

ジャイロ運動論的シミュレーションコードGKVを用いた微視的不安定性・乱流輸送解析

前山伸也

名大理

GKV講習会
2019年1月17日

Contents

- GKVのコード構造
- 数値パラメータ、物理パラメータ、計算機環境の設定
- コンパイルおよび実行
- 出力データ構造
- ポスト処理
- まとめ

以下、**ユーザに編集してもらう点は青字**、**注意点は赤字**で示します。

実習のための下準備

始めに /tmp/GKV_Training_190117/ をホームディレクトリにコピー。

```
cp -r /tmp/GKV_Training_190117/ ~/
```

ソースコード・平衡データを展開して、サンプル平衡データを所定の場所にコピー

```
cd GKV_Training_190117/
```

```
tar xzvf gkvp_f0.53.tar.gz
```

```
tar xzvf vmec_data.tgz
```

```
cp vmec_data/lhd_inward_Ntht3/metric_boozer.bin.dat gkvp_f0.53/run/input_vmec/
```

プラズマシミュレータでFFTWを有効化する。

```
module load fftw-fx
```

プラズマシミュレータでgnuplot5.0を有効化するために、**エイリアスを追加**。

cshの場合、~/.cshrcに `alias gnuplot /usr/local/gnuplot/5.0.1/bin/gnuplot`

bashの場合、~/.bashrcに `alias gnuplot="/usr/local/gnuplot/5.0.1/bin/gnuplot"`

※エイリアスの追加の仕方がわからない場合、資料18ページのfig_stdoutで利用するだけなので、fig_stdout/make_pdf.cshの冒頭に直接

`alias gnuplot /usr/local/gnuplot/5.0.1/bin/gnuplot` と書き込んでもよい。³

GKVのコード構造(バージョンgkvp_f0.53)

gkvp_f0.53/

README_for_namelist.txt 簡単な説明書き

Version_memo.txt 最近の更新履歴

src/ ソースファイル群

gkvp_f0.53_header.f90 解像度、MPIの設定モジュール

gkvp_f0.53_out.f90 標準データ出力モジュール

lib/ 乱数・ベッセル関数ライブラリ呼び出しモジュール

extra_tools/ ポスト処理ツール等

fig_stdout.tar.gz アスキーデータのPDF化

v30diag.tar.gz バイナリデータの解析

run/ コンパイルおよび計算実行

gkvp_f0.53_namelist 物理パラメータの設定

sub.q バッチジョブ用スクリプト(計算機依存)

shoot ジョブ投入スクリプト(計算機依存)

Makefile コンパイル情報(計算機依存)

backup/ 各計算機向けsub.q,shoot,Makefileのバックアップ

input_vmec/ VMEC平衡データ

input_eqdsk/ EQDSK平衡データ

GKVで扱える問題

ある平衡の下で、微視的不安定性や乱流揺動、粒子・熱輸送の局所解析。

1. 線形解析

- 線形モードの成長率、実周波数、揺動間のクロスフェーズなどを調べる。
- 線形モードの独立性から、特定の波数のみ解析するため計算は早い。
- 非線形飽和機構が入っていないので、振幅の絶対値は求まらない。

2. 非線形解析

- 揺動スペクトル、粒子・熱輸送、その他諸々の乱流揺動解析を行う。
- 乱流混合を扱うために多数のモード間の非線形結合を解く必要があり、計算に時間がかかる。要求解像度も問題に依るので、数値的健全性確保のためにエントロピーバランスやスペクトルの収束性確認が必要。

今日の実習の問題設定

LHD実験の密度・温度・磁場計測などから、解析したいプラズマの平衡配位が求まっている(VMEC形式)。この平衡下で、微視的不安定性が存在するか線形解析したい。

1. 解析する半径位置を決めて、実験的な物理パラメータをGKVの入力パラメータに換算し、run/gkvp_f0.53_namelistに入力する。また、GKVで読み込めるように加工した磁場配位データ(VMEC形式→BZX)を用意する。
2. src/gkvp_f0.53_header.f90に計算格子数およびMPI並列数を入力する。
3. バッチジョブスクリプトsub.qを設定する。
4. ジョブ投入スクリプトshootにディレクトリの設定をする。
5. コンパイルし、計算を実行。
6. 出力データを解析する。(ポスト処理ツールの利用)

※非線形解析も計算タイプ”nonlinear”とし高解像度化する位で同様の手順。

1. 実験→GKV換算、namelistへの入力、平衡の加工

実験計測より、

- 局所パラメータを算出
- MHD平衡を構築

GKVで解析するため、

- 実験→GKVパラメータ換算(規格化)
- 対応する物理パラメータのnamelistへの入力
- MHD平衡からGKVで必要となるメトリックデータへの加工

先の仲田さんの説明でできるようになったはずなので、今日の実習では既に用意済み。

run/gkvp_f0.53_namelist

物理パラメータのnamelist

run/input_vmec/metric_boozzer.bin.dat

VMEC磁場配位から構築したメトリックデータ

1. 実験→GKV換算、namelistへの入力、平衡の加工

run/gkvp_f0.53_namelist

念のため計算実行にかかわる部分だけおさらいすると、
&calct **calc_type="linear"**, 計算タイプ linear / nonlinear

z_bound="outflow",

z_filt="off",

z_calc="cf4",

art_diff=0.d0,

num_triad_diag=0, &end

&triad mxt = 0, myt = 0/

&equib **equib_type = "vmec"**, &end

平衡磁場モデル analytic / s-alpha / vmec / eqdsk

...

&runlm **e_limit = 60.d0**, &end

計算実行の実時間[秒]

× **tend = 200.d0**,

シミュレーション上の上限時間

dtout_fxv = 10.d0,

データ出力の時間間隔1

dtout_ptn = 0.1d0,

データ出力の時間間隔2

dtout_eng = 0.1d0,

データ出力の時間間隔3

dtout_dtc = 0.1d0, &end

自動時間刻み幅の調整間隔

...

1. 実験→GKV換算、namelistへの入力、平衡の加工

run/gkvp_f0.53_namelist

```
...
&nperi n_tht = 3,           磁力線方向ボックスサイズ (ポロイダル角で  $\pm n\_tht * \pi$ )
      kymin = 0.05d0,       磁力線ラベル方向ボックスサイズ  $ly = \pi / kymin$ 
      m_j = 1,             半径径方向ボックスサイズ  $lx = \pi / kxmin$ 
      del_c = 0.d0, &end       $kxmin = |2 * \pi * s\_hat * kymin / m\_j|$ 
...
&vmecp s_input = 0.5d0,    解析したい小半径位置 ( $0 < s\_input < 1$ )
      nss = 501,           ※ nss = nrho (in BZX)
      ntheta = 384,       ※ ntheta = ntht (in BZX) = 2 * global_nz
      nzeta = 0, &end
...

```

2.src/gkvp_f0.53_header.f90に計算格子数およびMPI並列数を入力する。

```
!-----  
! Dimension size (grid numbers)  
!-----  
! Global simulation domain  
! in x, y,z,v,m (0:2*nxw-1, 0:2*nyw-1,-global_nz:global_nz-1,1:2*global_nv,0:global_nm)  
! in kx,ky,z,v,m ( -nx:nx,0:global_ny,-global_nz:global_nz-1,1:2*global_nv,0:global_nm)
```

src/gkvp_f0.53_header.f90

```
integer, parameter :: nxw = 2, nyw = 16
```

```
integer, parameter :: nx = 0, global_ny = 10    ! 2/3 de-aliasing rule
```

```
integer, parameter :: global_nz = 192, global_nv = 16, global_nm = 7
```

```
integer, parameter :: nzb = 3, & ! the number of ghost grids in z
```

```
                nvb = 3    ! the number of ghost grids in v and m
```

```
!-----  
! Data distribution for MPI  
!-----
```

```
integer, parameter :: nprocw = 1, nprocz = 16, nprocv = 2, nprocm = 2, nprocs = 1
```

