

jh240008

プラズマ学際科学のためのリアル粒子シミュレーションの研究開発と応用

大谷寛明（核融合科学研究所）

概要

本研究では、実験・観測に即したリアル粒子シミュレーション技術の高度化を通じて、学際的プラズマ科学の発展を目指した。粒子法に基づく複数のコードを対象に、実験装置のジオメトリや境界条件、素過程モデル（クーロン衝突など）を導入した。また、計算機性能に応じた分散並列化、乱数生成最適化、高速化手法を適用し、大規模シミュレーションの実行を可能にした。応用面では、磁気再結合によるプラズマ加熱機構の解明、非対称スフェロマック緩和構造の解析、磁気島を含むジャイロ運動論的乱流輸送の評価、境界プラズマでのイオン加熱現象、低域混成波および高域混成波の高調波構造生成過程の解明などを実施した。各コードの性能評価や最適化により、並列計算のボトルネック解消や弱スケーリング改善にも取り組んだ。これらの成果は、核融合プラズマ研究のみならず、宇宙・天体プラズマや計測技術の進展にも寄与するものである。

1. 共同研究に関する情報

- (1) 共同利用・共同研究を実施している拠点名
東北大学 サイバーサイエンスセンター
名古屋大学 情報基盤センター
京都大学 学術情報メディアセンター

(2) 課題分野

大規模計算科学課題分野

(3) 参加研究者一覧と役割分担

大谷寛明（核融合研）：総括、粒子コード開発・高速化、可視化研究
宇佐見俊介、長谷川裕記、森高外征雄、樋田美栄子、沼波政倫（核融合研）、小谷翼（京大）：粒子コードの開発・高速化、粒子コードによる物理課題研究
臼井英之、三宅洋平（神戸大）：並列分散計算の開発支援
石黒静児、堀内利得（核融合研）：問題設定・結果の評価
大野暢亮（兵庫県立大）、川原慎太郎

（JAMSTEC）：可視化表現法の研究

三浦英昭（核融合研）、田光江（NICT）、小川智也（北里大学）：流体モデルとの比較
深沢圭一郎（京大）：Camphor3 での最適化・実行支援
片桐孝洋（名大）：TypeI サブシステムでの最適化・実行支援
滝沢寛之（東北大）：A0BA-B での最適化・実行支援

2. 研究の目的と意義

プラズマは宇宙の典型的な物質状態であり、地上から宇宙まで様々な分野で見られ、幅広い時空間スケールの多様な現象をそれぞれの分野で示す。しかし、プラズマパラメータの特徴的なスケールでの規格化等によって共通の現象として議論することができ、共通の理解を得ようとする学際的な研究が進められている。

本研究課題では、学際的な分野であるプラズマ科学を推進するため、「リアル粒子シミュレーション」

ュレーション」コードのための研究・開発を目的とする。この「リアル」とは実験や観測に即したシミュレーションモデルを構築・導入して、

- ・実験や観測など、現実には即した境界条件やジオメトリを含むシミュレーション

- ・イオン・電子質量比を実際の値でシミュレーション

- ・素過程の物理現象を含むシミュレーション

を実行することであり、宇宙から実験までのプラズマ物理現象の研究を推進する。プラズマは膨大な数の荷電粒子の集団から構成される巨視的な系であり、この系を記述する最も原理的なシミュレーションモデルのひとつがプラズマ粒子シミュレーションモデルである。このモデルはプラズマの構成要素である荷電粒子と電磁場を取り扱い、それぞれのダイナミクスを自己無撞着に解くことができるため、粒子運動という微視的なダイナミクスを追うとともに、粒子—波動相互作用や粒子による運動論的效果を解析することができる。しかし、リアル粒子シミュレーション実現には、いくつかの課題がある。(1) プラズマ実験や宇宙のプラズマをシミュレーションするための境界条件や実験装置のジオメトリをそれぞれの状況にフィットさせることが必要不可欠である。(2) メモリ量や計算速度の制限から、実験装置サイズのような巨視的な系全体を計算することが非常に困難である。(3) ラグランジュ的表現の粒子系とオイラー的表現の場との結合系であるため、計算機科学の観点から最適化や並列化には多くの困難が存在する。(4) 素過程の物理モデル（粒子間衝突や電荷交換、イオン再結合など）は、核融合プラズマのプラズマ周辺領域や電離圏におけるシミュレーションで必要となるが、その計算コストは粒子数の2乗に比例するため、そのまま素過程を取り込むのは困難である。

