

# GKVコードの概要

沼波政倫 (NIFS)

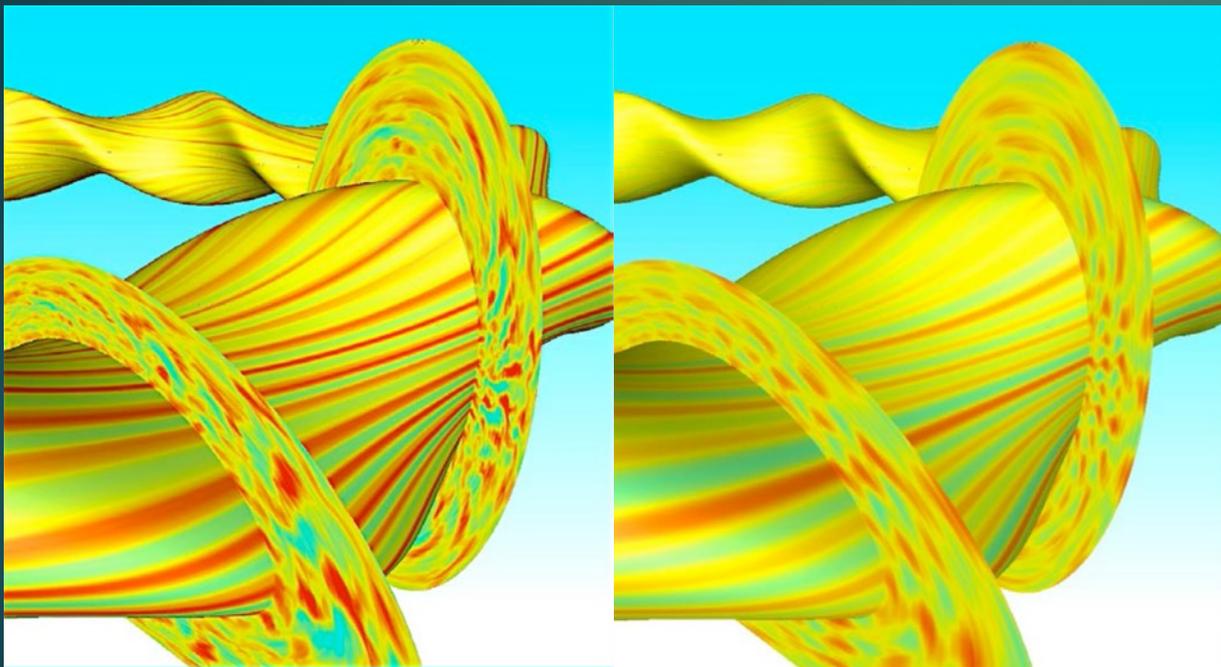
開発チーム： 渡邊智彦、前山伸也 (名大) 、  
仲田資季、洲鎌英雄 (NIFS) 、石澤明宏 (京大)