2.src/gkvp_f0.53_header.f90に計算格子数およびMPI並列数を入力する。

ここで、

nx		kxモード数	- nx:nx
global_ny		kyモード数	0:global_ny
(さらにnxw>nx*3/2, nyw>global_ny*3/2となるように設定。)			
global_nz		磁力線方向座標	-n_tht*pi < zz < n_tht*pi を -global_nz:global_nz-1で離散化
global_nv		磁力線方向速度	-vmax<vl<vmaxを1:2*global_nvで離散化
global_nm		磁気モーメント	0<mu<vmax^2/2を0:global_nmで離散化

nprocw, nprocz, nprocv, nprocm, nprocs はky,zz,vl,mu方向および粒子種のMPI領域分割数。

ただし、

- ※(global_ny+1)/nprocw, global_nz/nprocz, global_nv/nprocv, (global_nm+1)/nprocmは整数。
- ※nprocsは扱う粒子種数と一致。

3. バッチジョブスクリプトsub.qを設定する。

run/sub.qでMPI/OpenMP並列数を指定する。

run/sub.q

```
#PJM -L "rscunit=fx"
```

```
#PJM -L "rscgrp=X24"
```

```
#PJM -L "node=8"
```

```
#PJM -L "elapse=00:10:00"
```

```
#PJM -j
```

```
#PJM --mpi "proc=64"    ※総MPIプロセス数はnprocw*nprocz*nprocv*nprocm*nprocs
```

```
#### --mpi "rank-map-hostfile=myrankmap"
```

```
#PJM -g 18291
```

```
## Note that Max. core num. per 1 node on PS is 32.
```

```
setenv PARALLEL 4          # Thread number for automatic parallelization
```

```
setenv OMP_NUM_THREADS 4  # Thread number for Open MP
```

※プラズマシミュレータでは $\text{proc} * \text{OMP_NUM_THREADS} = \text{node} * 32$ とする。

以下は不変。

4. ジョブ投入スクリプトshootにディレクトリを設定をする。

run/shoot

```
##### Environment setting
set DIR=/data/Ing/maeyama/gkv_training/linear_test_LHD 実行後のデータ出力ディレクトリ
set LDM=gkvp_mpifft.exe ※maeyama→個別のユーザ名に書き換えてください。
set NL=gkvp_f0.53_namelist
set SC=pjsub
set JS=sub.q
## For VMEC, set VMCDIR including metric_boozer.bin.dat
set VMCDIR=./input_vmec BZXで生成したVMEC平衡データのあるディレクトリ
## For IGS, set IGSDIR including METRIC_{axi,boz,ham}.OUT
#set IGSDIR=./input_eqdsk
```

以下は不変。

5. コンパイルし、計算を実行

コンパイルする。

```
cd gkvp_f0.53/run/
```

```
(module purge)
```

```
(module load tcsuite-fx fftw-fx)
```

```
(make clean)
```

```
make
```

} 省略可能

計算を実行する。以下の形式でステップジョブ実行される。

```
./shoot START_NUM END_NUM (JOB_ID)
```

例) シングルジョブ投入 (*.001) ./shoot 1 1

 シングルジョブ投入 (*.002) ./shoot 2 2

 ステップジョブ投入 (*.003-*.005) ./shoot 3 5

 継続ステップジョブ投入 ./shoot 6 7 11223

(*.005まで計算するジョブJOB_ID=11223がキュー中にあり、
それに続けて*.006-*.007のジョブを実行させようとした。)

5. コンパイルし、計算を実行

正常に計算が実行されれば、run/shootで設定した出力ディレクトリ
(今回の例では `/data/lng/maeyama/gkv_training/linear_test_LHD/`)
に以下のデータが書き出される。

log/ 計算ログ

cnt/ 継続計算用バイナリデータ

fxv/ 分布関数バイナリデータ(いくつかの磁力線方向座標位置で)

phi/ ポテンシャル、流体モーメント、エントロピーバランスに関するバイナリデータ

hst/ アスキー形式の標準出力

その他: 実行環境バックアップのためのコピー

Appendix A. GKVの出力データ一覧 にまとめた。

さらに詳細は、ソースコード `src/gkvp_f0.53_out.f90` を参照。

6. 出力データを解析する。

出力データを解析するには、

6-a) 自力で何とかする。

- GKVの出力データは一覧にまとめてあるので、後は適当にポスト処理する。
- アスキー形式の標準出力くらいなら簡単。
- MPI領域分割されたバイナリデータを読み込むのは結構手間。

※アスキー形式の標準出力についていろいろとプロットしてみましよう。

コードのオープン化にあたり、ポスト処理ツールとして以下の2つを提供。

6-b) hst/のアスキー標準出力を一括でPDF化するためのスクリプト `fig_stdout`

6-c) phi/などのバイナリデータを解析するためのポスト処理プログラム `diag` (割愛)

※ `fig_stdout` を実行してみましよう。

6-a). hst/のアスキー標準出力をプロットする。

例として、`cd /data/Inp/maeyama/gkv_training/linear_test_LHD/`

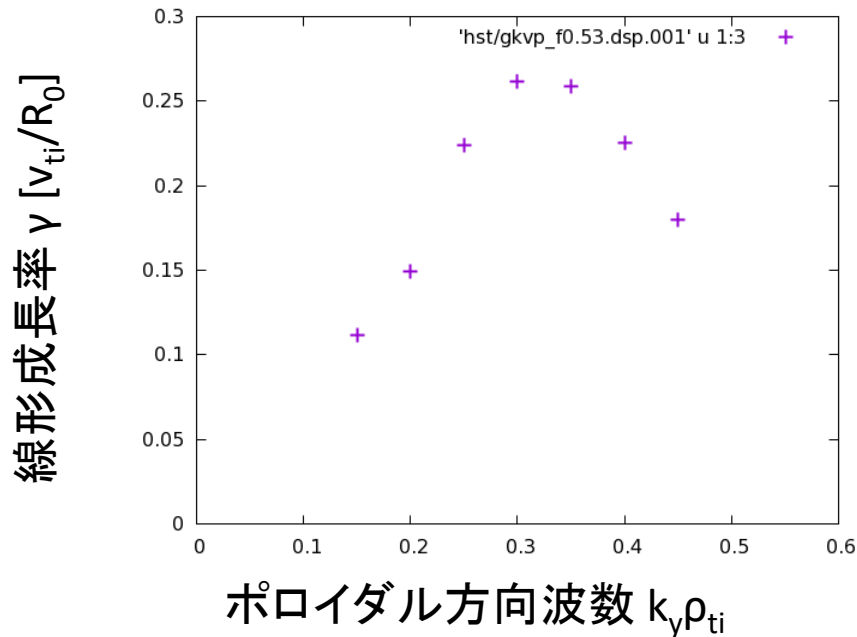
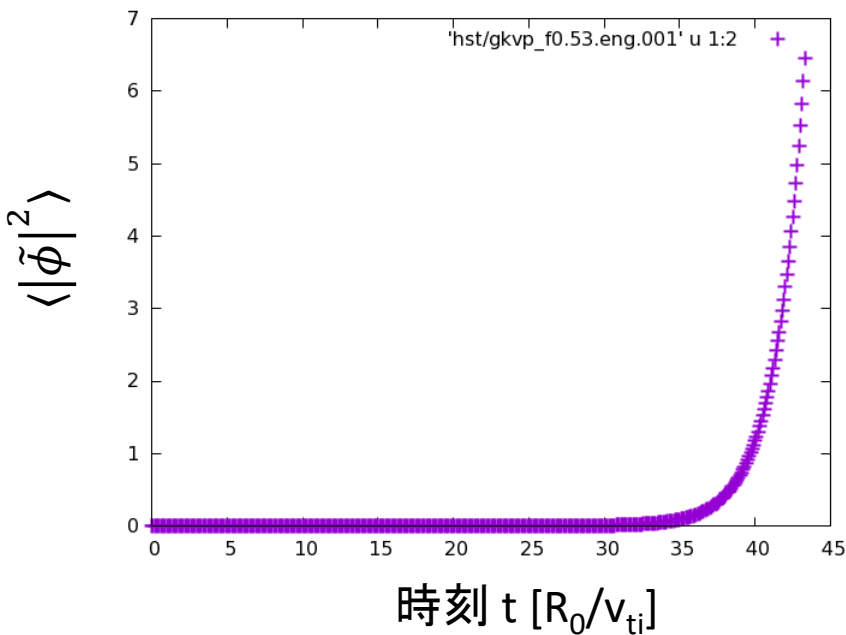
`gnuplot`

