

jh190007-NAH

核融合プラズマ研究のための超並列粒子シミュレーションコード開発とその可視化

大谷 寛明（核融合科学研究所）

概要 磁場閉じ込めプラズマにおいて微視的物理が装置全体に影響を与えるような現象に対して、第一原理からその発生機構の解明や挙動の正確な予測をするため、粒子シミュレーションを基礎としたコード開発・微視的物理のモデリング・シミュレーション結果のその場可視化の研究を進めている。PASMO コードの最適化による計算効率の向上、up3bd コードへのその場可視化ライブラリ VISMO の導入及び粒子吸収境界及び局在化したプロブのシミュレーションモデル化、イオンと電子による完全 2 流体モデルのための MHD コードのリファクタリング、VISMO の四面体格子版の開発及びユーザビリティ向上を行った。物理研究では、磁気再結合におけるイオンの実効的加熱機構の理解が進み、プロブ輸送のみではなくホール輸送における同位体効果の影響を調べた。高速粒子による波動励起では低域混成波とイオンサイクロトロン波の非線形結合によって磁場擾乱の周波数が上昇することを示した。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

核融合科学研究所（核融合研）、兵庫県立大学、神戸大学、京都大学、名古屋大学、情報通信研究機構（情報通信研）、北里大学の複数の研究者が参加する共同研究であり、名古屋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

(3) 参加研究者の役割分担

大谷寛明（核融合研）：総括・粒子コード開発・可視化研究

大野暢亮（兵庫県立大）：可視化の研究・開発

沼波政倫（核融合研）：粒子コードの高速化

宇佐見俊介、樋田美栄子、長谷川裕記（核融合研）：粒子コードの高速化、物理課題研究

三浦英昭（核融合研）、田光江（情報通信研）、

小川智也（北里大）、深沢圭一郎（京大）：流体

シミュレーションとの比較、微視的物理のモデル化

堀内利得（核融合研）、石黒静児（核融合研）：

問題設定、結果の評価

中島 浩（京大）、臼井英之（神戸大）、三宅洋

平（神戸大）：動的負荷分散ライブラリの開発、

実装・活用支援

片桐孝洋（名大）：FX100 での最適化・実行支援

2. 研究の目的と意義

核融合プラズマのシミュレーション研究で用いられる粒子モデルは、膨大な粒子を計算する必要があるため、巨視的な時空間スケールを扱うことが困難である。一方、核融合発電の実現には、コアプラズマの高性能化やその制御とともに、プラズマ中の高速粒子が及ぼす影響の理解や周辺領域プラズマの挙動理解とその制御も必要である。このためには、粒子運動のような微視的な物理を正しく解きながら、粒子と波の相互作用やシース電位と自己無撞着な電流系の計算を行い、さらに、装置全体にわたる巨視的現象を調べる大規模シミュレーションが必要である。他方、ますます規模が大きくなるシミュレーションに対して、その結果の可視化解析をどのように行うかも喫緊の課題である。本研究課題は、高速粒子による波動励起、プロブ現象や磁気再結合のように微視的物理が装置スケールのダイナミクスに影響を与えるような現象

に対して、第一原理からその発生機構の解明や挙動の正確な予測を行い、核融合プラズマの閉じ込め性能改善等へ寄与することを目的とする。そのために、超並列に対応する粒子コードの開発や、巨視的シミュレーションに組み込むため粒子コードで得られた知見からの微視的現象のモデル化研究、計算実行とともに可視化作業を行うその場可視化の研究を行う。また、上記物理現象の解明のため基礎レベルからの研究も推進する。

①粒子シミュレーションコードの研究・開発及び物理課題への応用：超並列に対応した粒子シミュレーションコードの研究・開発を行う。H31 年度は、磁気再結合研究のための PASMO コードのメモリへのランダムアクセスを抑制するためのアルゴリズム開発を進める。ブロブ現象研究のための up3bd コードにその場可視化ライブラリ VISMO を導入する。粒子コードの開発とともに各物理課題の研究も進める。磁気再結合研究では、球状トカマクにおけるイオン加熱のトロイダル磁場依存性の理論化、円環状という特異な速度分布によって発生する微視的不安定性の影響について調べる。周辺領域におけるプラズマ輸送研究では磁力線方向に局在して生成されたフィラメントの時空間ダイナミクスを調べる。高速粒子による波動励起に関する研究では、高速粒子の注入および損失の効果を調べる。