# GKVコード

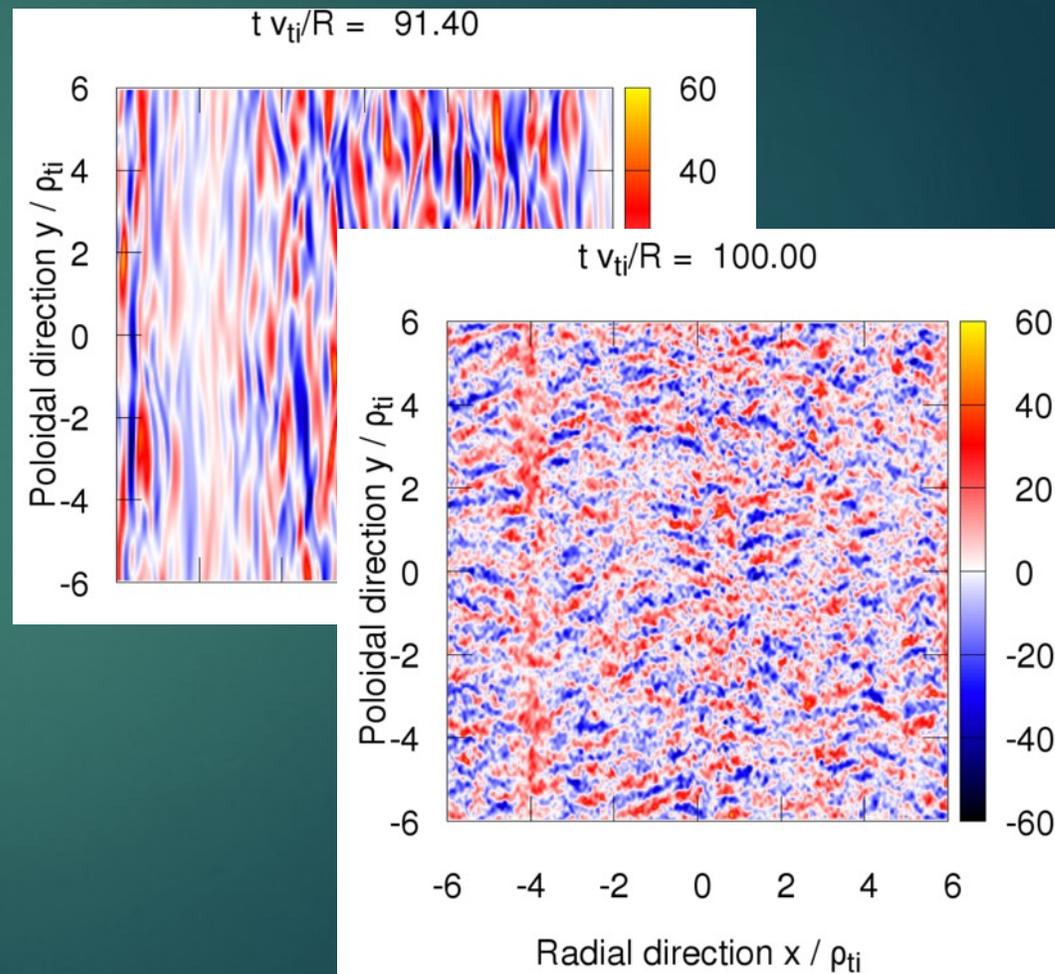
- ▶ ジャイロ運動論的シミュレーションコード
  - ▶ 磁場閉じ込めプラズマ中の乱流やゾーナルフローの時間発展を追跡
  - ▶ フラックスチューブを用いた局所モデル
  - ▶ 背景磁場、密度・温度勾配を固定し、揺動のみを扱う
  - ▶ 電磁場揺動および複数粒子種を導入
  - ▶ 同種・異種粒子間衝突
  - ▶ トカマクおよびヘリカル形状に対応
  - ▶ 実験に対応した磁場配位の導入
  - ▶ エントロピー・バランスによる精度チェックと相互作用解析