`plot 'hst/gkvp_f0.53.eng.001' u 1:2`

`plot 'hst/gkvp_f0.53.dsp.001' u 1:3`

揺動振幅 $\langle |\tilde{\phi}|^2 \rangle$ の線形成長

線形分散関係



6-b) hst/のアスキー標準出力を一括でPDF化するためのスクリプト fig_stdout

extra_tools/fig_stdout.tar.gz をGKV出力データのあるディレクトリ(今回は /data/lng/maeyama/gkv_training/linear_test_LHD/)に展開すると、

fig_stdout/

make_pdf.csh	PDF作成シェルスクリプト
pdf/	PDFが格納されるディレクトリ
eps/	PDF作成に用いられたepsが格納されるディレクトリ
data/	eps作成に用いられた元データが格納されるディレクトリ
src/	gnuplot用スクリプト等

ができるので、以下のコマンド

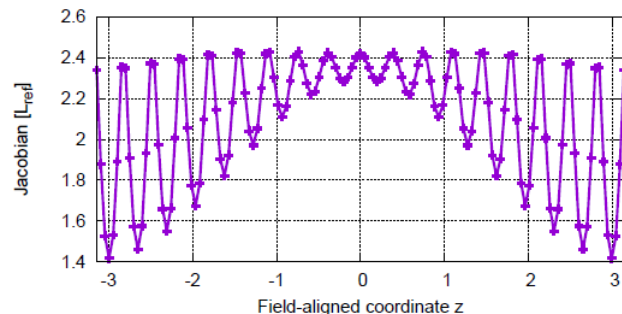
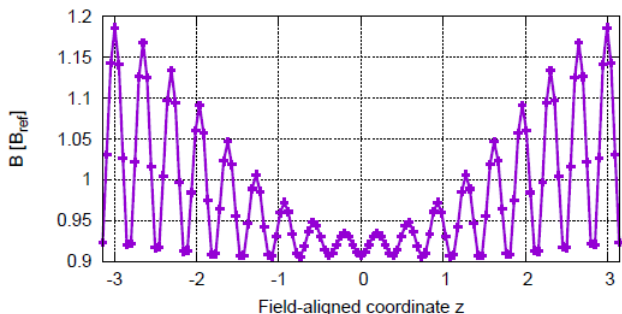
```
cd fig_stdout/
```

```
(./make_pdf.csh clean) - 省略可能
```

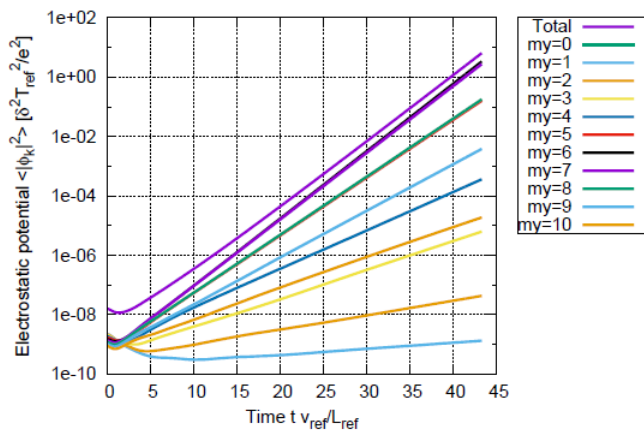
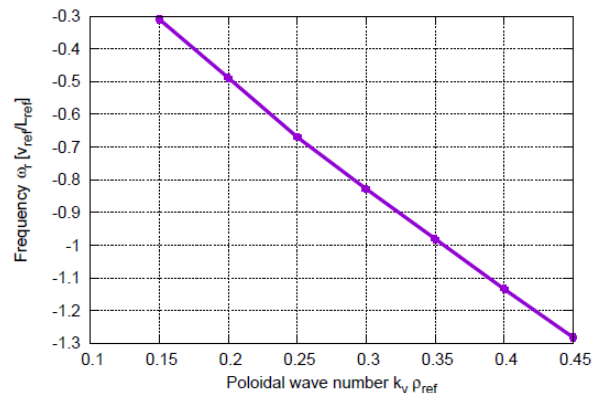
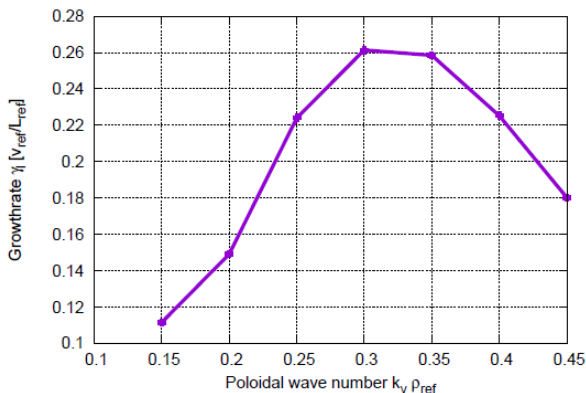
```
./make_pdf.csh
```

を実行すると、一覧のPDF(fig_stdout/pdf/fig.pdf)やeps、元データが格納される。
(※必ずしも図のスケール等が見やすいとは限らない。)

磁場強度やJacobianの 磁力線方向z分布



線形成長率・実周波数のポロイダル方向波数依存性



**ポロイダルモード数
毎の揺動振幅
 $\langle |\tilde{\phi}|^2 \rangle$ の時間発展**

ヘリカルリップルに対して格子点数が少なめ。→もう少し磁力線方向解像度global_nzを高くする必要がある。

応用：非線形乱流シミュレーションの実行とデータ解析

非線形乱流シミュレーションを行い、fig_stdoutやdiagを利用してデータを解析する。

nonlinear_test_LHD.tar.gz を解凍し、**パラメータ・ディレクトリ**を指定し、**コンパイル&実行**。

線形計算からの変更点：

- 計算タイプを非線形に、`calc_type="nonlinear",n_tht=1`
- 複数モード扱えるように解像度変更 `nxw = 64, nyw = 32, nx = 42, global_ny=21,global_nz=64`

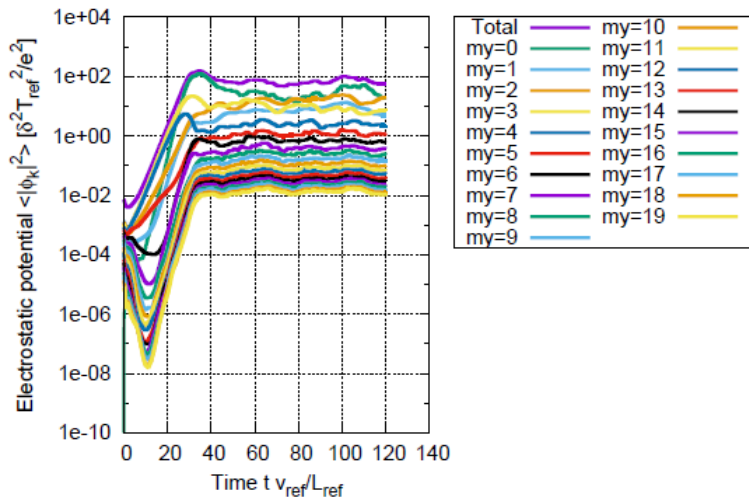
※実習時間では終わらないと思うので、今回は、計算結果サンプルをダウンロード。

```
cp -r /tmp/GKV_Sample_Data/nonlinear_test_LHD/ /data/Inq/maeyama/gkv_training/  
cd /data/Inq/maeyama/gkv_training/nonlinear_test_LHD/
```

fig_stdoutで結果を見てみましょう。

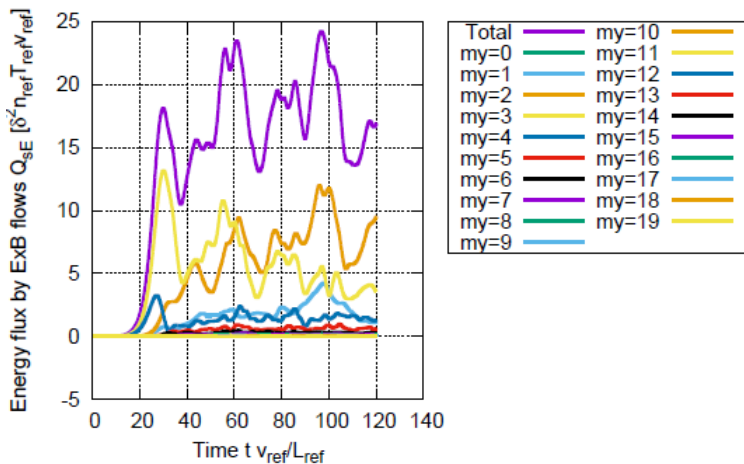
ポロイダルモード数 毎の揺動振幅 $\langle |\tilde{\phi}|^2 \rangle$ の時間発展