本研究課題では、球状トラスや周辺プラ

ズマのよりリアルなシミュレーションを目指して実験装置のジオメトリ・境界条件の開発を進め、また、シミュレーションコードや素過程モデルの最適化・高速化・並列化を推し進めることで計算の高速化を図る。コードの研究開発とともに、プラズマ物理における微視的ダイナミクスを研究する対象として、磁気再結合現象や周辺プラズマにおけるプラズマ輸送現象、高速粒子が励起する波動現象、ヘリカル系核融合炉に向けたジャイロ運動論研究を取り上げ、本課題で研究・開発したコードをもとに研究を進める。実際のプラズマ現象に研究・開発したコードを適用することで、最適化・高速化・並列化の課題を洗い出し、コードの更なる高度化を図る。また、可視化情報学者の協力を得て、粒子による運動論的效果などを理解するための効果的な可視化表現法の研究も行う。

微視的ダイナミクスの各研究課題が進展すれば、核融合発電実現への大きな寄与が期待される一方、新たな非線形現象の発見やプラズマの新たな計測法の開発につながることを期待され、さらに核融合プラズマ・プラズマ物理にとどまらず、宇宙・天体プラズマなど多くの分野の発展に寄与する。これが本研究の意義である。

3. 当拠点の公募型共同研究として実施した意義

本研究の目的達成には、計算機科学分野と計算科学分野の協調的かつ相補的な研究協力体制のもと、使用する計算機資源の特性に合わせた最適化や高速化、並列化の実装が必要である。最も大規模なシミュレーションを実行する分野の一つがプラズマ科学であり、本研究課題では大規模シミュレーションの実施も目的の一つである。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するため、名古屋大学情報基盤センター及び京都大学学術情報メディアセンター、東北大学サイバーサイエンスセンターの先導

的研究者の協力のもと、幅広い研究分野の研究者を含む研究体制を構築して、コードの研究開発・大規模シミュレーションを実施した。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

コード研究開発で、粒子コードの移植・ベンチマーク、実験に即した状態で模擬するため境界条件開発、核融合炉周辺輸送解析のコード開発を進めた。複数の粒子コード (up3bd, PASMO, PIC-G2R, PAMCADE) の研究開発を通じ、京都大学 Camphor3、東北大学 A0BA-B、名古屋大学 FX1000 といった最新スーパーコンピュータへの移植と動作検証を行い、各環境に応じた移植対応や性能特性の評価を実施した。PAMCADE コードでは Nanbu 法によるクーロン衝突計算に向けた前段として、KMATH_RANDOM ライブラリの環境整備と動作検証を行い、移植課題やコンパイラ依存性に関する知見を得た。さらに、PASMO コードでは、衝突項の計算ルーチンについて、弱スケーリング特性やスレッド並列性を評価し、最適化のための出力処理見直しも試みた。PIC-G2R コードでは境界条件や合体制御機構の改良を通じ、物理モデルの拡張に貢献した。XGC コードでは、自由曲面格子系に対応した線形疎行列ソルバを開発し、磁気島を含む配位へのフラックスラベル導入によって解析機能の拡充を図るなど、多方面にわたりシミュレーション技法の高度化を推進した。