# GKVコードの応用例

## ▶ 乱流輸送の同位体効果

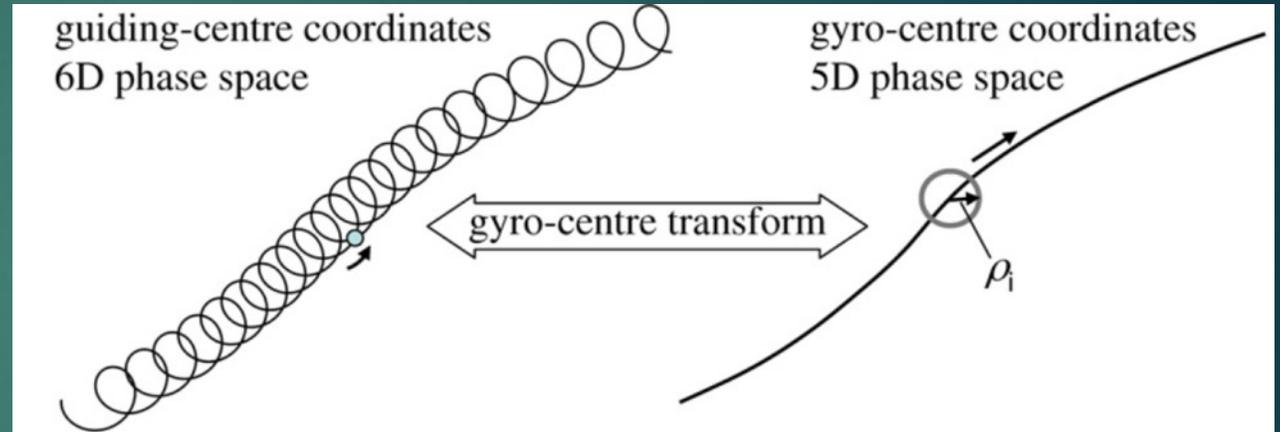


## ▶ マルチスケール乱流



# ジャイロ運動論について

- ▶ 荷電粒子のジャイロ運動を平均し、速い振動成分を除去
- ▶ 位相空間座標は、6次元から5次元に低減



- ▶ 磁場に垂直方向にジャイロ半径程度、平行方向に装置サイズ程度の波長を持つ揺らぎ（バルーニング型）を精度よく扱う
- ▶ 捕捉粒子・非捕捉粒子、磁場ドリフト、ランダウ減衰、有限ジャイロ半径、などの運動論的效果を取り入れる

# どのような現象に適用するか？

- ▶ ドリフト波不安定性およびドリフト波乱流
  - ▶ イオン/電子温度勾配モード (ITG/ETG)
  - ▶ 捕捉電子モード (TEM)
  - ▶ 運動論的バルーニングモード (KBM)
  - ▶ 微視的ティアリングモード (MTM)
- ▶ ゴーナルフロー、測地的音波モード (GAM)
- ▶ 運動論的Alfven波
- ▶ 磁気リコネクション
- ▶ 減衰/駆動型運動論的乱流

# 現状のGKVコードではできないこと

- ▶ 平衡分布の緩和 ⇒ 輸送コードへ
- ▶ 低(m, n)モード ⇒ MHDコードへ
- ▶ 加熱、粒子供給 ⇒ 密度・温度分布固定
- ▶ 過渡応答 ⇒ 摂動部分なら可能？
- ▶ 磁気音波 ⇒ 拡張可能
- ▶ ~~背景ExB流シフト~~ ⇒ 線型解析には対応済 (※トロイダル回転は拡張途中)
- ▶ 平行電場による非線形効果 ⇒ GKオーダリングで消去

# GKVコードで解いている式 1

(波数空間での表現)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f_{sk}}{\partial t} + v_{\parallel} \nabla_{\parallel} f_{sk} + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{sD} f_{sk} + N_{sk} - \frac{\mu \nabla_{\parallel} B}{m_s} \frac{\partial f_{sk}}{\partial v_{\parallel}} \\ &= -\frac{e_s F_{sM}}{T_s} \left[ v_{\parallel} \left( \nabla_{\parallel} J_{0sk} \phi_k + \frac{\partial J_{0sk} A_{\parallel k}}{\partial t} \right) + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{sD} J_{0sk} \phi_k - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{s*} J_{0sk} (\phi_k - v_{\parallel} A_{\parallel k}) \right] \\ &+ \sum_s C_{s,s'}(f_{sk}, f_{s'k}) \end{aligned}$$

$$\left[ k_{\perp}^2 + \frac{1}{\epsilon_0} \sum_s \frac{e_s^2 n_s}{T_s} (1 - \Gamma_{0sk}) \right] \phi_k = \frac{1}{\epsilon_0} \sum_s e_s \int J_{0sk} f_{sk} dv^3$$

$$k_{\perp}^2 A_{\parallel k} = \mu_0 \sum_s e_s \int v_{\parallel} J_{0sk} f_{sk} dv^3$$

(s: 粒子種)

# GKVコードで解いている式 2

(Abbreviations)

$$\nabla_{\parallel} = \frac{1}{B\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{SD} = \frac{m_s v_{\parallel}^2 + \mu B}{e_s} (K_x k_x + K_y k_y)$$