$ky=0(my=0)$ の帯
状流が卓越。

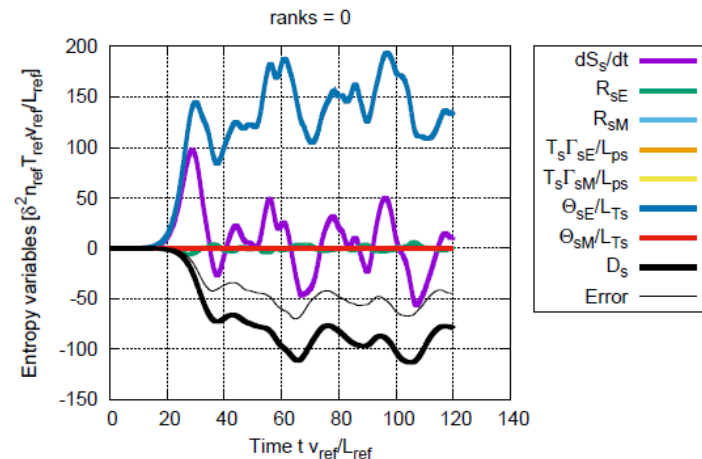


ポロイダルモード 数毎のイオン熱輸 送フラックス Q_E の 時間発展

$ky=0.2(my=2)$ の
モードが主に輸
送を作る。



エントロピーバランスの評価



駆動 (Θ/L_T) と散逸 (D) がつり合
い定常状態 $(dS/dt \sim 0)$ に至る。
低解像度のため若干の誤差
(Error)あり。

まとめ

GKVの利用方法をハンズオン形式で説明した。

要約

GKVの物理モデル・数値モデル
を踏まえた上で、

実験→GKVパラメータ換算

MHD平衡データの加工

の準備をしてから、

src/gkvp_f0.53_header.f90

run/gkvp_f0.53_namelist

run/sub.q

run/shoot

解像度、MPIの設定

物理・数値パラメータの設定

MPI・OpenMPの設定

平衡データ・出力ディレクトリの設定

の後にコンパイル、実行。

hst/のアスキー標準出力を一括でPDF化するためのスクリプト fig_stdout

phi/などのバイナリデータを解析するためのポスト処理プログラム diag

などを利用して、結果を解析する。

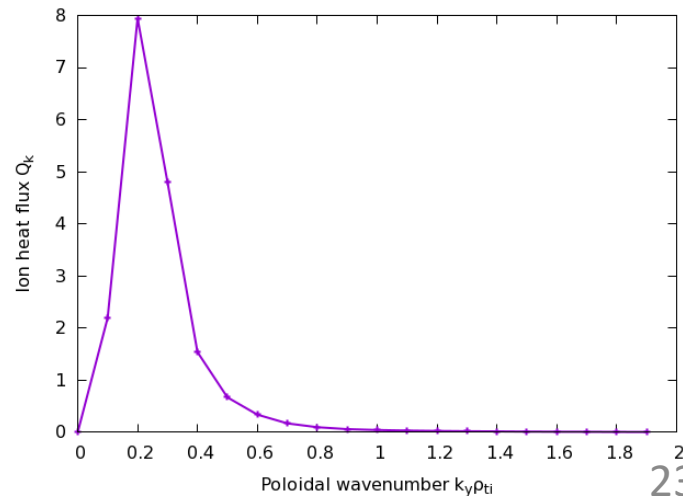
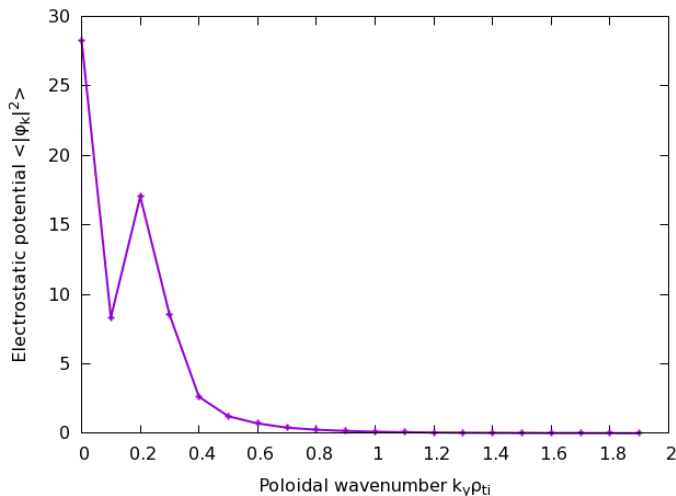
発展課題

余力がある人は、

- どんな出力データがあるか、Appendix Aを確認しておきましょう。
- イオンの熱輸送フラックスの時間発展もプロットしてみましょう。
- イオン温度勾配を変えて、線形成長率の変化を調べてみましょう。
- 磁力線方向ボックスサイズを変えてみましょう。解像度も変わることにご注意。
- MPIやOpenMPの並列数を変えて、処理時間のスケーラビリティを確認してみましょう。
- 非線形シミュレーションにおいて、準定常状態で時間平均した静電ポテンシャル揺動の k_y 波数スペクトルを作ってみましょう。

(左) 静電ポテンシャル揺動と(右) イオン熱輸送フラックスのポロイダル方向波数スペクトル

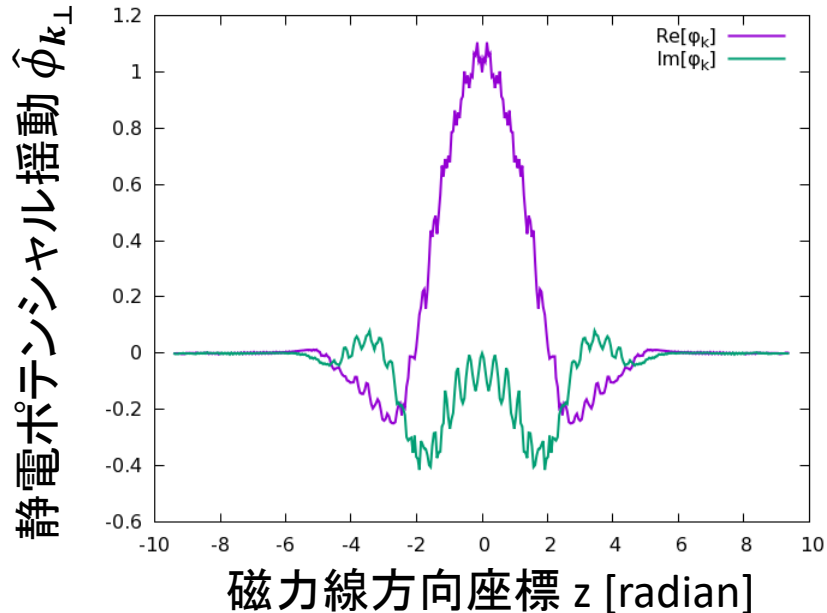
($t=60-120$ で平均)



