファイルシステムへの最適化を行う。ADIOSは、シミュレーションと同時にメモリ内でデータの圧縮や再配置を行うことで、高速な並列データI/Oを行うフレームワークを提供する。また、ADIOSによるデータマネジメントを活用し、異なるシミュレーション手法を連結する際のフレームワークの構築も検討されている。

もう一つの観点は、非軸対象な磁場構造を持つヘリカル（ステラレータ）型核融合炉への応用である。核融合科学研究所の大型ヘリカル装置では、らせん状の外部コイルを使うことで、プラズマの閉じ込めに必要なねじれたトーラス磁場を安定して生成している。ヘリカル型核融合炉では、軸対象性が失われるとともに、炉壁近傍では磁力線が複雑に絡み合った構造が形成されるため、単純なトーラス磁場を仮定した従来のXGCを任意の三次元磁場形状に一般化する必要がある。

3. 当拠点公募型研究として実施した意義

XGCの大型ヘリカル装置への適用は、日米共同研究としてスタートし、ヘリカル型核融合炉特有の部分は主に日本で進められてきた。アメリカ側はTITANやSummitなどGPUを使った計算機が主力になっているのに対し、日本側の開発は核融合科学研究所のプラズマシミュレータ（富士通FX100）上で行われてきた。日米双方のコード開発を組み合わせるために、共通したプラットフォームを確保することは重要である。東京工業大学のTSUBAME3.0は、Summitで導入されたものと類似したSSD/NVMeによる高速データ領域を持つ大型GPU計算機であ

り、共通したプラットフォームとして適切である。また、ヘリカル型核融合炉は、国内の大型ヘリカル装置のほか、近年ドイツで実験が開始されたWendelstein 7-Xなどがあり、日本側で開発した計算コードをGPUに対応させていくことは、今後の国際共同研究を発展させる上で重要である。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

4-1. データI/Oマネジメントとアプリケーションの結合

XGCコードをADIOSやその他の関連ライブラリと共に東京工業大学のTSUBAME3に移植した。TSUBAME3には、SSD/NVMeを使った中間的なストレージ階層がBeeGFSに基づいて実装され、計算ノードから高速なアクセスが可能になっている。SSD/NVMeを用いた一時ファイル領域は、Summit（オークリッジ国立研究所）やCori（国立エネルギー研究科学計算センター）、Theta（アルゴンヌ国立研究所）といったアメリカの最新スーパーコンピュータでも実装が始まっており、これらを活用することはI/O最適化に向けた重要な課題である。移植したXGCの動作検証と性能評価を行った。I/O性能については、ノードあたり1.1GBのデータ転送を行うweak scalingにより最大64ノードで評価した。その結果、並列ファイルシステム（Lustre）ではノード数に応じて転送時間が増加するのに対して、SSDではノード数に依存せず小さい転送時間に収まっていることが確認された。スループットはLustreの場合に比べて最大6倍程度であり、ThetaのSSDファイル階層で計測されたものと同等となった。

4-2. ヘリカル型核融合炉への拡張

XGCの非軸対象系への拡張を開始した。VMECによって生成した3次元磁場平衡デー

タに対するインターフェースを作成し、3次元スプライン補間を実装し、ジャイロ運動論に基づく運動方程式にトーラス方向の空間微分項を追加することで、この磁場平衡中の粒子軌道追跡を可能にした。大型ヘリカル装置の磁場平衡を用い、トーラス方向に旋回する粒子および特定の位置にトラップされる粒子、カオス軌道を取る粒子など、基本的な粒子運動が再現されることを確認した。さらに、揺動静電場を表すための非構造三角格子系を、大型ヘリカル装置の炉心領域を対象に生成した。生成した格子は、平衡磁場の非軸対称性によりトーラス断面ごとに異なる形状を持つが、磁気座標系の離散化に基づいて格子点位置を定義することで、トーラス方向に磁力線を追跡するように格子点が配置する。これにより、粒子-格子間の補間で生じる数値拡散を低減することができる。

粒子軌道追跡と、非構造格子上での揺動静電場の計算、粒子-格子間の補間を組み合わせ、大型ヘリカル装置炉心領域の基礎的なプラズマ集団現象を対象としたベンチマークテストを実施した。GAM振動や新古典輸送に関する基礎的現象を再現し、既存の計算コードと比較して妥当性を確認した。これらにより、ヘリカル核融合炉全系での粒子軌道シミュレーションと、炉心領域での運動論的プラズマシミュレーションの可能になってきている。

