

プラズマ・シミュレーションコード群

沼波政倫

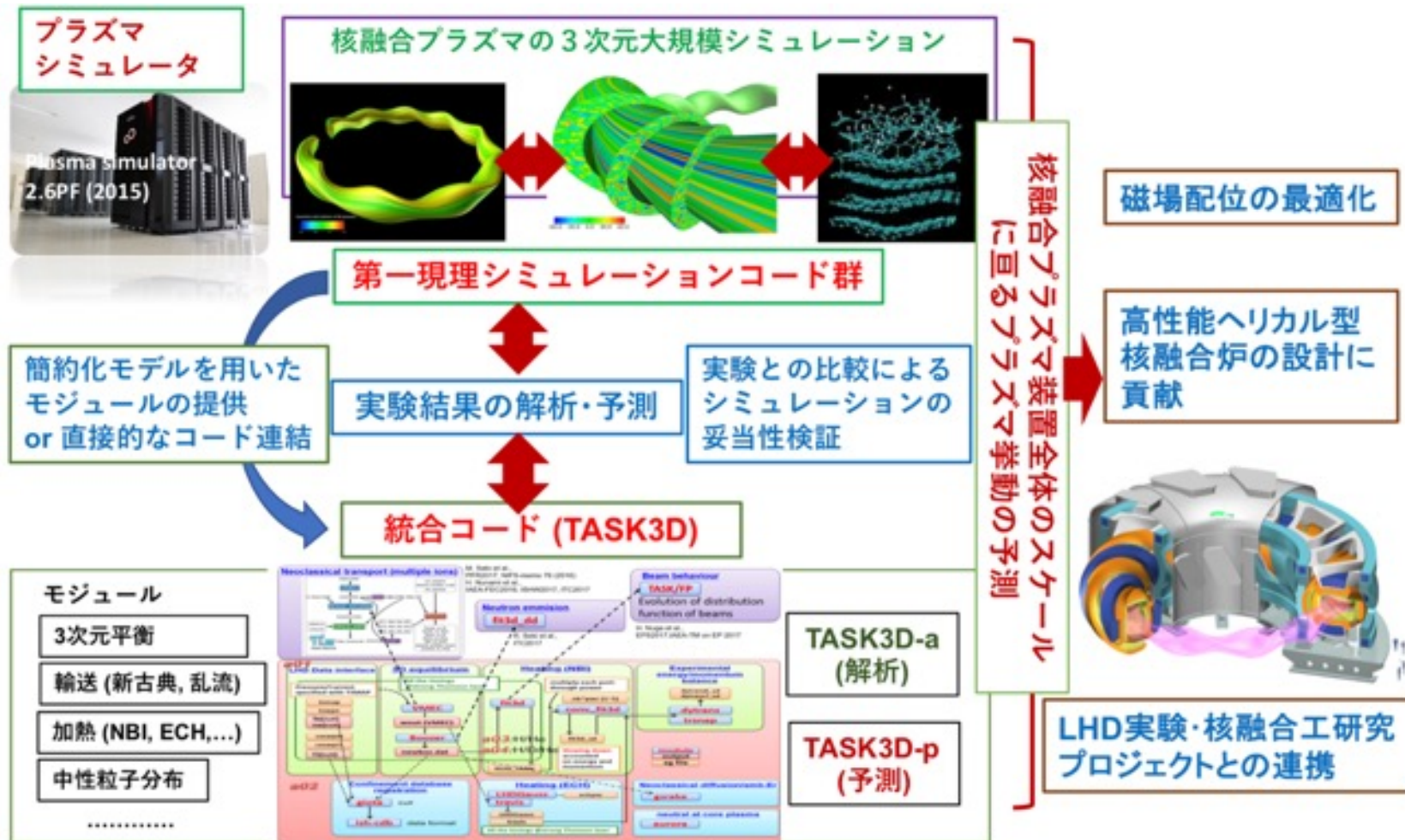
National Institute for Fusion Science
Nagoya University



数値実験炉研究プロジェクト

“炉心プラズマから周辺プラズマまでのプラズマの挙動を解明し、その理論体系化を進めるとともに、ヘリカル型磁場閉じ込め装置全体のプラズマ挙動を予測できる数値実験炉の構築を目指したシミュレーション研究を推進”

(2019年度 外部評価報告書)



シミュレーションコード群

- 所内メンバー中心で開発したコード

(2019 外部評価報告書)

表 3.2.1.1-1 シミュレーションコード一覧1 (現所内メンバーが中心に開発したコード (アルファベット順))