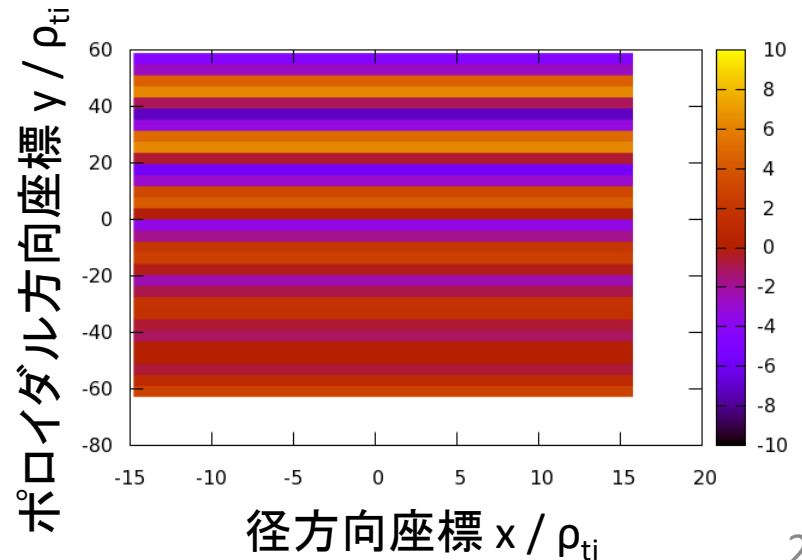
発展課題

- phi/などのバイナリデータを解析するためのポスト処理プログラム diag を利用して、線形モードの磁力線方向z分布や、静電ポテンシャルの磁力線垂直xy平面分布を書き出してみましょう。(参照: 第2回講習会資料 <http://www.p.phys.nagoya-u.ac.jp/gkv/document.html> > gkv_training_diag_171215.pdf)

静電ポテンシャル揺動のz方向分布 $\tilde{\phi}_k(z)$ ($k_x=0, k_y=0.3$ の最大成長モード)



静電ポテンシャル揺動のx,y断面分布 $\tilde{\phi}(x, y)$ ($z=0 \Leftrightarrow \theta = 0$ の悪い曲率領域での断面)



Appendix A. GKVの出力データ一覧

cnt/*cnt*

fxv/*fxv*

phi/*phi*, *Al*, *mom*, *trn*, (非線形の場合のみ *tri*)

hst/*bln*, *ges*, *gem*, *qes*, *qem*, *wes*, *wem*,

eng, *men*, *dte*, *mtr*, (線形の場合のみ *frq*, *dsp*)

log/*log*

cnt/gkvp_f0.53.(MPIランク6桁).cnt.(ラン数3桁)

- ファイル形式: バイナリ
- 出力間隔: ランの終了時
- 出力を行うMPIランク: すべて
- 総ファイル数: $nprocw * nprocz * nprocv * nprocm * nprocs$ * (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: ocnt
- 格納データ:
time, ff(-nx:nx,0:ny,-nz:nz-1,1:2*nv,0:nm)

ここで、

time: 時刻(倍精度実数)

ff: 揺動ジャイロ中心分布関数(倍精度複素数)

【説明】

揺動量は、磁気面座標 x , 磁力線ラベル座標 y , 磁力線方向座標 z において、 (x,y) 方向にフーリエ級数展開され、

$$\tilde{f}_s(x, y, z, v_{\parallel}, \mu) = \sum_{k_x} \sum_{k_y} \tilde{f}_{sk}(z, v_{\parallel}, \mu) e^{i(k_x x + k_y y)}$$

*.cnt.*には、

$$\tilde{f}_{sk} = \frac{\rho_{ref} n_s}{L_{ref} v_{ts}^3} \bar{f}_{sk}$$

として規格化された分布関数 $\bar{f}_{sk}(z, v_{\parallel}, \mu)$ が格納されている。

fxv/gkvp_f0.53.(MPIランク6桁).(粒子種1桁).fxv.(ラン数3桁)

- ファイル形式: バイナリ
- 出力間隔: dtout_fxv
- 出力を行うMPIランク: すべて
- 総ファイル数: nprocw*nprocz*nprocv*nprocm*nprocs * (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: ofxv
- 格納データ:
time, ff(-nx:nx,0:ny,1:2*nv,0:nm)

ここで、

time: 時刻(倍精度実数)

ff: 揺動ジャイロ中心分布関数(倍精度複素数) at $iz = -nz$ (z方向MPIランクrankzに依存して、書き出す磁力線方向位置は異なる。)

【説明】

*.cnt.*の項を参照。

phi/gkvp_f0.53.(MPIランク6桁).0.phi.(ラン数3桁)

- ファイル形式: バイナリ
- 出力間隔: dtout_ptn
- 出力を行うMPIランク: ranks == 0 .and. vel_rank == 0
- 総ファイル数: nprocw*nprocz * (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: ophi
- 格納データ:
time, phi(-nx:nx,0:ny,-nz:nz-1)

ここで、

time: 時刻(倍精度実数)

phi: 揺動静電ポテンシャル(倍精度複素数)

【説明】

揺動量は、磁気面座標 x , 磁力線ラベル座標 y , 磁力線方向座標 z において、 (x,y) 方向にフーリエ級数展開され、

$$\tilde{\phi}(x, y, z) = \sum_{k_x} \sum_{k_y} \tilde{\phi}_k(z) e^{i(k_x x + k_y y)}$$

*.phi.*には、

$$\tilde{\phi}_k = \frac{\rho_{ref} T_{ref}}{L_{ref} e_{ref}} \bar{\phi}_k$$

として規格化された静電ポテンシャル $\bar{\phi}_k(z)$ が格納されている。

phi/gkvp_f0.53.(MPIランク6桁).0.AI.(ラン数3桁)

- ファイル形式: バイナリ
- 出力間隔: dtout_ptn
- 出力を行うMPIランク: ranks == 0 .and. vel_rank == 0
- 総ファイル数: nprocw*nprocz * (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: oAI
- 格納データ:
time, AI(-nx:nx,0:ny,-nz:nz-1)

ここで、

time: 時刻(倍精度実数)

AI: 揺動ベクトルポテンシャル(倍精度複素数)

【説明】

揺動量は、磁気面座標 x , 磁力線ラベル座標 y , 磁力線方向座標 z において、 (x,y) 方向にフーリエ級数展開され、

$$\tilde{A}_{\parallel}(x, y, z) = \sum_{k_x} \sum_{k_y} \tilde{A}_{\parallel k}(z) e^{i(k_x x + k_y y)}$$

*.AI.*には、

$$\tilde{A}_{\parallel k} = \frac{\rho_{ref}}{L_{ref}} \rho_{ref} B_{ref} \bar{A}_{\parallel k}$$

として規格化された静電ポテンシャル $\bar{A}_{\parallel k}(z)$ が格納されている。

phi/gkvp_f0.53.(MPIランク6桁).(粒子種1桁).mom.(ラン数3桁)

- ファイル形式: バイナリ
- 出力間隔: dtout_ptn
- 出力を行うMPIランク: vel_rank == 0
- 総ファイル数: nprocw*nprocz*nprocs * (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: omom
- 格納データ:
time, mom(-nx:nx,0:ny,-nz:nz-1,0:nmom-1)

ここで、

time: 時刻(倍精度実数)

mom: 揺動流体モーメント(倍精度複素数)。現状、nmom=6として以下の6つの流体量を順に出力。

$$\tilde{n}_{sk} = \int dv^3 J_{0sk} \tilde{f}_{sk}, \quad \tilde{u}_{\parallel sk} = \int dv^3 v_{\parallel} J_{0sk} \tilde{f}_{sk}, \quad \tilde{p}_{\parallel sk} = \int dv^3 \frac{v_{\parallel}^2}{2} J_{0sk} \tilde{f}_{sk},$$

$$\tilde{p}_{\perp sk} = \int dv^3 \mu B J_{0sk} \tilde{f}_{sk}, \quad \tilde{q}_{\parallel\parallel sk} = \int dv^3 v_{\parallel} \frac{v_{\parallel}^2}{2} J_{0sk} \tilde{f}_{sk}, \quad \tilde{q}_{\perp\perp sk} = \int dv^3 v_{\parallel} \mu B J_{0sk} \tilde{f}_{sk}$$