また、磁気再結合現象での速度分布、境界領域プラズマ輸送現象でのイオン加熱、高速粒子による低域混成波とその高調波の波動励起などについて詳細な解析を進めた。磁気再結合や合体加熱、波動励起現象など、多様なプラズマ現象を対象とした研究を展開し、複数の重要な成果を得た。磁気再結合においては、三日月型速度分布の形成に関する従来理論を拡張し、反転磁場がなくても同様の分布が生成されることを示すことで、従来の定説を覆した。さらに、PIC シミュレーション

を用いて、球状トカマク装置内でのプラズマ合体に伴う加熱現象を解析し、圧縮加熱と粘性加熱の時系列的役割分担を明らかにするとともに、リング状速度分布などの実効的加熱機構を発見した。また、高速イオンによる低域混成波の高調波励起について、質量依存性や非線形発展特性を明らかにし、地球磁気圏や核融合プラズマへの応用的知見を得た。さらに、境界領域輸送の研究ではブロブ形成やイオン加速メカニズムの詳細解析を行い、実験との対応に向けた理解の深化を図った。

5. 今年度の研究成果の詳細

up3bd のコード研究開発では、規模がやや大きい計算を複数ケース実行し、各計算機における並列性能（弱スケーリング、強スケーリング）を調べた。その結果、Camphor3 でのスケーリングが最も良好であった。また、小規模計算では性能が高かった A0BA-B では、MPI プロセス数を 32 から 128 に増やした計算を行ったところ（ただし、フラット MPI 並列）、大きな性能低下が見られた。これは、MPI プロセス数が 32 の場合も、128 の場合も、ともに、計算が 1 ノード内に収まるため、128 プロセスとした場合には、1 プロセスあたりのメモリバンド幅やキャッシュメモリが、32 プロセスの場合に比して 4 分の 1 となることから生じていると考えられる。さらに、各計算機における計算でボトルネックとなっているサブルーチンを解析した。その結果、Camphor3 では、場のデータへのランダムアクセスが多いサブルーチンが、A0BA-B では、プロセス間通信が主となるサブルーチンが、そして、FLOW Type I では FFT を呼び出しているサブルーチンが、それぞれ時間を要していることが示唆された。

PASMO のコード研究開発では、昨年度、京都大学 Camphor3、東北大学 A0BA-B への移植作業を終えていたので、粒子間衝突を計算するサブルーチンについて分散並列に対する

依存性の詳細について調べた。粒子間衝突モデルは Takizuka モデルを採用して、電子電子間、イオンイオン間、電子イオン間の衝突を計算にする。衝突は同じ計算セル内にいる粒子同士で行う。本サブルーチンでは、0) セル内粒子の番号および衝突をする粒子のペアの粒子番号を保存する配列を初期化する。1) セル内の粒子番号を配列に保存する。2) 乱数を作成する。3) 分散並列乱数を使っていない場合、生成した乱数を分散並列プロセスごとの乱数にコピーする。4) マックスウェル分布を作成する。5) ペアを乱数によって入れ替え、衝突するペアの粒子番号を配列に保存する。6) 衝突を計算して速度を更新する。オリジナルのコード c0 では5) と6) を計算セル番号による大きな D0 文内で計算する。改変コード c2 では5) と6) を、5) の計算、6) の計算を電子電子間、イオンイオン間、電子イオン間に分けて計算セル番号による大きな D0 文を設けた。c3 は c2 のコードに分散並列に対応した乱数発生器（メルセンヌツイスターに基づく発生器で核融合科学研究所の佐竹真介氏に提供いただいた）を導入した。1 MPI プロセス当たり 16x16x16 グリッド、1 セル当たり 100 粒子、1 MPI プロセス当たり 6 スレッド並列で、弱スケーリングで調べた結果を次の図 1 に示す。