名称	目的	手法
ACVT	固体材料へ粒子を照射した場合の反射率及びスパッタリング率、並びに、入射粒子の侵入分布及び材料の構造変化の評価	二体衝突近似法
ACVT-MD	固体材料へプラズマ粒子が連続照射した場合の反射やスパッタリング現象及び材料の構造変化を解明する	分子動力学法及び二体衝突近似法によるハイブリッドシミュレーション
AIscope	分子動力学及び二体衝突近似で計算した粒子の軌跡を可視化する。また、密度汎関数法で得られた電子密度分布を可視化する。	ポリゴンによるレンダリング、ポイントクラウドによる高速レンダリング、3D テクスチャによる疑似レイキャスティング、3D printing 向けのデータ出力機能の実装。
AURORA	電磁流体コードと弱電離プラズマを記述する流体コードに電流不安定性による微視的挙動を計算するための開放系粒子コードを連結させ、さらに、同不安定性によって加速された粒子による電離効果を取り入れた連結階層シミュレーションコード。	有限差分法による MHD コードと Particle in Cell 法による開放系静電粒子コードを、連結階層アルゴリズムにより連結。粒子コードでは、改良型定電流モデルを用いている。
AutoKMC	材料中の拡散経路自動探索	粒界構造やアモルファス構造など、非結晶部分における不純物拡散の経路を自動的に算出するコード。GLIPS コードによる局所 MD において Nudged Elastic Band(NEB) 計算を行う。
BCA-MD-KMC	ヘリウムプラズマ照射によるタングステン表面のファズ構造形成過程を再現し、そのメカニズムを解明するためのコード。MD-MC の発展形。	ヘリウム原子のタングステン材料内部拡散をランダムウォーク (動的モンテカルロ法) で、ヘリウムの凝集 (バブル) によるタングステン材料の歪みを分子動力学 (GLIPS コード) で、ヘリウムの入射過程を二体衝突近似 (BDOG コード) で解く三連ハイブリッド手法。

BDOG	エネルギー粒子の材料への入射現象に関して、反射や弾き出し、スパッタリング等を計算する。	二体衝突近似法に領域分割法による並列化を施したものを。
CAP	トーラスプラズマにおける燃料補給用ペレットの溶突過程及びそれにより生じる高密度プラズモイドの振る舞いの解析	CIP法を用いた固体の溶突過程を含むMHDコード
DAMA	分子動力学に必要な原子間相互作用ポテンシャルモデルに関して、ポテンシャル関数の数式をLATEX様のテキスト手入力するだけで、解析的な微分操作を自動的にに行い、かつ、計算コードを自動生成するコード。メタコンパイラと呼んでいる。	これまでの分子動力学コード開発で得たノウハウを使い、人間がやる作業を、全てコンピュータにやらせたもの。基本的にはチェーンルールによる微分を文字列処理で行い、ループ入れ替え・ループ融合等を行う。出力されたコードは分子動力学フレームワークコードであるGLIPSと組み合わせ実行される。
EMGK-3D	電磁的ジャイロ運動論方程式を位相空間3次元で解くことにより、磁場閉じ込めプラズマ乱流の基礎物理を理解する。	4次のルンゲ・クッタ
fiscof1	高強度レーザーと高密度プラズマの相互作用	重み付き粒子を用いた相対論的電磁粒子コード
fiscof2	高強度レーザーと高密度プラズマの相互作用	重み付き粒子を用いた相対論的電磁粒子コード
flowvm	VMECの三次元平衡と1次元実験データから、プラズマフローのトロイダル成分とポロイダル成分の三次元分布を計算する	HAMADA座標構築による座標変換を用いて、フローの非圧縮性及び垂直成分のポテンシャル表現を仮定した式から計算する。MIPSコードに接続。

シミュレーションコード群

- 所内メンバー中心で開発したコード

(2019 外部評価報告書)

FORTEC-3D	磁場閉じ込めトラスプラズマにおける荷電粒子（イオン、電子）のガイディングセンター運動とクーロン衝突によって生じるプラズマの輸送（新古典輸送）。プラズマ全領域を有限軌道幅効果を含めて解くグローバルコード。	ドリフト運動論方程式に基づく、2-weight δf モンテカルロ法
FORTEC-MPS	FORTEC-3Dを多粒子種プラズマに適用可能にした拡張版。	ドリフト運動論方程式に基づく、 δf モンテカルロ法
GKMC	固体材料へプラズマ粒子を連続照射した場合の材料の構造変化を解明する	動的モンテカルロ法
GKV+	磁場閉じ込めトラスプラズマにおける乱流輸送のシミュレーション（多粒子種、VMEC平衡、エントロピー伝達解析を含む）	ジャイロ運動論方程式に基づく δf フラックス・チューブ・シミュレーション
GKV+/EM	電磁的ジャイロ運動論方程式を位相空間5次元で解くことにより、磁場閉じ込めトラスプラズマにおける、電磁的ITG、TEM、KBMなどの微視的乱流による輸送を理解する。	4次のルング・クッタ・ジル
GKV+/EMH	電磁的ジャイロ運動論方程式（ただし電子は流体方程式）を位相空間5次元で解くことにより、磁場閉じ込めトラスプラズマにおける、電磁的ITG、KBMなどの微視的乱流による輸送を理解する。	4次のルング・クッタ・ジル
GKV-bundle	磁場閉じ込めトラスプラズマにおける乱流輸送のシミュレーション（非軸対称配位における巨視的径電場効果を含む）	ジャイロ運動論方程式に基づく δf フラックス・チューブ・シミュレーションを複数連結