【説明】

規格化は

$$\tilde{n}_{sk} = \frac{\rho_{ref}}{L_{ref}} n_{ref} \bar{n}_{sk}, \quad \tilde{u}_{\parallel sk} = \frac{\rho_{ref}}{L_{ref}} n_{ref} v_{ref} \bar{u}_{\parallel sk}, \quad \tilde{p}_{\parallel sk} = \frac{\rho_{ref}}{L_{ref}} n_{ref} T_{ref} \bar{p}_{\parallel sk},$$

$$\tilde{p}_{\perp sk} = \frac{\rho_{ref}}{L_{ref}} n_{ref} T_{ref} \bar{p}_{\perp sk}, \quad \tilde{q}_{\parallel\parallel sk} = \frac{\rho_{ref}}{L_{ref}} n_{ref} T_{ref} v_{ref} \bar{q}_{\parallel\parallel sk}, \quad \tilde{q}_{\perp\perp sk} = \frac{\rho_{ref}}{L_{ref}} n_{ref} T_{ref} v_{ref} \bar{q}_{\perp\perp sk}$$

phi/gkvp_f0.53.(MPIランク6桁).(粒子種1桁).trn.(ラン数3桁)

- ファイル形式: バイナリ
- 出力間隔: dtout_eng
- 出力を行うMPIランク: zsp_rank == 0 .and. vel_rank == 0
- 総ファイル数: nprocw*nprocs * (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: otrn
- 格納データ:

time, $S_{sk}, W_{Ek}, W_{Mk}, R_{SEk}, R_{SMk}, I_{SEk}, I_{SMk}, D_{sk}, \Gamma_{SEk}, \Gamma_{SMk}, Q_{SEk}, Q_{SMk}$

ここで、

time: 時刻(倍精度実数)

他はすべてサイズ(-nx:nx, 0:ny)の倍精度実数配列で、左から順に、ジャイロ中心揺動エントロピー、静電揺動エネルギー(イオン分極項含む)、磁場揺動エネルギー、波粒子相互作用($W_E \rightarrow S_s$)、波粒子相互作用($W_M \rightarrow S_s$)、ExB流による非線形エントロピー伝達、磁場揺動による非線形エントロピー伝達、衝突散逸、ExB流による粒子輸送フラックス、磁場揺動による粒子輸送フラックス、ExB流によるエネルギー輸送フラックス、磁場揺動によるエネルギー輸送フラックス

【説明】

補足1. エントロピーバランス方程式を参照。また、規格化は以下とする。

$$\begin{aligned} S_{sk} &= \delta_{ref}^2 n_{ref} T_{ref} \bar{S}_{sk}, & W_{Ek} &= \delta_{ref}^2 n_{ref} T_{ref} \bar{W}_{Ek}, & W_{Mk} &= \delta_{ref}^2 n_{ref} T_{ref} \bar{W}_{Mk}, \\ R_{sk} &= \delta_{ref}^2 \frac{v_{ref}}{L_{ref}} n_{ref} T_{ref} \bar{R}_{sk}, & I_{sk} &= \delta_{ref}^2 \frac{v_{ref}}{L_{ref}} n_{ref} T_{ref} \bar{I}_{sk}, & D_{sk} &= \delta_{ref}^2 \frac{v_{ref}}{L_{ref}} n_{ref} T_{ref} \bar{D}_{sk}, \\ \Gamma_{sk} &= \delta_{ref}^2 n_{ref} v_{ref} \bar{\Gamma}_{sk}, & Q_{sk} &= \delta_{ref}^2 n_{ref} T_{ref} v_{ref} \bar{Q}_{sk} \end{aligned}$$

(シア磁場中の磁力線平行方向移流項 E_{sk} については現状評価していない。Note: $\sum_{k_x} \sum_{k_y} I_{sk} = 0, \sum_{k_x} E_{sk} = 0$) 32

phi/gkvp_f0.53.s(粒子種1桁)mx(mxt4桁)my(myt4桁).tri.(ラン数3桁)

- ファイル形式: バイナリ
- 出力間隔: dtout_ptn (calc_type=="nonlinear" .and. num_triad_diag>0)
- 出力を行うMPIランク: rank == 0
- 総ファイル数: nprocs * num_triad_diag * (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: otri
- 格納データ:

※mxt,mytはnamelistで指定したもの。

time, $J_{SEk}^{p,q}$, $J_{SEp}^{q,k}$, $J_{SEq}^{k,p}$, $J_{SMk}^{p,q}$, $J_{SMp}^{q,k}$, $J_{SMq}^{k,p}$

ここで、

time: 時刻(倍精度実数)

他はすべてサイズ(-nx:nx, -global_ny:global_ny)の倍精度実数配列で、モードk=(mxt,myt)に固定して、p=(px,py)の関数として表したもの(qは-k-pで求まる)。

先の3つは、ExB流の非線形性によるp,qからkへのエントロピー伝達とそのcyclicな入れ替え、後の3つは、磁場揺動の非線形性によるp,qからkへのエントロピー伝達とそのcyclicな入れ替え。

【説明】

補足2. 三波結合伝達関数を参照。

規格化は、*.trn.*の非線形エントロピー伝達と同様に、 $J_{sk}^{p,q} = \delta_{ref}^2 \frac{v_{ref}}{L_{ref}} n_{ref} T_{ref} J_{sk}^{p,q}$,

hst/gkvp_f0.53.blIn.(粒子種1桁).(ラン数3桁)

- ファイル形式: アスキー
- 出力間隔: dtout_eng
- 出力を行うMPIランク: rank == 0
- 総ファイル数: nprocs * (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: oblIn
- 格納データ:

$$\text{time}, S_s, W_E, W_M, R_{SE}, R_{SM}, I_{SE}, I_{SM}, D_s, \frac{T_s \Gamma_{SE}}{L_{ps}}, \frac{T_s \Gamma_{SM}}{L_{ps}}, \frac{\Theta_{SE}}{L_{Ts}}, \frac{\Theta_{SM}}{L_{Ts}}$$

ここで、

time: 時刻(実数)

S_s から D_s まではサイズ(2)の実数配列(配列要素1,2はそれぞれ $ky \neq 0$ 成分と $ky = 0$ 成分)で、左から順に、ジャイロ中心揺動エントロピー、静電揺動エネルギー(イオン分極項含む)、磁場揺動エネルギー、波粒子相互作用($W_E \rightarrow S_s$)、波粒子相互作用($W_M \rightarrow S_s$)、ExB流による非線形エントロピー伝達、磁場揺動による非線形エントロピー伝達、衝突散逸。残り4つは実数で、エントロピーバランス方程式における、粒子輸送項(ExB流、磁場揺動)、熱輸送項(ExB流、磁場揺動)

【説明】

*.trn.*の項を参照。

hst/gkvp_f0.53.ges.(粒子種1桁).(ラン数3桁)

- ファイル形式: アスキー
- 出力間隔: dtout_eng
- 出力を行うMPIランク: rank == 0
- 総ファイル数: nprocs * (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: oges
- 格納データ:
time, Γ_{SE} , Γ_{SEk_y} (0: global_ny)

ここで、

time: 時刻(実数)

Γ_{SE} : ExB流による粒子輸送フラックス(実数)

Γ_{SEk_y} : ExB流による粒子輸送フラックスのy方向波数スペクトル(実数配列)

【説明】

ExB流による粒子輸送フラックスは以下で与えられる。

$$\Gamma_{SEk_y} = \sum_{k_x} \Gamma_{SEk}, \quad \Gamma_{SEk} = \text{Re} \left[\left\langle -\frac{ik_y \phi_k}{c_b} n_{sk}^* \right\rangle \right]$$

規格化は

$$\Gamma_{SEk_y} = \delta_{ref}^2 n_{ref} v_{ref} \bar{\Gamma}_{SEk_y}$$

hst/gkvp_f0.53.gem.(粒子種1桁).(ラン数3桁)

- ファイル形式: アスキー
- 出力間隔: dtout_eng
- 出力を行うMPIランク: rank == 0
- 総ファイル数: nprocs * (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: ogem
- 格納データ:
time, Γ_{SM} , Γ_{SMk_y} (0:global_ny)

ここで、

time: 時刻(実数)

Γ_{SM} : 磁場揺動による粒子輸送フラックス(実数)