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{S*} = -\frac{T_s}{e_s} \left[ \frac{1}{L_{ns}} + \left( \frac{m_s v_{\parallel}^2}{2T_s} + \frac{\mu B}{T_s} - \frac{3}{2} \right) \frac{1}{L_{Ts}} \right] k_y$$

$$N_{sk} = -\frac{1}{B} \sum_{\mathbf{k}' + \mathbf{k}'' = \mathbf{k}} (k'_x k''_y - k'_y k''_x) J_{0sk'} (\phi_{k'} - v_{\parallel} A_{\parallel k'}) \left( f_{sk''} + \frac{e_s F_{sM}}{T_s} J_{0sk''} \phi_{k''} \right)$$

$$F_{sM} = n_s \left( \frac{m_s}{2\pi T_s} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{m_s v_{\parallel}^2}{2T_s} - \frac{\mu B}{T_s} \right)$$

# GKVコードで解いている式 3

(Abbreviations 続き)

$$J_{0sk} = J_0(k_{\perp}\rho_s)$$

$$\Gamma_{0sk} = I_0(k_{\perp}^2\rho_{ts}^2)\exp(-k_{\perp}^2\rho_{ts}^2)$$

$$k_{\perp}^2 = g^{xx}k_x^2 + 2g^{xy}k_xk_y + g^{yy}k_y^2$$

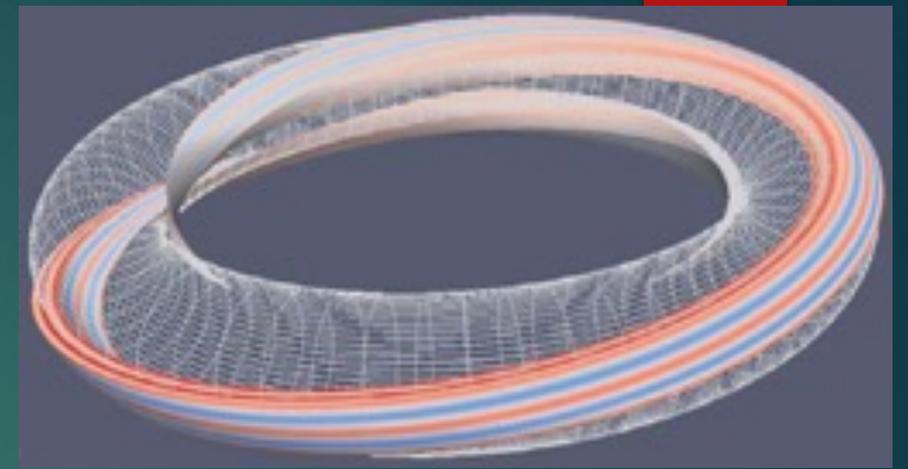
$$K_x = -\frac{\partial \ln B}{\partial y} + \frac{g^{xz}g^{xy} - g^{xx}g^{yz}}{B^2/c_b^2} \frac{\partial \ln B}{\partial z}$$

$$K_y = \frac{\partial \ln B}{\partial x} + \frac{g^{xz}g^{yy} - g^{xy}g^{yz}}{B^2/c_b^2} \frac{\partial \ln B}{\partial z}$$

$$\frac{1}{L_{ns}} = -\frac{d \ln n_s}{dx}$$

$$\frac{1}{L_{Ts}} = -\frac{d \ln T_s}{dx}$$

# フラックスチューブ座標



## ▶ 座標系

- ▶  $x = c_x(\rho_F - \rho_0)$ ,  $y = c_y[q(\rho_F)\theta_F - \zeta_F]$ ,  $z = \theta_F$
- ▶ ここで、 $(\rho_F, \theta_F, \zeta_F)$  は平衡分布を表す任意の磁気座標
- ▶  $x \in [-L_x, +L_x]$ ,  $y \in [-L_y, +L_y]$ ,  $z \in [-N_\theta\pi, +N_\theta\pi]$   
( $z = 0$  on the outward midplane)