GKV-X	トロイダルプラズマ（特にLHDなどの非軸対称プラズマ）装置で用いられる実際の磁場配位における異常輸送の評価・予測を行う。	ジャイロ運動論方程式に基づき、5次元位相空間上の分布関数の時間発展を、スペクトル法、有限差分法、ルング・クッタ・ギル法を用いて解く。
GLIPS	固体材料へプラズマ粒子を連続照射した場合の反射やスパッタリング現象及び材料の構造変化を解明する	分子動力学法
impact-3d	レーザー核融合における爆縮の流体シミュレーション	圧縮性非粘性の流体方程式を TVD スキームで計算する。境界条件として Immersed Boundary Method を使っている。
KARABA	BCA-KMC ハイブリッド法	プラズマイオン照射を二体衝突近似 (BCA) で解き、材料中の拡散は動的モンテカルロ (KMC) で解く。BCA 部分の計算では BDOG コードを組み合わせている。
KEATS	磁場閉じ込めトラスプラズマにおける荷電粒子（イオン、電子）のガイディングセンター運動とクーロン衝突によって生じるプラズマの輸送（新古典輸送）	ドリフト運動論方程式に基づく、2-weight δf モンテカルロ法
LOF3D	FORTEC-3D から径方向ドリフト効果を除いた radially-local 近似の新古典輸送を計算する。ドリフト運動論方程式に基づく、 δf モンテカルロ法。	磁気ドリフト項の接線成分の有無を切り替え、異なる local 近似モデルでの新古典計算が可能。
kmc	固体材料へプラズマ粒子を連続照射した場合の材料の構造変化を解明する。	動的モンテカルロ法
MARIS	磁気リコネクション過程をマクロな物理とミクロな物理が複雑に絡み合った階層横断現象として完全に理解することを目指す。	シミュレーションの実空間をマクロ階層とミクロ階層に分割して、同時にかつ自己無撞着に解く。

シミュレーションコード群

- 所内メンバー中心で開発したコード

(2019 外部評価報告書)

MD-MC	ヘリウムプラズマ照射によるタングステン表面のファズ構造形成過程を再現し、そのメカニズムを解明するためのコード。	ヘリウム原子のタングステン材料内部拡散をランダムウォーク(モンテカルロ法)で解き、ヘリウムの凝集(バブル)によるタングステン材料の歪みを分子動力学(GLIPSコード)で解くハイブリッド手法。
MEGA	高エネルギー粒子と熱イオンの運動論的效果を考慮した環状プラズマにおける運動論的MHD不安定性とそれによる高エネルギー粒子輸送。	ジャイロ運動論方程式に基づく粒子シミュレーションとMHDシミュレーションを連結、4次精度有限差分と4次Runge-Kutta時間積分
MUTSU/MINOS (MINOS から名称変更)	磁場閉じ込めトラスプラズマにおけるMHD不安定性の成長と飽和を高精度で数値シミュレーションすること(この基礎研究のための矩形領域でのシミュレーションを含む)を目的とする。	ジャイロ粘性項、Hall項を含む拡張MHD方程式を8次精度コンパクト差分法もしくは4次精度中心差分法とルンゲ・クッタ・ジル法で解く。Large Eddy SimulationのためのSGS項を含む。非直交座標でトラスプラズマを解く場合(MUTSU/MINOS)の他に、直角座標でMHD、圧縮性Navier-Stokes方程式を解く場合などがあり、それぞれMUTSU/cMHD3D、MUTSU-cNS3Dなどと呼称している。
MUTSU-T3	磁化されたプラズマの不安定性や乱流問題について、周期境界条件化で高精度のシミュレーションを行い、様々な物理的な機構の解明や、LESに必要とされるモデル作成の基礎データの取得することを目的とする。	3次元高速フーリエ変換に基づく擬スペクトル法とルンゲ・クッタ・ジル法を使用する。シミュレーション対象とする方程式(拡張MHD=cXMHD、圧縮性Navier-Stokes=cNS3D)等に応じてMUTSU-T3/cXMHD、MUTSU-T3/cNS3Dなどと呼称する。
MIPS	環状プラズマにおけるMHD不安定性の非線形シミュレーション	圧縮性抵抗性非線形磁気流体力学方程式、4次精度有限差分と4次Runge-Kutta時間積分
NORM	ヘリオトロンプラズマにおけるMHD線型安定性及び非線形ダイナミクス解析	簡約化MHD方程式に基づいてプラズマの時間発展を追跡する。