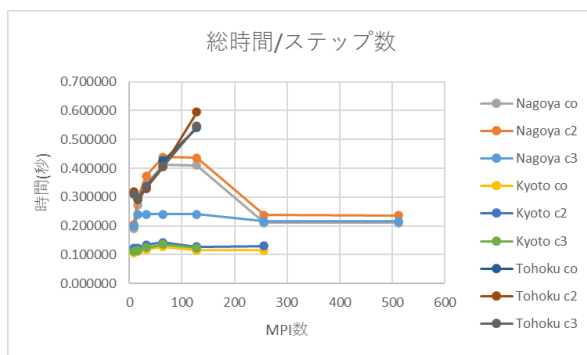


図 1 : 1 ステップ当たりの総計算時間。」

昨年度の報告では FX1000 及び Camphor3 ではよい弱スケーリングを示すと報告したが、今

回は Camphor3 と分散並列乱数を導入した FX1000 でよい弱スケーリングを示した。分散並列乱数を導入していないコードでスケーリングが悪くなったのは、2) 3) 4) での計算時間を計測した結果、これらの計算での弱スケーリングが大きく崩れており、この計算で何かしらのオーバーヘッドが原因ではないかと考えている。図 2 に FX1000 でのペア生成から衝突計算まで 1 ステップ当たりの計算時間をまとめた。c0 では計算セル番号による大きな D0 文内で 5) 6) を計算しているが、c2 と c3 ではペアの配列作成、電子電子間、イオンイオン間、電子イオン間のそれぞれで計算セル番号による D0 文を回している。こうすることで、コンパイルがより最適化しやすくなるのではないかと期待していたが、図 2 に示す通り、分けた方がかえって計算効率が悪くなる結果となった。ただしどの場合もかなりよい弱スケーリングを示していることがわかる。

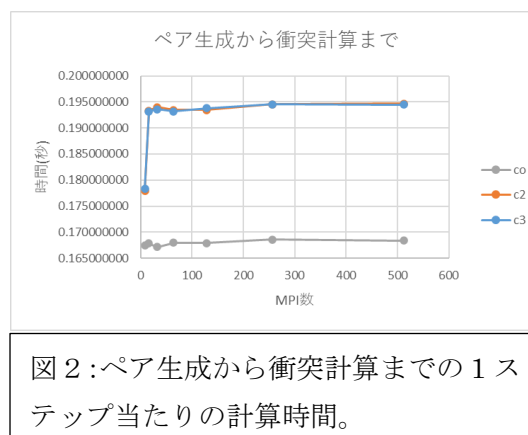


図 2 : ペア生成から衝突計算までの 1 ステップ当たりの計算時間。

衝突計算を行っているルーチンでのそれぞれの計算プロセスを細かく見ていくと、A0BA-B ではどの計算プロセスにおいてもよい弱スケーリングを示さず、Camphor3 では総計算時間でよい弱スケーリングを示しているように見えたが、32 及び 64 MPI プロセスで 1) 3) 5) 6) の計算プロセスの効率が悪くなっていた。FX1000 では 2) 3) 4) の計算プロセスの効率が悪くなっていた。

PIC-G2R のコード研究開発については、外

部トロイダル磁場のない（プラズマ自身が発生させるトロイダル磁場はある）「スフェロマック配位」において、2つのプラズマの磁場強度、密度が異なる「非対称スフェロマック」を扱えるようにコードを拡張した。このコードを用いてシミュレーションを行い、非対称度による緩和状態の変化について調べ、この緩和の違いには運動論効果が強く効いていることを示した。