## ▶ 背景分布のパラメータを固定

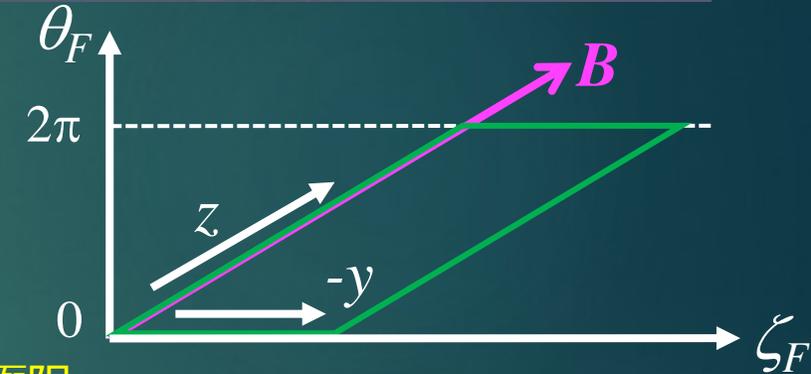
- ▶ 局所的な密度・温度勾配、磁気シアのもとで解析  $\Leftrightarrow \rho^* \rightarrow 0$  極限
- ▶ 動径方向に周期境界条件を適用可能

## ▶ 摂動量のFourier表現

$$A = A(x, y, z) = \sum_{k_\perp} \tilde{A}_{k_\perp}(z) e^{ik_x x + ik_y y}$$

$$= \sum_{k_\perp} \tilde{A}_{k_\perp}(\theta_F) e^{i(k_x + c_\theta \hat{s} \theta_F k_y) c_x (\rho_F - \rho_0) + ik_y c_y (q_0 \theta_F - \zeta_F)}$$

$$\hat{s} = \frac{\rho_0}{q_0} \frac{dq}{d\rho_F}, \quad c_\theta = \frac{c_y q_0}{\rho_0}$$



# 磁力線方向の境界条件

- ▶ トーラスにおける周期性

$$A[x, y(\theta_F, \zeta_F), z(\theta_F)] = A[x, y(\theta_F + 2\pi, \zeta_F), z(\theta_F + 2\pi)]$$

- ▶ 磁力線方向の境界条件

$$\tilde{A}_{\mathbf{k}_\perp}(z) = c_{k_y} \tilde{A}_{\mathbf{k}_\perp + \delta \mathbf{k}_\perp}(z + 2\pi)$$

$$\delta \mathbf{k}_\perp = -2\pi c_\theta \hat{s} k_y \nabla x, \quad c_{k_y} = \exp(i2\pi q_0 k_y c_y)$$

- ▶ バレーニング表現との類似から、 $z$ 空間を拡張

$$\tilde{A}_{\mathbf{k}_\perp}(z) = c_{k_y} \tilde{A}_{\mathbf{k}_\perp + \delta \mathbf{k}_\perp}(z + 2N_\theta \pi)$$

$$\delta \mathbf{k}_\perp = -2N_\theta \pi c_\theta \hat{s} k_y \nabla x, \quad c_{k_y} = \exp(i2N_\theta \pi q_0 k_y c_y)$$

- ▶ アスペクト比への制約

$$\left| \frac{\delta k_x}{k_{x,min}} \right| = \left| \frac{k_y}{k_{y,min}} \right| N_\theta m, \quad m = 2\pi c_\theta \hat{s} \frac{k_{y,min}}{k_{x,min}}$$

# 衝突項について

## ▶ Lenard-Bernsteinモデル

$$C_{sk}^{LB} = v_s \left[ \frac{\partial}{\partial v_{\parallel}} \left( v_{\parallel} h_{sk} + v_{ts}^2 \frac{\partial h_{sk}}{\partial v_{\parallel}} \right) + \frac{1}{v_{\perp}} \frac{\partial}{\partial v_{\perp}} \left( v_{\perp}^2 h_{sk} + v_{ts}^2 v_{\perp} \frac{\partial h_{sk}}{\partial v_{\perp}} \right) - k_{\perp}^2 \rho_{ts}^2 h_{sk} \right]$$

$$h_{sk} = f_{sk} + e_s F_{sM} J_{0sk} \phi_k / T_s$$

- ▶ 運動量 / エネルギーは保存しない
- ▶ 速度空間格子幅に対し、適切な  $v_s$  を設定すれば数値誤差抑制
- ▶ 多種粒子衝突項 (Sugama+, 2009)
  - ▶ 粒子・運動量・エネルギー保存、自己随伴性を持つ
  - ▶ 陰解法版も利用可能