p3bd/up3bd	磁場閉じ込めプラズマの周辺領域(SOLなど)等におけるプラズマの挙動を、荷電粒子の運動とそれらが作る電場の時間発展を自己無撞着に解くことにより、第一原理的にシミュレートする。	Particle in Cell法による静電粒子シミュレーション
PAMCADE	非接触ダイバータプラズマの形成過程や挙動を、荷電粒子の運動とそれらが作る電場の時間発展、さらに、中性粒子と荷電粒子の衝突(原子分子過程)や荷電粒子同士のカロン衝突を自己無撞着に解くことにより、第一原理的にシミュレートする。	モンテカルロ衝突法を採り入れた、Particle in Cell法に基づく静電粒子シミュレーション
PASMO	開放系境界条件における磁気リコネクション現象のシミュレーション	陽解法に基づく電磁粒子シミュレーション法。3次元版(3DPASMO)と空間2次元速度3成分版(2DPASMO)がある。どちらのコードもMPIを用いて領域分割による分散並列化とスレッド並列(OpenMPもしくは自動並列)を行っている。3DPASMOでは動的負荷分散ライブラリ OhHelpとIn-situ可視化ライブラリ VISMOを導入している。
PICS1/PICS2	磁場を伴う壁近傍の無衝突シースプラズマの解析を目的とした1次元及び2次元の静電粒子コード。2次元版のPICS2は折れ線近似による任意壁形状を扱うことができる。	4次のルンゲ・クッタ法による粒子追跡と、Red-Black SOR法によるPoissonソルバーを用い、OpenMPによる並列化を行っている。

シミュレーションコード群

- 所内メンバー中心で開発したコード

(2019 外部評価報告書)

PoissonFFT2	2次元/3次元矩形領域分割型のParticle-in-Cellプログラムや2流体シミュレーションプログラムにおいて電場の静電成分(静電位)を計算するために、Poisson方程式を解く。	並列高速フーリエ変換(FFT)ライブラリを利用して、微分型/差分型のPoisson方程式を解く。各種境界条件に対応可能であり、緩和関数機能も有する。
R2FLUID-2D	二次元二流体方程式を解くことにより、磁場閉じ込めプラズマにおける、微視的乱流と巨視的MHD不安定性の多階層相互作用基礎物理を理解する。	4次のルンゲ・クッタ
R2FLUID-3D	簡約化二流体方程式を解くことにより、磁場閉じ込めトラスプラズマにおける、ITG、KBMなどの微視的乱流と、巨視的MHD不安定性を同時に計算し、その多階層相互作用の結果生じる輸送を理解する。	2次の予測子修正子法
REFES	ヘリカルトロイダルプラズマにおける、背景プラズマと電場ダイナミクスの解析	拡散方程式を空間差分を用いて解析し、空間発展は予測子修正子法により行う。
TOKI	大規模粒子シミュレーションで生成される粒子データを圧縮するライブラリ。	粒子の軌道データを時間方向について補間関数で記述して、粒子軌道データそのものを保存する代わりに補間関数の係数を保存することで、データを圧縮する。
Virtual LHD (vlhd)	MHDシミュレーションによる平衡プラズマのパーティクルリアリティ装置による可視化	4次Runge-Kutta-Huta法による磁力線及びドリフト粒子軌道の追跡、Marching cubes法によるプラズマ圧力の等値面計算、磁力線のPoincare Mapの表示、ダスト粒子の実験観測データの表示、LHD CADデータと統合VR可視化も可能。CAVE型VR装置 CompleXcopeやヘッドマウントディスプレイ(HMD)での表示が可能。

シミュレーションコード群

- 所外メンバー中心で開発したコード

(2019 外部評価報告書)

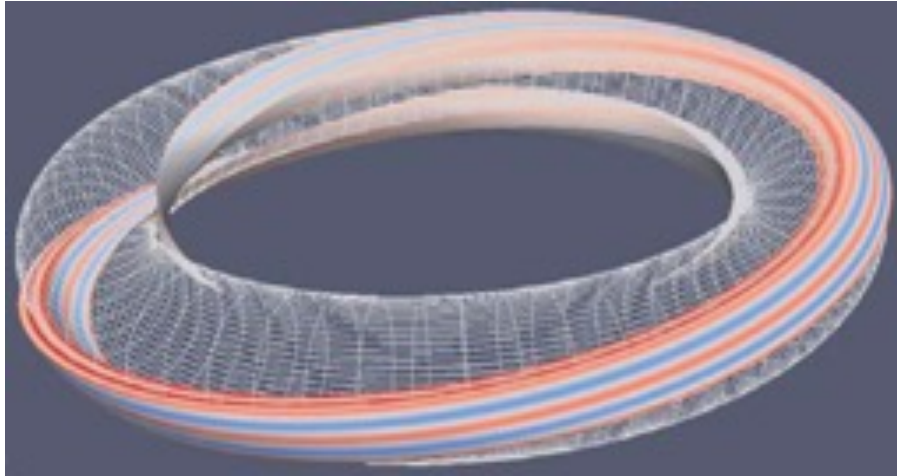
表 3.2.1.1-2 シミュレーションコード一覧2 (現所外メンバーが中心に開発したコード (アルファベット順))

