HPCの将来動向

日本原子力研究開発機構

井戸村泰宏

プラズマ・核融合学会計算科学研究部会第1回総会、東京、2013年12月5日

✓ 関連プロジェクト

 \checkmark

HPCI戦略プログラム分野4"ものづくり"体制構築課題「次世代計算科学ソフトウェア の革新的アルゴリズムの創生と核融合プラズマ流体解析への応用」 HPCI京一般利用課題「核融合プラズマの乱流輸送シミュレーション」 G8 Nuclear Fusion Simulation@Exa-scale 将来のHPCIシステムのあり方調査研究「アプリケーション分野」 研究協力者

前山伸也、仲田資季、矢木雅敏、小関隆久(JAEA核融合) 河村拓馬、三木一弘、山田進、町田昌彦(JAEA計算科学) 渡邊智彦、沼波政倫、石澤明宏(核融合研) 今村俊幸(理研)、松岡清吉(RIST神戸センター) 朴泰祐、奴賀秀男、藤田典久(筑波大)



	BX900(Fujitsu,Rank84)	Helios(Bull,Rank12)	K(Fujitsu/Riken,Rank2)
CPU	Nehalem-EP(4core)	SandyBridge-EP(8core)	SPARC64VIIIfx(8core)
Performance	0.2PFlops	1.5PFlops	11.3PFlops
Memory(B/F)	51TB(0.25)	282TB(0.19)	1,410TB(0.12)
B/F ratio	0.54	0.3	0.5
Cores	17,072	70,560	705,024
Network	InfinibandQDR8x(8GB/s)	InfinibandQDR4x(4GB/s)	Tofu(5GB/s x 4)
Topology	Fat Tree	Fat Tree	6D Torus
Power	0.83MW	2.2MW	12.7MW

HPCI京利用一般課題「核融合プラズマの乱流シミュレーション」

- 割り当て資源:19Mnodeh(H24.10-H25.9)+2Mnodeh(H25.10-H26.3)
- ITERにおける核燃焼プラズマの特徴
 - 閉じ込め性能を向上するために装置サイズを大型化
 - 核融合反応で発生する3.5MeVのα粒子による電子加熱
- 課題1:プラズマ乱流輸送の装置サイズスケーリング
 - 実機試験が難しい装置サイズスケーリングを第一原理乱流計算で評価
- 課題2:マルチスケール電子乱流による電子熱輸送
 - 核燃焼プラズマで重要な電子熱輸送を第一原理乱流計算で評価

GT5Dによるイオン系乱流のサイズスケーリング



GKVによるイオン系-電子系の乱流計算







<u>特徴的スケール</u> 電子軌道半径~0.1mm イオン軌道半径~5mm →50³倍の解像度

京におけるプラズマ乱流コードのストロングスケーリング



- 京フルシステムまで良好なストロングスケーリングを達成
 - 対ピーク性能比~10%,並列化率~99.9999%
 - 通信スレッドの実装による演算と通信の同時処理技術
 - 京の通信機構に対するプロセス配置の最適化技術
 - マルチコアプロセッサのコア間共有キャッシュの最適化技術 →ペタスケール核融合シミュレーションに向けたコード最適化を完了



従来の分布固定&モデルがgyro-Bohm則を示す大型装置領域a/pi>300
でも、加熱固定full-fモデルでa/piとPinをスケールするとBohm則を観測

臨界勾配付近(R/L_{ti}~6)に温度分布が拘束され、加熱パワースキャンと同様の温度分布の硬直性、輸送特性(PDF等)の変化を観測
→大型装置領域a/ρ_i>300の輸送スケーリングに加熱パワー依存性が影響

GKVによるマルチスケール電子乱流計算

[Maeyama,ICNSP2013]