Γ_{SMk_y} : 磁場揺動による粒子輸送フラックスのy方向波数スペクトル(実数配列)

【説明】

磁場揺動による粒子輸送フラックスは以下で与えられる。

$$\Gamma_{SMk_y} = \sum_{k_x} \Gamma_{SMk}, \quad \Gamma_{SMk} = \text{Re} \left[\left\langle \frac{ik_y A_{\parallel k}}{c_b} u_{\parallel sk}^* \right\rangle \right]$$

規格化は

$$\Gamma_{SMk_y} = \delta_{ref}^2 n_{ref} v_{ref} \bar{\Gamma}_{SMk_y}$$

hst/gkvp_f0.53.qes.(粒子種1桁).(ラン数3桁)

- ファイル形式: アスキー
- 出力間隔: dtout_eng
- 出力を行うMPIランク: rank == 0
- 総ファイル数: nprocs * (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: oqes
- 格納データ:
time, Q_{SE} , Q_{SEk_y} (0: global_ny)

ここで、

time: 時刻(実数)

Q_{SE} : ExB流によるエネルギー輸送フラックス(実数)

Q_{SEk_y} : ExB流によるエネルギー輸送フラックスのy方向波数スペクトル(実数配列)

【説明】

ExB流によるエネルギー輸送フラックスは以下で与えられる。

$$Q_{SEk_y} = \sum_{k_x} Q_{SEk}, \quad Q_{SEk} = \text{Re} \left[\left\langle -\frac{ik_y \phi_k}{c_b} p_{sk}^* \right\rangle \right]$$

規格化は

$$Q_{SEk_y} = \delta_{ref}^2 n_{ref} v_{ref} \bar{Q}_{SEk_y}$$

hst/gkvp_f0.53.qem.(粒子種1桁).(ラン数3桁)

- ファイル形式: アスキー
- 出力間隔: dtout_eng
- 出力を行うMPIランク: rank == 0
- 総ファイル数: nprocs * (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: oqem
- 格納データ:
time, Q_{sM} , Q_{sMk_y} (0:global_ny)

ここで、

time: 時刻(実数)

Q_{sM} : 磁場揺動によるエネルギー輸送フラックス(実数)

Q_{sMk_y} : 磁場揺動によるエネルギー輸送フラックスのy方向波数スペクトル(実数配列)

【説明】

磁場揺動によるエネルギー輸送フラックスは以下で与えられる。

$$Q_{sMk_y} = \sum_{k_x} Q_{sMk}, \quad Q_{sMk} = \text{Re} \left[\left\langle \frac{ik_y A_{\parallel k}}{c_b} q_{\parallel sk}^* \right\rangle \right]$$

規格化は

$$Q_{sMk_y} = \delta_{ref}^2 n_{ref} v_{ref} \bar{Q}_{sMk_y}$$

hst/gkvp_f0.53.wes.(ラン数3桁)

- ファイル形式: アスキー
- 出力間隔: dtout_eng
- 出力を行うMPIランク: rankg == 0
- 総ファイル数: (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: owes
- 格納データ:
time, W_E , W_{Ek_y} (0:global_ny)

ここで、

time: 時刻(実数)

W_E : 静電揺動エネルギー(実数)

W_{Ek_y} : 静電揺動エネルギーのy方向波数スペクトル(実数配列)

【説明】

静電揺動エネルギー(分極項含む)は以下で与えられる

$$W_{Ek_y} = \sum_{k_x} W_{Ek}, \quad W_{Ek} = \left\langle \left[\varepsilon_0 k_{\perp}^2 + \sum_s \frac{e_s^2 n_s}{T_s} (1 - \Gamma_{0sk}) \right] \frac{|\phi_{\mathbf{k}}|^2}{2} \right\rangle$$

規格化は

$$W_{Ek_y} = \delta_{ref}^2 n_{ref} T_{ref} \bar{W}_{Ek_y}$$

hst/gkvp_f0.53.wem. (ラン数3桁)

- ファイル形式: アスキー
- 出力間隔: dtout_eng
- 出力を行うMPIランク: rankg == 0
- 総ファイル数: (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: owem
- 格納データ:
time, W_M , W_{Mk_y} (0: global_ny)

ここで、

time: 時刻(実数)

W_M : 磁場揺動エネルギー(実数)

W_{Mk_y} : 磁場揺動エネルギーのy方向波数スペクトル(実数配列)

【説明】

磁場揺動エネルギーは以下で与えられる。

$$W_{Mk_y} = \sum_{k_x} W_{Mk}, \quad W_{Mk} = \left\langle \frac{k_{\perp}^2 |A_{\parallel k}|^2}{\mu_0 2} \right\rangle$$

規格化は

$$W_{Mk_y} = \delta_{ref}^2 n_{ref} T_{ref} \bar{W}_{Mk_y}$$

hst/gkvp_f0.53.eng.(ラン数3桁)

- ファイル形式: アスキー
- 出力間隔: dtout_eng
- 出力を行うMPIランク: rankg == 0
- 総ファイル数: (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: oeng
- 格納データ:

$$\text{time}, \sum_{k_x, k_y} \langle |\tilde{\phi}_k|^2 \rangle, \sum_{k_x} \langle |\tilde{\phi}_k|^2 \rangle (0: \text{global_ny})$$

ここで、

time: 時刻(実数)

$\sum_{k_x, k_y} \langle |\tilde{\phi}_k|^2 \rangle$: 揺動静電ポテンシャル二乗振幅(実数)

$\sum_{k_x} \langle |\tilde{\phi}_k|^2 \rangle$: 揺動静電ポテンシャル二乗振幅のy方向波数スペクトル(実数配列)

【説明】

規格化は、 $\tilde{\phi}_k = \frac{\rho_{ref} T_{ref}}{L_{ref} e_{ref}} \bar{\phi}_k$

hst/gkvp_f0.53.men.(ラン数3桁)

- ファイル形式: アスキー
- 出力間隔: dtout_eng
- 出力を行うMPIランク: rankg == 0
- 総ファイル数: (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: omen
- 格納データ:

time, $\sum_{k_x, k_y} \langle |\tilde{A}_{\parallel k}|^2 \rangle$, $\sum_{k_x} \langle |\tilde{A}_{\parallel k}|^2 \rangle$ (0: global_ny)

ここで、

time: 時刻(実数)

$\sum_{k_x, k_y} \langle |\tilde{A}_{\parallel k}|^2 \rangle$: 揺動ベクトルポテンシャル二乗振幅(実数)

$\sum_{k_x} \langle |\tilde{A}_{\parallel k}|^2 \rangle$: 揺動ベクトルポテンシャル二乗振幅のy方向波数スペクトル(実数配列)

【説明】

規格化は、 $\tilde{A}_{\parallel k} = \frac{\rho_{ref}}{L_{ref}} \rho_{ref} B_{ref} \bar{A}_{\parallel k}$

hst/gkvp_f0.53.dtc.(ラン数3桁)

- ファイル形式: アスキー
- 出力間隔: dtout_eng
- 出力を行うMPIランク: rankg == 0
- 総ファイル数: (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: odtc
- 格納データ:
time, dt, dt_limit, dt_nl

ここで、

time: 時刻(実数)

dt: 時間刻み幅(実数)

dt_limit: 時間刻み幅の見積もり(実数)

dt_nl: 非線形移流速度から算出した数値安定な時間刻み幅の見積もり(実数)

【説明】

省略。

hst/gkvp_f0.53.mtr.(ラン数3桁)

- ファイル形式: アスキー
- 出力間隔: ランの開始時
- 出力を行うMPIランク: rankg == 0
- 総ファイル数: (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: omtr
- 格納データ:

$$z, \theta(\text{または } \varphi), B, \frac{\partial B}{\partial x}, \frac{\partial B}{\partial y}, \frac{\partial B}{\partial z}, g^{xx}, g^{xy}, g^{xz}, g^{yy}, g^{yz}, g^{zz}, \sqrt{g}$$

ここで、データはすべて実数で、左から順に

磁力線方向座標、ポロイダル角(ただしequib_type==vmecの時はトロイダル角)、磁場強度、磁場強度の微分3つ、メトリックテンソルの要素6つ、Jacobian。