②巨視的シミュレーションに活用するための第一原理に基づく微視的現象のモデル化研究：経験的モデルより予測性の高い巨視的シミュレーションの実現を目指すモデル化研究を進める。H31 年度は、粒子コードとの連携を目指して、電磁流体力学 (MHD) 方程式数値シミュレーションコード MUTSU/MINOS コードを完全 2 流体モデルに変更する。

③大規模粒子データの解析を行う「その場可視化」の研究・開発：大規模シミュレーション結果の可視化解析に関する課題の解決方

法の一つとして、計算実行とともに可視化作業を行う「その場可視化」の研究・開発を行う。H31 年度は四面体格子版のその場可視化ライブラリ VISMO の開発を進める。

3. 当拠点公募型研究として実施した意義

本研究課題は超大規模計算機と超大容量ストレージを有する情報基盤を必要としたグランドチャレンジ的な問題である。また、計算科学分野・計算機科学分野・可視化情報学分野の協調的かつ相補的な研究体制が必要不可欠である。このように幅広い研究分野の研究者を含む研究体制を構築するため、多数の先導的研究者が在籍する JHPCN 公募型共同研究で実施する必要がある。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

粒子シミュレーションコードの研究・開発では、動的負荷分散ライブラリ OhHelp を組み込んだ PASM0 コードの粒子開放系境界条件に対するアルゴリズムの再検討と OhHelp を組み込んだ PASM0 への適用方法の開発を進め、さらに、up3bd コードの磁力線方向 (z 方向) を周期的境界条件、かつ、x 方向の両端を反射境界としたバージョンの開発を進め、その計算精度等の検証を行った。モデル化研究で用いる MUTSU/MINOS コードの機能拡張を行い、SGS モデルの改良及び交換型・テアリング不安定性の遷移現象の 2 次元シミュレーションへの応用を行った。その場可視化研究では粒子可視化機能の拡充を行い、表示する粒子の色・大きさを制御可能とし、また、新たに四面体格子版も開発を行い、等値面、スライス、矢印表示、流線表示を可能とした。

物理課題研究では、縦磁場が存在する場合の磁気再結合における実効的なイオン加熱機構を調べ、加熱機構の磁場成分依存性を明らかにし、東京大学の球状トカマク装置 TS-6 等におけるプラズマ合体実験結果とよく一致することを確認した。周辺領域におけるブ

ラズマ輸送研究では、不純物イオン輸送の様々な物理パラメータ（フィラメントサイズ、イオン温度、不純物イオン質量）に対する依存性を明らかにした。さらに、プロブ伝播における同位体効果について調べ、その結果、イオン質量増加によるシース効果と分極ドリフト効果は打ち消し合うが、粒子旋回運動効果が加わることにより、全体としては伝播速度が減少することを明らかにした。高速粒子による波動励起の研究では、高速粒子を注入し続けるシミュレーションを行い、実験とよく似た、磁場擾乱の周波数上昇を観測した。

5. 今年度の研究成果の詳細

【コード研究・開発】

・PASMO コード：PASMO コードは、磁気再結合研究のため開発された 2 次元あるいは 3 次元の電磁粒子シミュレーションコードである。このコードの特長は、上流から磁場フラックス及びプラズマを流入させることにより、磁気再結合を駆動することができ、また、下流では粒子が自由に出入りできる開放系境界条件を用いていることである。このため、長時間のシミュレーションが可能であることが開発意義である。

3 次元の PASMO の開発では、最も計算効率が低い、粒子位置・速度の更新／電流密度計算のルーチンについて、SIMD 化やソフトウェアパイプラインが有効になるようなアルゴリズム開発を進めた。昨年度、スレッド単位に粒子配列を分割していたが ($P(c, i, th)$)、その分割をやめ ($P(c, i)$)、ソーティングを入れるなどの最適化を行った。今年度は、自動並列化されないルーチン（境界を越えた粒子を探索処理するルーチン）を、OpenMP でスレッド並列されるように変更した。また、バケットソーティングのルーチンでは、スレッドの次元を持った local 変数を作成して OpenMP でスレッド並列化されるようにした。しかし、ソーティング作業はコストが高いため、毎ス