5. 今年度の研究成果の詳細

5-1. データI/Oマネジメントとアプリケーションの結合

メモリや高速ファイルストレージ内でのデータ処理を最適化することにより、異なる計算スキームを持つアプリケーションをリアルタイムに結合したシミュレーションが可能になる。核融合プラズマのシミュレーションの場合、例えばトーラス磁場内部の炉心領域と炉壁近傍の周辺領域それぞれに最適化したシミュレーションを同時に行い、それらの結果を共有しながら時間発展

させていくことで、炉心-周辺領域を含む核融合炉全体のプラズマダイナミクスを調べることができる。炉心領域ではトーラス磁場に高温プラズマが閉じ込められるため、熱平衡状態に近い無衝突プラズマを仮定することができる。そのため、熱平衡分布からのずれのみを扱うことで粒子ノイズと計算コストを低減するdelta-f法が有効である。一方、周辺領域ではプラズマが直接炉壁に接触するため、プラズマの非平衡性が強くなる。この場合、荷電粒子の速度分布そのものを扱い計算コストの大きいfull-f法が必要である。

delta-f法およびfull-f法を用いた2つのバージョンのXGCを結合したシミュレーションを行うためのフレームワークをADIOSを用いて構築した。ADIOSでは、メモリ同士のノード間通信、SSD/NVMe領域、並列ファイルシステムの3階層で高効率なデータ/ファイル転送が可能である。また、2つのアプリケーションへのリソースの割り当てについては、ノード単位での割り当てと、ノードごとのCPU/GPUの割り当てが考えられる。これらの手法を組み合わせることができるようなフレームワークを実装した。計算性能の比較では、ノードごとのリソースの割り当てと、メモリ間のデータ通信を中心にしたアプリケーションの結合がもっとも高性能になることが示唆された。

5-2. ヘリカル型核融合炉への拡張

前年度までに開発したヘリカル核融合炉向けのコードを用い、大型ヘリカル装置における乱流輸送解析を行った。今年度は、核融合炉内のプラズマ温度勾配によって不安定化するイオン温度勾配モード (ITG) に着目した。ITGモードの性質は、大型ヘリカル装置の磁場平衡に対してはよく調べられているが、トーラス小半径方向の径電場が存在する場合については、明確になっていない。このような径電場は、小半径方向の新古典輸送に伴って生成し、ヘリカル型核融

合炉で特に顕著になる。これまでは独立したシミュレーションモデルで扱われてきたプラズマ不安定性による乱流輸送と新古典輸送が共存する系を基礎づける問題として、径電場がITGの線形成長とそれによる熱輸送にもたらす影響について、様々な水素同位体 (軽水素、重水素、三重水素) プラズマに対して調べた。径電場が存在しない場合は、ITGの時空間スケール (主要モードの成長率や波数) や準線形解析にもとづく熱フラックスは、水素同位体イオンの熱速度やジャイロ半径で特徴付けられ、従来の理論解析とよく一致する結果が得られた。一方、径電場が存在する場合はトーラス断面を旋回するExBドリフト運動により、ITGモードの構造が大きく変化し、特にイオン質量に依存した長波長化が観測された。その結果、従来予測されていたイオン質量に応じた熱フラックスの増加 (閉じ込めの悪化) 傾向が、径電場の存在によって低減される可能性が示唆された。

前年度までに引き続き、乱れた磁場構造を持つヘリカル核融合炉の炉壁近傍 (周辺領域) で運動論的プラズマシミュレーションを可能にするためのコード開発を進めた。残る課題は、周辺領域での非構造格子の生成と、セルフコンシステントな静電 (電磁) 揺動の導出である。この領域では、平衡磁場を解析的に表すことができないため、数値的な磁力線トレースに基づいた格子生成手法を開発した。その妥当性を検証するため、トカマク核融合炉 (ITER) の磁場平衡に対し、新手法と従来法の2つの方法で生成した非構造格子を使って得られた静電場がほぼ一致することを確認した。揺動静電 (電磁) 場は有限要素法で計算されるが、場の方程式 (ジャイロ運動論ポアソン方程式) に現れる磁力線 (磁気面) 平均項により、係数行列が密行列となる。このため、平均項を除く部分を前処理付きCG法で計算し、その結果を平均項にフィードバックさせることを収束するまで反復させることで解を求めている。トーラス平均操作による方程式の簡約化を行うことができ