核融合プラズマ向けジャイロ運動論粒子コード XGC-S の研究開発では、磁気島を含む配位における乱流輸送シミュレーションを行った。磁気島は閉じ込め磁場に共鳴するような波数成分を持つ磁場揺動によって生成される。プラズマ不安定性やコイル磁場の誤差成分によって自発的に生成するほか、核融合装置への熱負荷や装置周辺部のプラズマ乱流を制御するために人為的に導入される場合がある。磁気島の構造を取り入れたシミュレーションを行うために、高精度な磁力線追跡を用いて、磁気島に沿った擬似的な磁気座標系を構築した。また、大域的な電場やプラズマの応答と、微視的プラズマ不安定性の非線形時間発展を自己無撞着に解くための一連の計算スキームを導入した。磁気島を含まない軸対称系において、GAM 振動やゾーナルフローの生成、イオン温度勾配（ITG）不安定性のベンチマーク計算を実施し、実装の妥当性を確認した。磁気島を含むシミュレーションでは、磁力線が集中し急峻な温度勾配が形成される磁気島外周部で ITG 不安定性の線形成長率が大きくなる一方、GAM 振動やゾーナルフローの生成に伴う非線形効果が不安定性の成長を抑えることが観測された。特に、磁気島の外周に沿った電場やプラズマの流れが静電揺動の磁気島内部への侵入を防ぐことが確認され、磁気島をまたいだ乱流輸送を低減させる可能性が示された。これまでのコード開発により、磁気面や軸対称性を持たない点で解析が難しかった磁気島配位対

する体系的な解析が可能になってきている。

磁気再結合現象の研究については、大きく2種類の成果に分けられる。1つは、球状トーラス装置でのプラズマ合体による加熱機構探索に関するものであり、PIC-G2R コードを用いた粒子シミュレーションを行い、2つの球状トカマクプラズマが磁気再結合を通して合体する過程でのイオンの加熱を調べた。これまでに、リング・部分リングの速度分布構造を見出していたが、今回、合体途中では半径が大きい部分リング型、合体完了後には半径が小さい完全に近いリング型の速度分布が作られる傾向があることを見出し、その違いが生じる要因についても解明することに成功した。さらに、イオン加熱のトロイダル磁場、ポロイダル磁場強度依存性についても調べた。その結果、イオン加熱のエネルギーはトロイダル磁場にはあまり依存しないことがわかった。ただし、加熱は流体的描像から、圧縮加熱と粘性加熱に分類できるが、その割合はトロイダル磁場に大きく依存し、トロイダル磁場が強くなると、圧縮加熱は弱まり、粘性加熱は強くなる傾向が見られた。一方、図3に示すように、ポロイダル磁場を強くするにつれてイオン加熱は大きく上昇し、おおよそ、イオン加熱のエネルギーはポロイダル磁場の2乗に比例することが分かった。これは、多くの球状トーラス実験で報告されている結果とよく一致するものである。

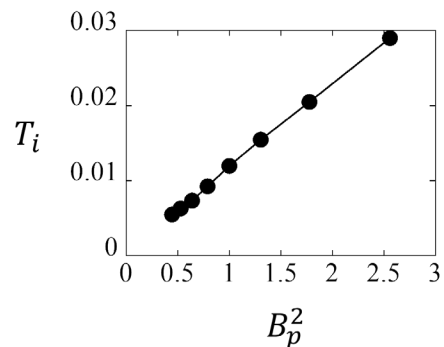


図3：イオン温度 T_i のポロイダル磁場 B_p 依存性。

もう1つは、磁気再結合の学理を追求するテーマであり、イオンの三日月型速度分布の研究を進めた。こちらでは、開放系粒子コード PASMO による粒子シミュレーションを行った。これまでに、イオンの三日月速度分布が3次元構造を持つことを示していたが、多くの場合に、三日月型速度分布が速度空間上で図4に示されるような二層構造を持つことを見出した。今回、我々の理論モデルを拡張して、磁気再結合電場を理論に組み入れることによって、二層構造が形成される機構をある程度説明することに成功した。