テップ実施するのは得策ではない。そこで、Sort 処理の実行前の 1Step あたりの実行時間と、Sort 処理実行後の 1Step あたりの実行時間を比較して、実行時間の比率が設定パラメータ `sortrate` を超えた場合、Sort の処理間隔を 1Step 分短くするという、Sort 処理を実行する間隔を最適化する機能を追加した。以上の最適化を加えることによって、実行時間がオリジナルに比べ 53.9% まで改善することができた。

・up3bd コード：up3bd コードの特長としては、①PASMO コードと同じく 3 次元空間における多数のプラズマ粒子（領域分割型分散並列により数億個以上の粒子を扱うことが可能）の運動と、それと自己無撞着な電場の時間発展を解けること、②x 軸方向の片側の境界、および、z 軸方向の両側の境界を、プラズマ粒子が吸収される境界、かつ、静電ポテンシャルが 0 となる（すなわち接地）境界とすることによって、磁場閉じ込めプラズマ周辺部の開いた磁力線領域（スクレイプ・オフ・レイヤー）を模擬していること、③静電コードであるため、磁場の時間発展を解く必要がなく（ただし、ベータ値（プラズマ圧力と磁場圧力の比）が十分小さい状況に限られる）、電磁コードに比して計算資源を節約できること、などが挙げられる。そして、スクレイプ・オフ・レイヤーのプラズマ輸送現象における微視的ダイナミクスを解明することが up3bd コードの開発意義である。

今年度の up3bd の開発では、VISMO の実装を行った。また、up3bd の粒子吸収境界版（z 軸方向の両側の境界を粒子吸収境界としたバージョン）の開発・検証作業を行い、良好な結果を得た。これにより、超大規模計算を要する実際の物理課題に取り組む態勢が整った。粒子軌道データ保存ルーチンの開発については現在進行中であるが、一方、これまで、初期の密度分布が z 方向に一様なプロブの計算しかできなかった up3bd に対して、z 方向

に局在するプロブも初期設定可能な初期粒子配置ルーチンを開発・実装した。

【モデル化研究】

・核融合科学研究所の大型ヘリカル装置 (LHD) 内部に閉じ込められた高温プラズマの不安定性をシミュレーションするための電磁流体力学 (MHD) 方程式数値シミュレーションコード MUTSU/MINOS コードの開発を進めている。このコードはジャイロ粘性効果を含む拡張 MHD シミュレーションコードであり、格子解像度以下のサブグリッドスケール (SGS) が格子解像度以上のスケール (グリッドスケール) へ与える影響を表す SGS モデルを実装した、Large Eddy Simulation (LES) コードである。このように、格子解像度以下の影響も取り入れて装置全体の不安定性をシミュレーションできるようにすることがこのコード開発の意義である。

MUTSU/MINOS の開発では、これまでの拡張 MHD モデルによるシミュレーションから、イオンと電子による完全 2 流体シミュレーションにモデルを変更するため、これに先立つリファクタリングの作業に入った。これまでのコードでは、当初使用を想定していた Adaptive Mesh Refinement 機能のため、記述が複雑になっていた。これを単純化し、比較的容易に性能を向上できるようにリファクタリングや、一部の汎用差分サブルーチンの改良を進めた。2019 年度末時点で、リファクタリング作業をほぼ終え、リファクタリング前のシミュレーション結果を再現することを目指した微修正を続けている。

【その場可視化の研究・開発】

・その場可視化では、シミュレーションの実行時に生データではなく可視化した画像を出力する。このため視点や内面レベルなどの可視化パラメータが固定されてしまい、異なる視点から観察するなどの対話的な操作はできない。我々はその場可視化した結果を画像のみでなく点群として保存する機能を、独