ないヘリカル核融合炉の磁場配位では、多数の反復（典型的には数1000回以上）が必要である。これに伴う計算時間の増大を抑えるため、磁力線あるいは磁気面ごとに定義された基底関数に対する収束解をシミュレーションの前段階で求めておき、その線形和を各時間ステップでの反復計算の初期解として用いるスキームを開発した。これにより、時間ステップあたりの反復計算を3回程度に低減することができ、場の計算に必要な計算コストは、粒子軌道追跡に必要なものに比べて十分小さいものに抑えられる。本手法で得られた揺動静電場が、磁力線（磁気面）平均項を含めてジャイロ運動論ポアソン方程式を十分な精度で満たしていることを確認した。

これまでに開発してきたヘリカル核融合炉向けのXGCコードをGPU計算機を含む幅広い計算環境に対応させるため、kokkos / Cabanaライブラリの導入を開始した。本ライブラリは、可搬性の高い粒子コードを実現するためのフレームワークを提供し、アメリカ側の計算コードで導入が進められている。また、計算機環境に合わせて最内ループなども調整できる。まず、粒子軌道追跡の部分から、日米で開発してきたコードの統合を進めている。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

ヘリカル核融合炉の全系運動論シミュレーションを目指したこれまでのコード開発により、大型ヘリカル装置の炉心領域のプラズマシミュレーションが可能になり、さらに周辺領域への適用に向けた開発を継続した。

大型ヘリカル装置への応用として、ベンチマーク計算として実施した新古典輸送やGAM振動のシミュレーションに加えて、径電場の元でのイオン温度勾配不安定性（ITG）の解析を行った。ITGによって生じる熱輸送におけるイオン質量の影響、すなわち水素同位体効果について、新しい知見が得られた。大型ヘリカル装置における物

理解析については、今後、様々なプラズマの温度・密度や磁場平衡に対して同様のシミュレーションを実施し、これまでに得られた同位体効果の普遍性を調べ、閉じ込め性能を向上するための条件を模索する。中・長期的には、新古典輸送と乱流輸送の両方を自己無撞着に含めた非線形シミュレーションにより、両輸送メカニズムの相互作用について明らかにする計画である。また、本計算コードはWendelstein-7Xなど世界各国のヘリカル型核融合炉にも応用されるようになっている。

ヘリカル型核融合炉の周辺領域への適用について、これまでに可能となっていた粒子軌道追跡に加え、揺動静電（電磁）場の計算を行うための計算スキーム開発を進めた。今年度は、任意の磁場構造に対応した非構造格子の生成手法や、非軸対象系におけるジャイロ運動論ポアソン方程式の効率的な計算手法を開発した。これらにより、周辺領域を含むプラズマシミュレーションに一定の目処が立ったと考えられる。周辺領域へのジャイロ運動論の適応例はまだ存在しないため、大型ヘリカル装置の周辺プラズマ計測やプラズマ流体シミュレーションとどのように比較していくかについて検討する。

複数のメモリ・ストレージ階層を持つ並列GPU計算機を対象に、異なるアプリケーションを結合したシミュレーションを行うためのフレームワークを開発した。ここでは、核融合炉内を空間的に分割し、炉心領域では低コストなdelta-f法、周辺領域では高コストなfull-f法に基づくジャイロ運動論シミュレーションを結合している。ADIOSライブラリを用い、2つのアプリケーション間の情報交換や計算リソースの割り当てについて、様々な方法を検討しその性能を比較した。このようなアプリケーション間の結合シミュレーションは、現状ではアメリカ側で研究しているITER（トカマク核融合炉）を主な対象としている。日米間で開発してきたそれぞれの最新バージョンの統合

を進め、大型ヘリカル装置などのヘリカル型核融合炉でもこのような手法を用いることができるようになることを目指している。

ヘリカル核融合炉への拡張とデータI/Oの最適化の二つの観点から、2年間研究を進めてきたが、基礎的なコード開発が進むにつれて、応用的なテーマも広がってきており、順調に研究が立ち上がってきていると考えている。

7. 研究業績一覧（発表予定も含む）

(1) 学術論文（査読あり）

Toseo Moritaka, Robert Hager, Michael Cole, Samuel Lazerson, Choong-Seock Chang, Seung-Hoe Ku, Seikichi Matsuoka, Shinsuke Satake and Seiji Ishiguro, "Development of a Gyrokinetic Particle-in-Cell Code for Whole-Volume Modeling of Stellarators", *Plasma*, 2, 179-200 (2019).