Cyclone parameter, $\beta=0.5\%$, $m_i/m_e=1836$, $\lambda_{De}/\rho_{te}=0.89$



- 新手法によりエントロピーバランスを満たす高精度計算[Maeyama,CPC2013]
- 京を利用した実質量比(50³倍の解像度)、高βのマルチスケール計算
 - イオンスケール乱流によって電子スケール乱流が抑制される
 - 電子スケール乱流の寄与によってイオンスケールの輸送係数が増大
 - 実験値に対して輸送係数(熱拡散係数、熱輸送比)を定量的に改善
 - →核燃焼プラズマで重要な電子系乱流のマルチスケールスペクトルを同定

将来のHPCIシステムのあり方調査研究「アプリケーション分野」(アプリFS)の概要

- アプリFS発足の経緯
 - H23後半に次世代計算機システムの開発に向けたアプリケーション検討の場として文科省にアプリケーション作業部会を設置
 - 戦略プログラム5分野を中心に今後5~10年間の各分野のサイエンスロードマップをとりまとめた「計算機ロードマップ白書」を公開
 - 上記ロードマップの精査およびシステム評価アプリ構築を目的にJST委託研究 として理研・東工大チームを中心とするアプリFSプロジェクトをH24に採択
- アプリFSの概要
 - 戦略プログラム5分野(生命、物質、防災、ものづくり、基礎物理)を中心にロードマップ執筆メンバーを構成し、理研チームが全体をとりまとめ
 - 社会的・科学的課題の抽出
 - 分野横断的課題の抽出

→プラズマ・核融合では原子力機構が分野4「ものづくり」に参画

プロジェクトメンバーからペタスケールコードを公募し、東工大チームがシステム評価用ミニアプリを構築

→原子力機構からGT5Dコードを提供

■計算科学ロードマップ白書の概要

白書の構成(2013.7概要を公開・パブコメ募集、2014.3文科省に最終報告)
第1章:序論

第2章:HPCが貢献しうる社会的課題(医療、防災、エネルギー・環境、社会経済) 第3章:分野連携による新しい科学(基礎科学連携、ビッグデータ、大型実験連携) 第4章:各分野の社会的・科学的課題(生命、物質、地球、ものづくり、基礎物理) 別添:2020年に必要な計算機資源量の見積もり

→プラズマ・核融合分野は第2章クリーンエネルギー、第4章ものづくりに記載

- プラズマ・核融合分野のロードマップ(執筆:井戸村、渡邉、前山)
 - 戦略プログラムで開発したペタスケールコードに基づくロードマップを構築 →ロードマップをGT5D、GKVによるプラズマ乱流シミュレーションに特化
 - ITERにおける核燃焼プラズマの"物理"解明をブレークスルーと位置づける →核融合エネルギーフォーラムの議論を反映し"ものづくり"としないことを明記
 - エクサスケールシミュレーションの課題
 - 時空間の拡大:ITER規模×エネルギー閉じ込め時間スケール
 - 物理モデルの詳細化:3次元磁場×イオン-電子マルチスケール

→現在のストロングスケーリング+メニーコア最適化で見通せる課題を設定

ロードマップ白書概要における核融合分野の位置付け

http://www.riken.go.jp/pr/topics/2013/20130719_1/

今後の計算科学が貢献しうる社会的課題

今後の科学計算からの

■ 複合材料の構造とエネル

ギー変換効率との相関の理

解、材料性能の劣化機構の

高精度・高分解能な気象モ

プラズマ乱流現象の解明

■ 電気化学過程の解明や、触 媒や電極として用いられる 希少元素の代替物の探索

■ シミュレーションによるもの

高信頼性の気候システムモ

デルによる現状把握と予測

アプローチ

解明と予測

デル

づくり

エネルギー・環境問題

エネルギー技術と環境との調和

従来の研究

- 物質科学分野、ものづくり分野、気象・気候分野が独立して研究
- 理論・実験中心での研究



高精細な風況評価による 風力発電サイトの適切な立地

社会への貢献

- 安定的、高効率な再生可 能エネルギーの創成
 ■ 核融合炉の科学的・技術
- 核融合炉の科学的・技術 的実証
- 二次電池や燃料電池など 電力を効率的に貯蔵し取 り出す技術の開発
- 電子デバイスや輸送機器 の省エネルギー化
- エネルギー利用による地 球環境への影響の監視