【説明】

省略。

hst/gkvp_f0.53.frq.(ラン数3桁)

- ファイル形式: アスキー
- 出力間隔: dtout_eng (calc_type == linear .or. calc_type == lin_freq)
- 出力を行うMPIランク: rankg == 0
- 総ファイル数: (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: ofrq
- 格納データ:
time, omega(1:global_ny)

ここで、

time: 時刻(実数)

omega: 線形複素周波数(複素数)[=(実周波数, 成長率)]のy方向波数スペクトル

【説明】

$\tilde{\phi}_k(t) = \phi_0 e^{-i\omega t} = \phi_0 e^{-i\omega_r t} e^{\gamma t}$ の依存性を仮定して、

$$\omega = \omega_r + i\gamma = \frac{\ln \left[\frac{\tilde{\phi}_k(t + \Delta t)}{\tilde{\phi}_k(t)} \right]}{-i\Delta t}$$

により、線形複素周波数の時々刻々の見積もりを得る。

hst/gkvp_f0.53.dsp. (ラン数3桁)

- ファイル形式: アスキー
- 出力間隔: ランの終了時 (calc_type == linear .or. calc_type == lin_freq)
- 出力を行うMPIランク: rankg == 0
- 総ファイル数: (総ラン数)
- GKVコード中の出力ユニット: odsp
- 格納データ:
ky, omega, diff, 1-ineq

ここで、

ky: y方向波数(実数)

omega: 線形複素周波数(複素数)[=(実周波数, 成長率)]

diff: 収束の相対誤差[omega(t)-omega(t-dt)]/omega(t) (複素数)

1-ineq: Schwartzの不等式で評価した収束誤差(実数)

【説明】

$\tilde{\phi}_k(t) = \phi_0 e^{-i\omega t} = \phi_0 e^{-i\omega_r t} e^{\gamma t}$ の依存性を仮定して、

$$\omega = \omega_r + i\gamma = \frac{\ln \left[\frac{\tilde{\phi}_k(t + \Delta t)}{\tilde{\phi}_k(t)} \right]}{-i\Delta t}$$

により、線形複素周波数の時々刻々の見積もりを得る。

ランの終了時にkx=0について、周波数・成長率のky依存性を出力する。まだ周波数・成長率が十分収束していなさそうな場合はコメントとして書き出す。

log/gkvp_f0.53.(MPIランク6桁).(粒子種1桁).log.(ラン数3桁)

- ファイル形式: アスキー
- 出力間隔: 随時
- 出力を行うMPIランク: すべて
- 総ファイル数: $nprocw * nprocz * nprocv * nprocm * nprocs * (\text{総ラン数})$
- GKVコード中の出力ユニット: olog
- 格納データ:
 - シミュレーションに関するログ

【説明】

省略。

補足1. エントロピーバランス方程式

各粒子種、各モードについてのエントロピーバランスは以下で与えられる[Maeyama'14PoP]。

$$\frac{dS_{sk}}{dt} = \frac{T_s \Gamma_{sk}}{L_{ps}} + \frac{\Theta_{sk}}{L_{Ts}} + I_{sk} + R_{sk} + E_{sk} + D_{sk}, \quad \frac{dW_{Ek}}{dt} = -R_{sEk}, \quad \frac{dW_{Mk}}{dt} = -R_{sMk}$$

ここで、

$$S_{sk} = \left\langle \int dv^3 \frac{T_s |f_{sk}|^2}{2F_{sM}} \right\rangle, \quad W_{Ek} = \left\langle \left[\varepsilon_0 k_{\perp}^2 + \sum_s \frac{e_s^2 n_s}{T_s} (1 - \Gamma_{0sk}) \right] \frac{|\phi_k|^2}{2} \right\rangle, \quad W_{Mk} = \left\langle \frac{k_{\perp}^2 |A_{||k}|^2}{\mu_0 2} \right\rangle,$$

$$\Gamma_{sk} = \Gamma_{sEk} + \Gamma_{sMk} = \text{Re} \left[\left\langle -\frac{ik_y \phi_k}{c_b} n_{sk}^* + \frac{ik_y A_{||k}}{c_b} u_{||sk}^* \right\rangle \right], \quad \Theta_{sk} = Q_{sk} - \frac{5}{2} T_s \Gamma_{sk}$$

$$Q_{sk} = Q_{sEk} + Q_{sMk} = \text{Re} \left[\left\langle -\frac{ik_y \phi_k}{c_b} p_{sk}^* + \frac{ik_y A_{||k}}{c_b} q_{||sk}^* \right\rangle \right],$$

$$I_{sk} = I_{sEk} + I_{sMk} = \text{Re} \left[-\sum_{k'} \sum_{k''} \delta_{k'+k'',k} \left\langle \int dv^3 \frac{T_s g_{sk}^*}{F_{sM}} \left\{ \frac{J_{0sk'}(\phi_{k'} - v_{||} A_{||k'})}{c_b}, g_{sk''} \right\}_{\perp} \right\rangle \right],$$

$$R_{sk} = R_{sEk} + R_{sMk} = \text{Re} \left[\left\langle -\phi_k^* \frac{\partial e_s n_{sk}}{\partial t} - e_s u_{||sk}^* \frac{\partial A_{||k}}{\partial t} \right\rangle \right], \quad E_{sk} = \text{Re} \left[-\left\langle \int dv^3 v_{||} \nabla_{||} \frac{T_s |g_{sk}|^2}{2F_{sM}} \right\rangle \right],$$

$$D_{sk} = \text{Re} \left[\left\langle \int dv^3 \frac{T_s g_{sk}^*}{F_{sM}} C_{sk} \right\rangle \right], \quad g_{sk} = f_{sk} + \frac{e_s J_{0sk} \phi_k}{T_s} F_{sM}, \quad p_{sk} = p_{||sk} + p_{\perp sk}, \quad q_{||sk} = q_{|||sk} + q_{||\perp sk}$$

補足2. 三波結合伝達関数

補足1. エントロピーバランス方程式で説明した非線形エントロピー伝達 I_{sk} は三波結合伝達関数 $J_{sk}^{p,q}$ を用いて、

$$I_{sk} = \sum_p \sum_q J_{sk}^{p,q}$$

ここで、 $\chi_{sk} = J_{0sk}(\tilde{\phi}_k - v_{\parallel} \tilde{A}_{\parallel k})$, $g_{sk} = f_{sk} + \frac{e_s F_{sM}}{T_s} J_{0sk} \tilde{\phi}_k$ を用いて、

$$J_{sk}^{p,q} = J_{sEk}^{p,q} + J_{sMk}^{p,q} = \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{p}+\mathbf{q},\mathbf{0}} \frac{\mathbf{b} \cdot \mathbf{p} \times \mathbf{q}}{2B} \operatorname{Re} \left[\left\langle \int dv^3 (\chi_{sp} g_{sq} - \chi_{sq} g_{sp}) \frac{T_s g_{sk}}{F_{sM}} \right\rangle \right]$$

補足3. GKVの積分

磁気面平均

$$\langle \tilde{\phi}(x, y, z) \rangle = \sum_{k_x} \langle \tilde{\phi}_{k_x, k_y=0}(z) \rangle e^{ik_x x}, \quad \langle \tilde{\phi}_{k_x, k_y=0}(z) \rangle = \frac{\int_{-\pi}^{\pi} dz \sqrt{g} \tilde{\phi}_{k_x, k_y=0}(z)}{\int_{-\pi}^{\pi} dz \sqrt{g}}$$

体積平均

$$\int dx^3 |\tilde{\phi}(x, y, z)|^2 = \sum_{k_x} \sum_{k_y} \langle |\tilde{\phi}_{\mathbf{k}}(z)|^2 \rangle$$

速度空間積分

$$\int dv^3 \tilde{f}_{\mathbf{k}}(z, v_{\parallel}, \mu) = \int_{-v_{max}}^{v_{max}} dv_{\parallel} \int_0^{v_{max}} dv_{\perp} 2\pi v_{\perp} \tilde{f}_{\mathbf{k}}(z, v_{\parallel}, \mu)$$