Cole, M.D.J., Moritaka, T. Hager, R. Dominski, J. Ku, S. Chang, C.S., "Nonlinear global gyrokinetic delta-f turbulence simulations in a quasi-axisymmetric stellarator". *Physics of Plasmas*, 27, 044501 (2020).

Cole, M.D.J., Hager, R., Moritaka, T., Dominski, J., Kleiber, R., Ku, S., Lazerson, S., Riemann, J., Chang, C.S. "Verification of the global gyrokinetic stellarator code XGC-S for linear ion temperature gradient driven modes". *Physics of Plasmas*, 26, 082501 (2019).

Jong Youl Choi, Jeremy Logan, Kshitij Mehta et al, "A Co-Design Study Of Fusion Whole Device Modeling Using Code Coupling", *IEEE/ACM 5th International Workshop on Data Analysis and Reduction for Big Scientific Data (DRBSD-5)*. pp. 35-41, doi:10.1109/DRBSD-549595.2019.00011. 2019.

(2) 国際会議プロシーディングス（査読あり）

Jong Youl Choi, Jeremy Logan, Kshitij Mehta et al, "A Co-Design Study Of Fusion Whole Device Modeling Using Code Coupling", *IEEE/ACM 5th International Workshop on Data Analysis and Reduction for Big Scientific Data (DRBSD-5)*. pp. 35-41, doi:10.1109/DRBSD-549595.2019.00011. 2019.

Moritaka, T. Hager R. Cole, M.D.J. Laserzon, S. Satake, S. Chang, C-S., Ku, S. Matsuoka, S. Ishiguro, S. "Gyrokinetic Modelling with an Extended Magnetic Equilibrium Including the Edge Region of Large Helical Device", *Proceedings of the 27th IAEA Fusion Energy Conference, Gandhinagar, India, 22-27 October 2018*.

(3) 国際会議発表（査読なし）

Moritaka, T. Hager R. Cole, M.D.J. Laserzon, S. Ku, S., Chang, C-S. Satakem S. Matsuoka, S. Ishiguro, S., "Recent progress toward whole-volume gyrokinetic modeling of stellarators", *14th Japan-Korea Workshop on "Modeling and Simulation of Magnetic Fusion Plasmas"*, Fukuoka Japan, June 2019.

Moritaka, T. Hager, R. Cole, M.D.J. Lazerson, S. Ku, S. Chang, C-S. Matsuoka, S. Satake, S. Nunami, M. Ishiguro, S. "Unstructured Mesh and its Verification Tests for Whole-volume Gyrokinetic Modeling of Stellarators", *22nd International Stellarator and Heliotron workshop, Madison USA, September 2019*.

Moritaka, T. "Development of XGC particle code for LHD", *Joint US-Japan Workshop on PostK-ECP Collaboration and JIFT Exascale Computing Collaboration, Kobe Japan, October 2019*.

Moritaka, T. Cole, M.D.J. Hager, R. Lazerson, S. Ku, S. Chang, C-S. Nunami, M. Satake, S. Matsuoka, Sugama, S. Ishiguro, S. "ITG mode analysis with radial electric field in helical configurations using XGC-S", *3rd LHD workshop, Toki Japan, January 2020*.

Choi, Jong Youl, et al. "Coupling exascale multiphysics applications: Methods and lessons learned." 2018 IEEE 14th International Conference on e-Science (e-Science). Amsterdam, Netherlands, 2018.

Matthew Wolf, Jong Choi, Greg Eisenhauer, et al, "Scalable Performance Awareness for In Situ Scientific Application", San Diego USA, September 2019

- (4) 国内会議発表 (査読なし)
- (5) その他 (特許, プレスリリース, 著書等)