名称	目的	手法
EMC3-EIRENE	エルゴディック領域及び SOL/ダイバータ領域におけるプラズマ、中性ガス (H/D/T)、不純物の輸送解析と定常分布解析。	EMC3: プラズマ (電離不純物含む) の Braginskii 方程式をフォッカー-プランク方程式に読み替え、定常解をモンテカルロ法で求める。3次元形状及びエルゴディック領域を扱うことができる。EIRENE: 中性の水素分子及び原子の定常分布をモンテカルロ法で求める。
ERO/ERO2.0	プラズマ対抗壁周辺の不純物輸送及び表面への堆積分布の解析。ERO2.0は ERO の後継に位置付けられ、壁形状等に高い自由度を持つ。	中性及びイオン化した不純物粒子を運動方程式にしたがって追跡し、定常分布をモンテカルロ法で求める。表面での材料混合及び堆積や反射等のモデルを含む。
FLARE	EMC3-EIRENE の計算グリッド構築を目的としたツール群。トカマク及びステラレータに対応する。EFIT の出力する G-file や HINT の磁場データ等を読み込むことができる。	ボアンカレプロットを利用して基準ポロイダル断面のグリッドを作り、磁力線追跡によって必要なトロイダル範囲の空間グリッドを作成する。トカマクに特化した作成アルゴリズムを含む。
GSRAKE	ヘリカルプラズマ中の新古典粒子、熱フラックスの径電場依存性を計算し、両極性条件を求める。	リップル平均化した局所近似・モノエネルギー近似の簡約化ドリフト運動論方程式をもとに導出された、定常解の分布関数のフーリエ展開係数を求める式を数値的に解く。
Hybrid_scalar	乱流によるパッシブスカラー輸送解析のための大規模直接数値計算を高効率に行うプログラム。	非圧縮流体場にはスペクトル法を用い、スカラー場には結合コンパクト差分を用いる
KNOSOS	バウンス平均法に基づく局所近似ドリフト運動論方程式を解き、低衝突領域におけるヘリカル系プラズマの新古典径方向輸送を高速に解く。	磁力線に沿ったバウンス平均を数値積分で評価。磁気面上のポテンシャル非一様性と磁気ドリフトの接続成分、磁気シアの効果を取り入れた計算が可能。

OpenMX	電子物性計算、MD用ポテンシャルモデルの構成、及び kMC 用確率モデルの構成のためのエネルギー計算。	密度汎関数法
PAVANE	従来のプラズマシミュレーション・コードの高解像度化を、計算資源を節約しながら簡便に実現できるように設計された汎用フレームワーク	適合格子細分化法 (AMR法) に基づき、高い解像度を必要もしくは不要とする空間領域を、複数の計算格子の集合 (ブロック) を自己相似的に細分化もしくは粗視化する。
SP-CCD hybrid code	大規模の乱流シミュレーションにおいて、スペクトル法の高解像度を活かしつつ、並列化効率を高め、通信負荷を減らすことを目的として開発を行った。	ポアソン方程式を解かなければならない変数については擬スペクトル法を、ポアソン方程式が不要の変数については結合コンパクト差分法を利用するハイブリッド手法を採用した。
transfer-fourierShellf	擬スペクトル法を用いて、非線形相互作用によるエネルギー伝達の大きさを、シェルごとに分けて見る。	擬スペクトル法、すなわち FFT を用いて物理空間で関数の積の計算を、波数空間で微積分演算を行う。
VISMO	In-situ 可視化ライブラリ	シミュレーションの実行とともにデータの可視化を行うライブラリ。開発言語は Fortran90。可視化手法として、粒子・等値面・スライス・流域・矢印を実装。領域分割で MPI 分散並列化したコードに対応。可視化オブジェクトの点群データを生成する。専用ビューワで点群データを表示して、視点移動や可視化オブジェクトの拡大・縮小表示ができる。
VFIVE	シミュレーションデータのパーチャルリアリティ装置による可視化	4次 Runge-Kutta-Hutta 法による流域線追跡、Marching cubes 法による等値面計算、Volume Rendering 法によるスカラー場の表示。
VMEC	三次元静的 MHD 平衡を計算する。	MHD 平衡を逆問題として解く。スペクトル法を用い、2階リチャードソン法に基づいた繰り返し計算を行って、楕円型変微分方程式の収束解を求める。