時間積分法の切り替え	time_advnc= "imp_colli"
衝突項陰解法	"imp_colli",
4次Runge-Kutta-Gill	"rk4"
自動選択	"auto_init"

# GKVコードでの無次元化

## ▶ 基準となる量

- ▶ 平衡分布、磁力線方向の揺動長の単位  $L_{\text{ref}}$  ( $\Rightarrow$  主半径  $R_0$ )
- ▶ 磁力線垂直方向の揺動長の単位 = ジャイロ半径  $\rho_{\text{ref}}$
- ▶ 速度の単位 = 熱速度  $v_{\text{ref}}$ , 時間の単位 =  $L_{\text{ref}} / v_{\text{ref}}$
- ▶ 電荷  $e$ , 質量  $m_{\text{ref}}$  ( $\Rightarrow$  陽子質量  $m_p$ ), 数密度  $n_{\text{ref}}$  ( $\Rightarrow$  電子密度  $n_e(\rho_0)$ ), 温度  $T_{\text{ref}}$  ( $\Rightarrow$  主イオン温度  $T_i(\rho_0)$ )
  - ▶ 各成分  $s$  ごとに、reference量との比として、 $m_s / m_{\text{ref}}$ ,  $T_s / T_{\text{ref}}$  などを与える。
  - ▶  $v_{\text{ref}} = \sqrt{T_{\text{ref}} / m_{\text{ref}}}$
  - ▶ 磁場強度は磁気軸での値

## ▶ 変動量の規格化

$$\check{f}_{sk} = \frac{L_{\text{ref}} v_{ts}^3}{\rho_{\text{ref}} n_s} f_{sk}, \quad \check{\phi}_k = \frac{L_{\text{ref}} e_{\text{ref}}}{\rho_{\text{ref}} T_{\text{ref}}} \phi_k, \quad \check{A}_{\parallel k} = \frac{L_{\text{ref}} e_{\text{ref}} v_{\text{ref}}}{\rho_{\text{ref}} T_{\text{ref}}} A_{\parallel k}$$

## ▶ 輸送係数の規格化

$$\check{\chi} = \frac{L_{\text{ref}}}{\rho_{\text{ref}}^2 v_{\text{ref}}} \chi = \chi / \chi^{GB}$$

局所モデルでは  $\rho_*^{-1} = L_{\text{ref}} / \rho_{\text{ref}}$  は不定

# 無次元化された方程式

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \check{f}_{sk}}{\partial \check{t}} + \check{v}_{ts} \check{v}_{\parallel} \check{\nabla}_{\parallel} \check{f}_{sk} + i \check{\mathbf{k}} \cdot \check{\mathbf{v}}_{sD} \check{f}_{sk} + \check{N}_{sk} - \check{v}_{ts} \check{\mu} \check{\nabla}_{\parallel} \check{B} \frac{\partial \check{f}_{sk}}{\partial \check{v}_{\parallel}} \\ & = - \frac{\check{e}_s \check{F}_{sM}}{\check{T}_s} \left[ \check{v}_{ts} \check{v}_{\parallel} \left( \check{\nabla}_{\parallel} J_{0sk} \check{\phi}_k + \frac{\partial J_{0sk} \check{A}_{\parallel k}}{\partial \check{t}} \right) + i \check{\mathbf{k}} \cdot \check{\mathbf{v}}_{sD} J_{0sk} \check{\phi}_k - i \check{\mathbf{k}} \cdot \check{\mathbf{v}}_{s*} J_{0sk} (\check{\phi}_k - \check{v}_{ts} \check{v}_{\parallel} \check{A}_{\parallel k}) \right] \end{aligned}$$

$$\left[ \check{\lambda}_D^2 \check{k}_{\perp}^2 + \sum_s \frac{\check{e}_s^2 \check{n}_s}{\check{T}_s} (1 - \Gamma_{0sk}) \right] \check{\phi}_k = \sum_s \check{e}_s \check{n}_s \int J_{0sk} \check{f}_{sk} d\check{v}^3$$

$$\check{k}_{\perp}^2 \check{A}_{\parallel k} = \check{\beta} \sum_s \check{e}_s \check{n}_s \int \check{v}_{ts} \check{v}_{\parallel} J_{0sk} \check{f}_{sk} d\check{v}^3$$