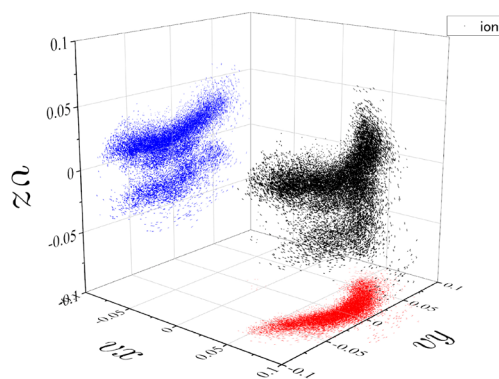


図4：イオンの速度プロット（黒点）。赤と青の点は、それぞれの平面への射影。

境界領域プラズマ輸送現象の研究では、前年度に引き続き、密度勾配に起因する不安定性により成長した揺動によってイオンが加熱される現象について調べ、特に、初期の密度勾配の大きさなどの物理量に対する依存性の解析を進めた。その結果、密度勾配が大きくなると、より加熱が強くなる傾向を示すことがわかった。また、その依存性は、磁力線垂直方向よりも、平行方向のイオンの加速において、より顕著に見られた。

高速粒子による波動励起の研究では、高速イオンが駆動する低域混成波の高調波構造の励起条件をパラメトリックに調べる電磁粒子シミュレーションをおこなった。地球磁気圏で典型的なパラメータ範囲を用いたところ、どの場合でも高調波が生成されることを明らかにした。これは地球磁気圏の広い範

囲で高調波が生成され得ることを示唆している。低域混成波と同じ異常波である高域混成波でも、同様の高調波構造が生成されることを確かめた。この場合、高速電子が励起した高域混成波が非線形波動間結合することによって、高調波構造が生成される。多種イオンプラズマにおける低域混成波不安定性について、電磁粒子シミュレーションをおこなった。背景イオンに対する高速イオンの質量を変えて、高速イオンをプラズマ中に注入し続けたところ、高速イオンの質量が大きい場合、線形段階では波動振幅が小さいものの、高速イオンが軽い場合に比べて非線形段階で非常に大きな振幅まで成長できることを明らかにした。また、高速イオンが重い方が、背景イオンが強く加速され、低域混成波の高調波構造が強く生成されることも明らかにした。また、低域混成波とホイッスラー波との非線形相互作用を調べるために、二次元電磁粒子シミュレーションを開始した。現在初期解析中である。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

up3bd のコード研究開発では、今年度、up3bd コードの各計算機での性能測定などを進めたが、衝突・素過程ルーチンの実装に向けた開発では疑似乱数生成ルーチンに関する問題により遅れが出ている。これらのことをふまえ、進捗状況について定量的に自己評価すると、60%程度の進捗であった。今後は、様々な計算機上において、さらに大規模なケースでの並列性能を調べるとともに、前述のように、各計算機における計算の高コスト箇所の解析も進んだことから、各 CPU に対応した最適化を進めたい。さらに、衝突素過程モデルの実装については、疑似乱数生成ルーチン問題の解決を目指しつつ、進める予定である。

PASMO のコード研究開発では、衝突計算を行っているルーチンでの計算プロセスを細

かく分け、それぞれの弱スケリングを詳細に調べることができた。計算セル番号による大きな D0 文内で 5) 6) を計算している場合 (co) と、ペアの配列作成、電子電子間、イオンイオン間、電子イオン間のそれぞれで計算セル番号による D0 文を実行する場合 (c2, c3) で、co の方が計算効率がよいことが分かり、全体で計算コストが大きなこれらの計算で十分な弱スケリングを示していることが分かった。co の方が計算効率がよいのは c2 と c3 と比べ、オーバーヘッドがかなり影響していることが予想される。5) 6) 以外の衝突計算のための準備計算で計算効率が悪いこともわかり、今後のチューニングの大事な指針が得られた。以上のことから進捗状況を自己評価すると、100%である。

PIC-G2R のコード研究開発については、素過程の粒子シミュレーションコードへの組み込みの一環として、当初計画していたクーロン衝突効果等の PIC-G2R コードへの組み込みは実施できなかった。一方、実験方面で注目されていることから取り組み始めた、非対称のスフェロマック型のプラズマ合体を扱えるようになったことは当初計画にはなかった進捗である。今後は、計画を練り直して数ある素過程のうち取り込むべきものの優先度を変更するとともに、シミュレーション結果を東京大学の球状トラス装置 TS-6 などの実験結果と比較して、実験により近い状況を再現するコード改良を進める計画である。進捗状況を自己評価すると、50%と考えている。