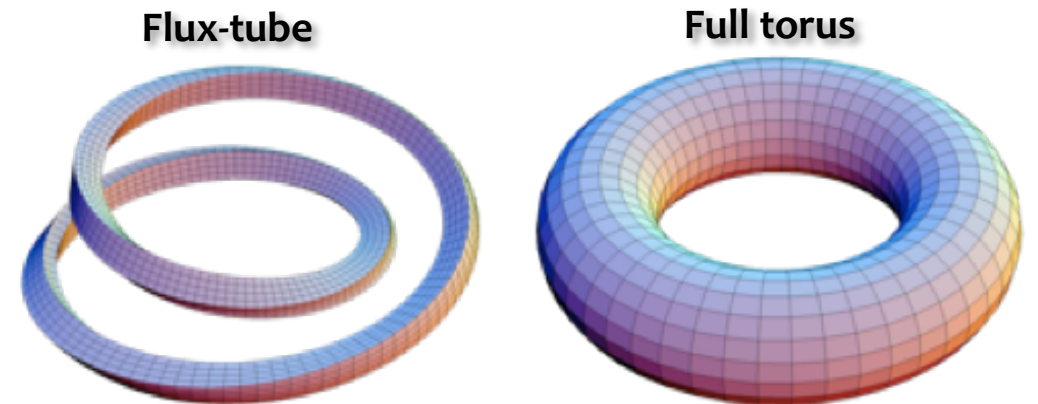
例: GKVコード

- 局所フラックスチューブ配位

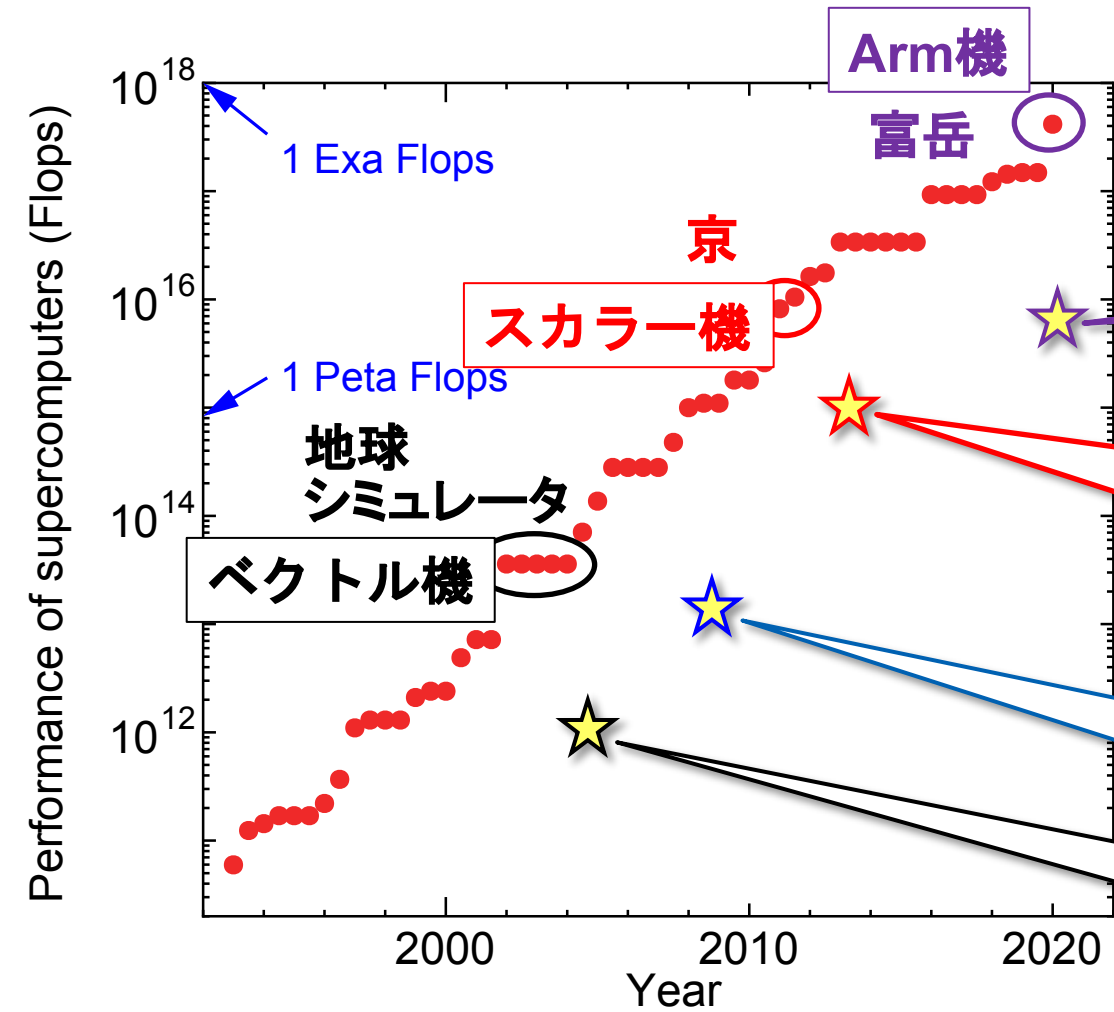


Watanabe, et al., Nuclear Fusion 46, 24 (2005)