無次元化されたデバイ長と  $\beta$

$$\check{\lambda}_D^2 = \frac{\lambda_{D,\text{ref}}^2}{\rho_{\text{ref}}^2}, \quad \beta = \frac{v_{\text{ref}}^2}{V_{A,\text{ref}}^2} = \frac{\rho_{\text{ref}}^2}{c^2 / \omega_{p,\text{ref}}^2}$$

# GKVの数値スキーム

- ▶ 時間積分
  - ▶ 4次精度Runge-Kutta-Gill (時間刻み幅調整機能付き)
  - ▶ 衝突項陰解法には2次のoperator splitting + Crank-Nicholson
- ▶ 空間微分
  - ▶  $(x, y)$ : FFTを用いたスペクトル法 (with 3/2-rule)
  - ▶  $z$ : 4次中心差分 or 5次風上差分
  - ▶  $(v_{\parallel}, \mu)$ : 4次中心差分,  $v_{\perp}$ についての等間隔格子
- ▶ 速度空間積分
  - ▶ 台形公式 +  $v_{\perp}=0$  近傍での補正
- ▶ 使用する数値計算ライブラリ
  - ▶ FFTW は必須。他は様々なライブラリ向けにインターフェースを用意

# GKVでの並列化

- ▶ MPI領域分割と通信
  - ▶ 分布関数揺動の6次元複素配列  $(kx, ky, z, v_{\parallel}, \mu, s)$  を  $(ky, z, v_{\parallel}, \mu, s)$  の5次元領域分割
  - ▶ ポテンシャル揺動などは、 $(kx, ky, z)$  を  $(ky, z)$  で分割
  - ▶  $(z, v_{\parallel}, \mu)$  では差分にともなう1対1通信
  - ▶  $(v_{\parallel}, \mu, s)$  で電荷・電流密度計算にともなう reduction 通信
  - ▶ 衝突項陰解法、FFTにともなう転置通信
  - ▶ Binary データは分割されたまま出力される
- ▶ OpenMPを用いた共有並列
  - ▶ スレッドによる並列計算
  - ▶ master / slave スレッドを利用した通信と演算のoverlap

# パラメータ設定について 1

- ▶ 以下のパラメータを **gkvp\_header.f90** で設定してからコンパイル
  - ▶  $x, y$  方向の格子点数のパラメータ **nxw** ( $>3 \cdot nx/2$ ), **nyw** ( $>3 \cdot \text{global\_ny}/2$ ) を 2, 3, 5 等の倍数で与える
  - ▶ 使用するFourierモード数 **nx, global\_ny**
  - ▶  $z, v_{\parallel}, \mu$  方向の格子点数のパラメータ **global\_nz, global\_nv, global\_nm**
  - ▶ 並列分割数 **nprocw, nprocz, nprocv, nprocm**
  - ▶ 粒子種の数 **nprocs**
  - ▶ **global\_ny+1, global\_nz, global\_nv, global\_nm+1** はそれぞれの並列分割数で割り切れるように設定すること

# パラメータ設定について 2

- ▶ 以下のパラメータを `gkvp_namelist` で設定 (詳細は後ほど)
  - ▶  $z$  方向のフラックスチューブの長さ `n_tht`  $\Leftrightarrow z \in [-N_\theta \pi, +N_\theta \pi]$
  - ▶  $y$  方向の最小波数 `kymin`
  - ▶  $x, y$  方向の計算領域のアスペクト比 `m_j`  
( $m = 2\pi c_\theta \hat{s} k_{ymin} / k_{xmin}$ ; 磁気シア  $\hat{s}$ ; 接続の位相差  $2\pi c_\theta$ )
  - ▶ 各粒子の熱速度で規格化した速度空間境界 `vmax` (熱速度の4倍から5倍程度に設定)
  - ▶ モード数や格子点数の設定例は文献を参照
    - ▶ Watanabe & Sugama, NF2006;  
Nunami+ PoP2012;  
Maeyama+, CPC 2013;  
Ishizawa+ NF2015;  
Nakata+ PRL2017;  
Maeyama+ PRL2017 など