ジャイロ運動論コード XGC-S は、非軸対称な磁場配位を用いたヘリカル型核融合実験炉を対象に、炉心プラズマから真空容器壁までカバーする全系プラズマ解析を目指して開発が進められている。このような解析では、軸対称なトカマク型核融合炉の炉心プラズマ解析で重要となる乱流輸送に加えて、大域的な静電場構造の生成や磁気面を持たない

核融合炉周辺領域での非熱的プラズマダイナミクスを考慮することが重要である。2024 年度の研究開発では、これらを自己無撞着に扱うためのシミュレーション手法を XGC-S に導入し、磁気島配位に応用した。磁気島配位では、軸対称配位をベースに揺動磁場を加えることで、部分的に磁気面が壊れた非軸対称な構造が現れる。そのため、非軸対称配位向けコードのベンチマークや動作テストとして適切な対象である。プラズマ輸送に対する磁気島の影響はヘリカル型・トカマク型に共通した課題であり、本研究で有用な知見が得られたとともに、XGC-S の開発プロセスとしても着実な前進が見られた。そのため、進捗状況の定量的な自己評価は 90%である。

磁気再結合現象の研究については、まず球状トラス装置における球状トカマク型のプラズマ合体に関しては、粒子シミュレーションのパラメータランを実施して、イオン加熱のトロイダル磁場依存性を示したこと、それが実験で報告されている傾向と一致することを確認したことは、当初計画通りである。その上、ポロイダル磁場依存性を示したことは当初計画以上の進展であった。一方、粘性加熱を運動論的な描像から完全解明するには至らなかった面では遅れが見られた。今後はその解明に取り組みつつ、より多くのパラメータランを実施することにより、効率のよい加熱条件を見出すことで、核融合科学方面への貢献もしていく予定である。また、非対称スフェロマック型の合体のシミュレーションも多数実施し、緩和の違いを生み出す機構を定量的に説明する計画である。なお、もう 1 つのテーマである磁気再結合の学理追求面における、三日月型速度分布の二層構造解明については、当初計画にはなかった進捗である。以上から、進捗状況を自己評価すると、総合すれば 70%と考えている。

境界領域プラズマ輸送現象の研究では、up3bd コードによる大規模シミュレーション

を進め、密度勾配起因のイオン加熱現象の密度勾配依存性などについて調べたが、進捗状況について定量的に自己評価すると、60%程度の進捗であった。今後については、イオン加熱現象の解析を進め、当該現象の物理機構理解の深化などを目指すとともに、up3bd コードへの衝突素過程モデルの導入がなされ次第、同コードを用いて、非接触過程が輸送におよぼす影響を調べたい。

高速粒子による波動励起の研究では、当初計画していた、低域混成波不安定性の非線形発展のパラメータ依存性および高調波構造に関する論文 2 本に加えて、研究遂行中に新たに見出した結果に関する論文を 1 本発表することができた。これは、低域混成波と関係の深い高域混成波の高調波構造に関する論文であり、学会誌の表紙に選出されている。また、低域混成波不安定性に関する理論・数値解析に関する論文を 1 本執筆中であり、近々投稿する予定である。このことから、進捗状況の自己評価は 100%といえる。今後は、執筆中の理論・数値解析の論文をもとに、低域混成波による粒子加速および高調波サイドバンドを含む高調波構造の詳細な解析を行う。低域混成波とホイッスラー波との非線形相互作用を調べる二次元シミュレーションについても、数多く実施し、詳細な解析を行なっていく。また、多種イオンプラズマにおける非線形磁気音波の理論・数値解析などに取り組む予定である。

以上のように進捗にやや遅れがある課題もあるが、十分な進捗の課題もあり、研究課題全体の進捗は 75%以上である。