- Directly solving the gyrokinetic eqs. in **5-D phase space**
- Field-aligned coordinates so as to accurately resolve ballooning-type mode structure.
- High velocity-space resolution

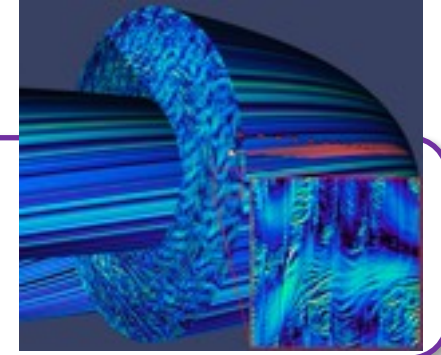


HPCの進展とGKV



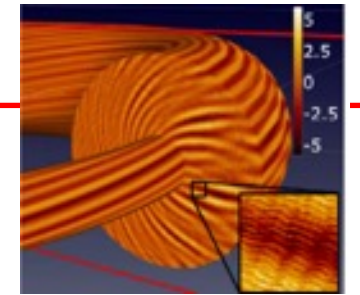
Multi-scale turbulence simulations for burning plasma

cf. Maryama, et al., (2021)



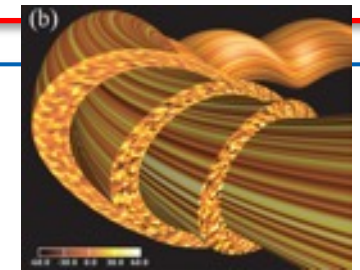
Multi-scale turbulence simulations from ion to electron scales

cf. Maryama, et al., Phys. Rev. Lett. (2015)



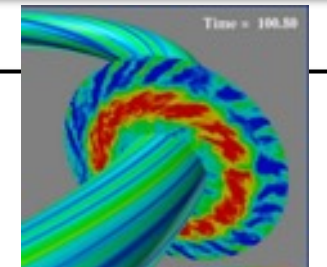
Ion-scale turbulence simulations in complex LHD plasma

cf. Nunami, et al., Phys. Plasmas (2012)

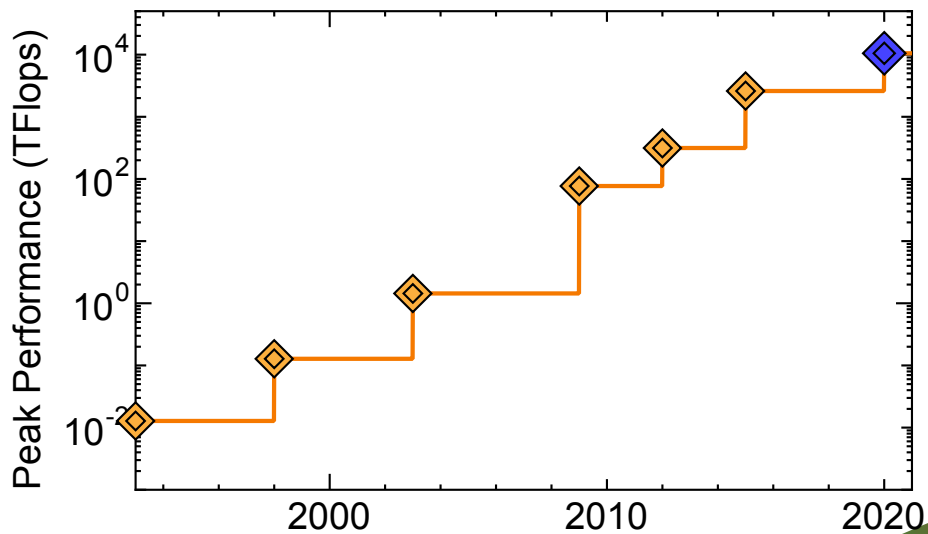


Ion-scale turbulence simulations in simple Tokamak plasma

cf. Watanabe, et al., Nucl. Fusion (2006)