# パラメータ設定について 3

## ▶ 線形計算でのtips

- ▶ トカマクでは、多くの場合  $k_x = 0$  が最大成長を与えるため(例外あり)、 $k_y$  依存性のみを調べることがよく行われる
- ▶ 成長率が小さい、または磁気シアが弱い場合、磁場に沿ってモード構造が  $\pm\pi$  より広がるため  $n_{\text{tht}}$  を十分大きくして収束性を確認する
- ▶ 非軸対称配位では、周期性を保つため  $Mq$  を整数になるよう磁気面位置を選ぶ (LHDは  $M = 10$ 、W7-Xは  $M = 5$ )
- ▶ ヘリカル系ではリップルを分解できるように  $n_z$  を十分大きく設定 (LHDでは  $n_z=128$ 、256 など)
- ▶ トカマクでもlocal shearが大きい場合等は解像度に注意
- ▶ 速度空間格子点は少なくとも、 $n_v=16$ ,  $n_m=15$ 程度以上に

# パラメータ設定について 4

- ▶ 非線形計算でのtips（線形計算でのtipsを踏まえた上で）
  - ▶ 「乱流」を扱うには、最小でも  $nx=32$ ,  $global\_ny=32$  程度以上に
  - ▶ 最大分解波数を、線形安定限界の2倍程度以上に
  - ▶ 速度空間や  $z$  空間の解像度不足の場合、エントロピー・バランスの誤差が増大するので、 $z, v_{\parallel}, \mu$  方向の解像度を上げる
  - ▶ 流出境界条件で  $n\_tht$  が小さい場合も、エントロピー・バランスの誤差が増大するので  $n\_tht$  を大きくする
  - ▶ 解像度不足のために数値発散することもある
  - ▶ 運動論的電子を導入した場合、多くの計算資源が必要になる（特に非軸対称配位）
  - ▶ 支配的な乱流揺動のサイズよりも十分大きなボックスサイズを取る（ $kymin$  を小さく、 $m_j$  を大きく）

# おわりに

- ▶ 皆さんの研究に是非GKVコードをご活用ください
- ▶ 今後も継続的にメンテナンス/バージョンアップ予定
- ▶ GKVホームページ（過去の講習会資料もこちらから）  
<http://www.p.phys.nagoya-u.ac.jp/gkv/>
- ▶ 最新ソースコードはGitHubリポジトリからもダウンロードできます  
<https://github.com/GKV-developers/gkvp>
- ▶ 利用上の注意
  - ▶ コードの著作権は開発者に帰属します
  - ▶ 非営利研究には自由に使ってください
  - ▶ 結果の正しさは必ずしも保証しません
  - ▶ 配布されたコードから変更を加えて実行した結果を公表する場合は、変更点を論文などに明記してください
  - ▶ GKVを使用した論文では、以下の文献を引用してください  
Watanabe, T-H., and H. Sugama. "Velocity-space structures of distribution function in toroidal ion temperature gradient turbulence." Nuclear Fusion 46.1 (2006): 24.

# (参考) ExB回転効果について

- ▶ ExB移流を波数空間の移流項として扱うEulerアプローチを採用
  - ▶ 各タイムステップでグリッド上の量の補間や線形項の再計算が必要
  - ▶  $t=0$  でのグリッドを時間的に固定し、  
 $k_y \gamma_E t \geq \Delta k_x$  となる  $t$  で  
 $f(mx, my) \rightarrow f(mx+1, my)$  のマッピングを実施
  - ▶  $\gamma_E = \frac{1}{B_{ref}} (\partial_x^2 \phi)_{\rho=\rho_0}$
  - ▶ 無次元化  $\check{\gamma}_E = \gamma_E B_{ref} L_{ref} / v_{ref}$