自開発しているその場可視化ライブラリ VISMO に実装した。またその点群を表示するための専用ビューアを開発した。この点群を使って画像情報を保存・表示できる点がこのライブラリの特長であり、対話的にシミュレーションデータを描画できることがこのライブラリの実装意義である。

VISMO 四面体格子版の開発は、等値面表示、スライス表示、ポリウムレンダリング表示、矢印表示の実装が終了した。従来の VISMO と同様の CONFIG ファイルで可視化のパラメータを設定でき、MPI および OpenMP での並列化を終えた。また、カーテシアン版の VISMO において、ユーザビリティを向上させるため、各 MPI プロセスが担当する領域の位置関係の入力を不要とした。

【物理課題の研究成果】

・磁気再結合研究では、円環状速度分布形成によるイオン実効的加熱に対する 2 種の磁場依存性のうち、トロイダル磁場依存性について、その基礎となる機構を自ら考案することによって定性的に説明する理論を構築することに成功した。一方、シミュレーションでは、さらに特異的な速度分布構造を何種か見出し、円環構造はこれら特異構造に属する特殊形と位置づけることに成功した。その中で、特異的な速度分布のある一種が作られると、イオン実効温度を大きく引き上げる効果があることを突き止めた。

・up3bd を用いたプラズマ輸送の物理研究では、プロブ輸送だけではなくホール輸送における同位体効果、及び、これらの輸送における同位体効果に接続長が与える影響について調べた。また、今年度後半は、改良された初期粒子配置ルーチンを実装した up3bd を用いて、磁力線方向に局在して生成されたフィラメントの時空間ダイナミクスを調べるための多くのシミュレーションを実行した。

・高速粒子による波動励起の研究では、昨年度に示した磁場擾乱の周波数上昇について、

そのメカニズムを調べ、低域混成波とイオンサイクロトロン波の非線形結合によるものであることを明らかにした。さらに、コードを拡張し、高速粒子の損失の効果を取り入れることが可能になった。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

【コード研究・開発】

・動的負荷分散ライブラリ OhHelp を導入した PASMO にも上記の最適化を行ったところ、実行効率が下がってしまった。この原因究明及び開発とともに、OhHelp を組み込んでいない PASMO を使ったプロダクトランを来年度以降に行う予定である。

・up3bd の開発では、VISMO の実装、粒子吸収境界版の開発・検証、初期粒子配置ルーチンの改良を実施し、当初計画に対する進捗率は、全体として 80%弱となっている。今後は、今年度に引き続き粒子軌道データ保存ルーチンの開発を進めるとともに、終端板への磁場の入射角度が斜めになる系にも対応するようにコードの改良を進める。

【モデル化研究】

MUTSU/MINOS の開発では、今年度中にリファクタリング作業およびいくつかの改良をほぼ終え、これまでのシミュレーション結果を再現するための修正作業を行っている。2020 年度には完全 2 流体部分の開発開始を目指す。これと並行し、現行の MUTSU/MINOS コードを用いて、ジャイロ粘性などの拡張 MHD 効果がエッジプラズマの交換型・テアリング不安定性の遷移現象に与える影響の調査を進める。

【その場可視化の研究・開発】

四面体格子版の VISMO を開発した。また、カーテシアン版において各 MPI プロセスの担当する領域の位置関係の入力を不要にして、ユーザビリティの向上を図った。計画通りに研究開発を進めることができた。

【物理課題の成果】

・磁気再結合研究では、イオン加熱機構の磁場依存性の理論構築はほぼ計画通りに進めることができた。来年度以降は、トロイダル磁場依存性をより定量的に説明できる理論の構築および実証に取り組む。シミュレーションでは、今年度に、より一般的な特異的速度分布を何種も発見したため、その形成機構、それらが加熱に及ぼす効果の探求を先に取り組んだ。計画していた円環状速度分布が駆動する不安定性の探求については、そのような一般的な特異的速度分布による効果も含めて、来年度以降行う予定である。

・プラズマ輸送物理研究では、ホール輸送における同位体効果について調べるとともに、磁力線方向に局在したフィラメントの時空間ダイナミクスなどについて研究を進めた。当初計画に対する進捗率は、全体として 60%程度となっており、今後は、磁力線方向ダイナミクスの更なる解析を進めるとともに、フィラメント発生過程やフィラメントの密度勾配に起因する不安定性などについて研究を行う。