プラズマシミュレータの進展



ベクトルエンジン機

NEC
SX-Aurora TSUBASA A412-8
“雷神 (Raijin)”
10.5PF, 202TiB
2020 – 2025

スカラー機

FUJITSU
PRIMEHPC FX100
2.6PF, 81TB
2015 – 2020

HITACHI
SR16000/M2
315TF, 40TB
2012 – 2015

HITACHI
SR16000/L2
77TF, 16TB
2009 – 2012

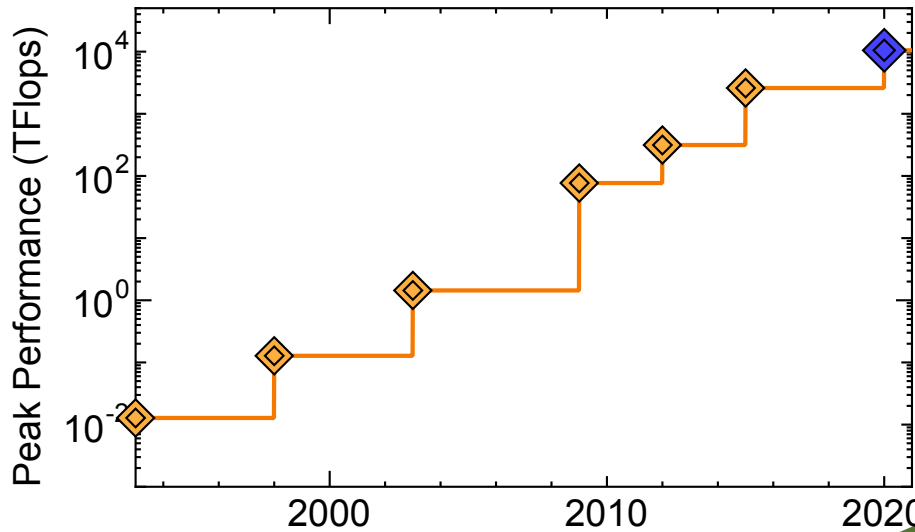
NEC SX-7/160M5
1440GF, 1280GB
2003 – 2009

ベクトル機
NEC SX-4/64M2
128GF, 32GB
1998 – 2003

NEC SX-3/24R
12.8GF, 4GB
1993 – 1998



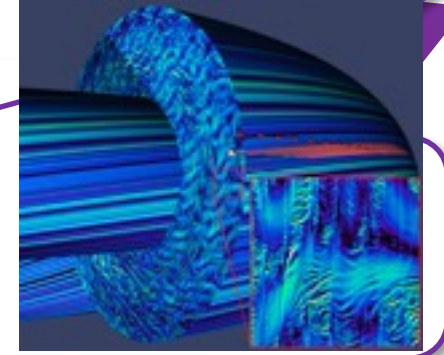
プラズマシミュレータの進展 + GKV



ベクトルエンジン機

NEC

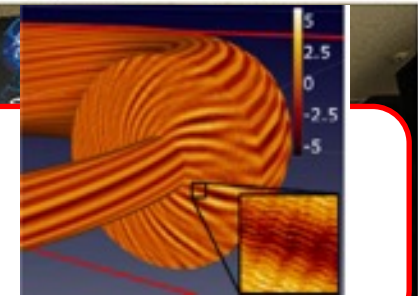
Multi-scale turbulence simulations for burning plasma



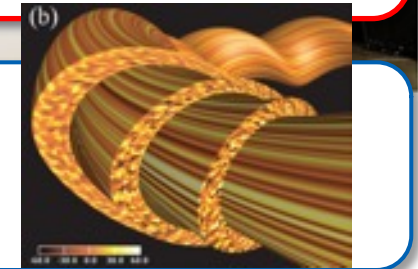
スカラー機

FUJITSU

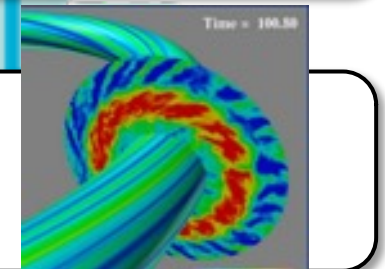
Multi-scale turbulence simulations from ion to electron scales



Ion-scale turbulence simulations in complex LHD plasma



Ion-scale turbulence simulations in simple Tokamak plasma



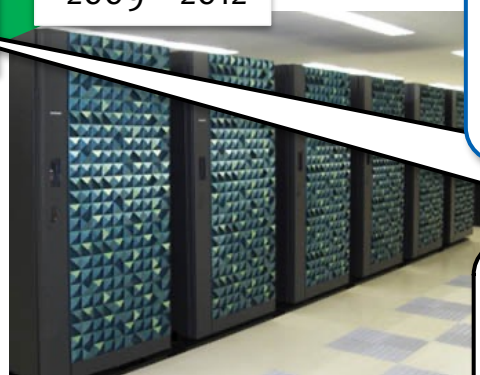
ベクトル機

NEC SX-4/64M2
128GF, 32GB
1998 - 2003

NEC SX-7/160M5
1440, 1280GB
2003 - 2009

HITACHI SR16000/L2
77TF, 16TB
2009 - 2012

HITACHI SR16000
315TF, 16TB
2012 - 2015



NEC SX-3/24R
12.8GF, 4GB
1993 - 1998

プラットフォームとしてのシミュレーション・コード群

- 豊富なコード、パッケージが既にある
- 核融合プラズマのみならず、異分野へも適用事例も多し
- 各世代のプラズマシミュレータをはじめ、多くの異なる計算機アーキテクチャに殆どが対応済み

⇒ プラズマシミュレータとセットでのコード利用環境

⇒ 共同研究者側で調達した計算機でのコード利用環境

シミュレーション・コード群を、プラットフォーム資産として、戦略的に活用していただけるはず。