・高速粒子による波動励起の研究では、昨年度の成果を発展させて、高速粒子の注入に伴う周波数上昇の機構を解明した。高速粒子の損失については、その効果を取り入れることが可能になったが、物理を調べるまでには至っていない。そのため、進捗状況は 60%程度である。今後は、これらの効果の詳細を調べるとともに、実験との比較を行うために、パラメータラン実施する。

今年度の計画に対する自己評価として、コードの開発と物理課題の研究のそれぞれで計算機を活用して研究成果を挙げることができ、査読あり学術論文に 5 本の論文を掲載することができた。また、査読なし国際会議に 8 件、査読なし国内会議に 12 件、その他で 1 件の発表を行うことができた。すべての研究・開発において、計画を十分に達成することができた。

7. 研究業績一覧（発表予定も含む）

(1) 学術論文（査読あり）

- ・ S. Usami, R. Horiuchi, H. Ohtani:
‘Horn-Shaped Structure Attached to the Ring-Shaped Ion Velocity Distribution during Magnetic Reconnection with a Guide Field’, Plasma Fusion Res. 14 (2019) 3401137 (7pages).
- ・ S. Usami, R. Horiuchi, H. Ohtani, Y. Ono, M. Inomoto, and H. Tanabe:
‘Dependence of the pickup-like ion effective heating on the poloidal and toroidal magnetic fields during magnetic reconnection’, Phys. Plasmas, 26 (2019) 102103 (11pages).
- ・ H. Hasegawa, S. Ishiguro: ‘Impurity ion transport by filamentary plasma structures’, Nucl. Mater. Energy 19 (2019) 473–478.
- ・ H. Hasegawa, S. Ishiguro: ‘Three-dimensional effect of particle motion on plasma filament dynamics’, Phys. Plasmas 26 (2019) 062104 (5pages).
- ・ M. Toida, H. Igami, K. Saito, T. Akiyama, S. Kamio, and R. Seki:
‘Simulation Study of Energetic Ion Driven Instabilities near the Lower Hybrid Resonance Frequency in a Plasma with Increasing Density’, Plasma Fusion Res. 14 (2019) 3401112 (7pages).

(2) 国際会議プロシーディングス（査読あり）

(3) 国際会議発表（査読なし）

- ・ H. Ohtani, R. Horiuchi, S. Usami:
‘Optimization of electromagnetic particle simulation code PASMO’,

The 28th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (ITC28), November 5–8, 2019, Toki, Japan

- ・ S. Usami, R. Horiuchi, H. Ohtani:
‘Formation of anomalous velocity distribution based on the pickup-like ion motions during magnetic reconnection’, Hinode-13/IPELS 2019 (the 13-th symposium of the Hinode mission and the 15-th symposium of IPELS), September 2–6, 2019, Tokyo, Japan.（招待講演）

- ・ S. Usami, R. Horiuchi, H. Ohtani:
‘Anomalous Velocity Distributions Formed by Pick-Up-Like Protons in Magnetic Reconnection’, 61st Annual Meeting of Division of Plasma Physics, American Physical Society, October 21–25, 2019, Fort Lauderdale, USA.

- ・ S. Usami, R. Horiuchi, H. Ohtani:
‘Strange Shapes of Ion Velocity Distribution during Magnetic Reconnection in the Presence of a Guide Field’, The 28th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (ITC28), November 5–8, 2019, Toki, Japan.

- ・ H. Hasegawa, S. Ishiguro: ‘Study of Non-diffusive Radial Transport in Boundary Layer Plasma with Particle Simulation’, 14th Japan-Korea Workshop on Modeling and Simulation of Magnetic Fusion Plasmas, June 27–28, 2019, RIAM, Kyushu Univ., Kasuga, Fukuoka, Japan.

- ・ H. Hasegawa, H. Tanaka, S. Ishiguro:
‘Study of Detached Plasma Dynamics with Coupling Model between

Magnetized Plasmas Characterized by Different Current Mechanisms', 17th International Workshop on Plasma Edge Theory in Fusion Devices (PET17), August 19–21, 2019, UCSD, California, USA.

・H. Hasegawa, S. Ishiguro: 'Isotope Effect on Plasma Coherent Structure Propagation', The 28th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (ITC28), November 5–8, 2019, Toki, Gifu, Japan.

・Trang Le, Y. Suzuki, H. Hasegawa, S. Ishiguro: 'Particle Simulation of Divertor Plasma with Electrical Biasing', The 28th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (ITC28), November 5–8, 2019, Toki, Gifu, Japan

(4) 国内会議発表 (査読なし)

・大谷寛明、堀内利得、宇佐見俊介: 「分散並列計算機にむけた領域分割電磁粒子コードの最適化」、第 36 回 プラズマ・核融合学会 年会、2019. 11. 29–12. 2、中部大学春日井キャンパス

・三浦英昭、大野暢亮、大谷寛明: 「In-situ 可視化ライブラリ'vismo'を用いた一様等方性乱流の構造解析」、第 33 回数値流体力学シンポジウム、2019 年 11 月 27 日–29 日、北海道大学

・大谷寛明: 「核融合科学研究所における可視化研究の紹介」、先進的可視化環境を用いた可視化情報の研究会 (VR2019), 2020 年 1 月 23 日 24 日、核融合研

・三浦英昭、大野暢亮、大谷寛明: 「In-situ 可視化ライブラリ"vismo"を用いた流体シミュレーション可視化解析」、先進的可視化環境を用いた可視化情報の

研究会 (VR2019), 2020 年 1 月 23 日 24 日、核融合研

・三浦英昭、大野暢亮、大谷寛明: 「In-situ 可視化ライブラリ vismo による乱流管状渦構造形成可視化解析」、日本物理学会第 75 回年次大会、2020 年 3 月 16 日–19 日、名古屋大学東山キャンパス

・長谷川裕記、田中宏彦、石黒静児: 「非接触プラズマにおける電流機構の異なる磁化プラズマ結合系モデル」、第 36 回プラズマ・核融合学会年会、2019 年 11 月 29 日–12 月 2 日、中部大学春日井キャンパス。

・M. S. Islam, Y. Nakashima, S. Ishiguro, H. Hasegawa, K. Hoshino, A. Hatayama: 'Study the impact of H gas puffing on the divertor plasma parameters by the LINDA and PIC code', 第 36 回プラズマ・核融合学会年会、2019 年 11 月 29 日–12 月 2 日、中部大学春日井キャンパス。

・長谷川裕記: 「電流機構の異なる磁化プラズマ結合系モデルによる境界領域輸送研究」, 「自然科学における階層と全体」シンポジウム、2020 年 1 月 9 日–10 日、国立天文台三鷹キャンパス。

・長谷川裕記、石黒静児: 「プラズマファイラメントにおける磁力線方向ダイナミクス」、日本物理学会第 75 回年次大会、2020 年 3 月 16 日–19 日、名古屋大学東山キャンパス。

・宇佐見俊介、堀内利得、大谷寛明: 「駆動型磁気リコネクション下流で形成されるイオンの異常速度分布関数」、プラズマシミュレータシンポジウム 2019, 2019 年 9 月 19 日–20 日、核融合科学研究所。

・宇佐見俊介、堀内利得、大谷寛明: 「磁気リコネクション下流における水素イオンの異常速度分布形成」、第 36 回プ

ラズマ・核融合学会年会, 2019 年 11 月
29 日-12 月 2 日, 中部大学春日井キャン
パス

・宇佐見俊介、堀内利得、大谷寛明:「駆
動型磁気リコネクションにおけるピッ
クアップライクなイオン運動と加熱」、
日本物理学会第 75 回年次大会、2020 年
3 月 16 日-19 日、名古屋大学東山キャン
パス

- (5) その他(特許, プレスリリース, 著書等)
- ・長谷川裕記:「核融合実現への複合的
アプローチ～シミュレーションとその
拡がり～」, 電気学会東海支部学術講演
会, 2019 年 12 月 12 日, 名古屋大学東
山キャンパス.