



## 研究技術ノート

# 統合輸送解析スイート TASK3D-a を基盤とした 数値解析コードベンチマーク活動の促進

## Facilitation of Benchmark Activity of Numerical Codes based on the Integrated Transport Analysis Suite, TASK3D-a

佐藤雅彦<sup>1)</sup>, 佐竹真介<sup>1,2)</sup>, 横山雅之<sup>1,2)</sup>

SATO Masahiko<sup>1)</sup>, SATAKE Shinsuke<sup>1,2)</sup> and YOKOYAMA Masayuki<sup>1,2)</sup>

<sup>1)</sup>自然科学研究機構核融合科学研究所, <sup>2)</sup>総合研究大学院大学

(原稿受付: 2016年9月9日 / 原稿受理: 2016年12月5日)

数値解析コードのベンチマークは、コードの正当性の検証 (Verification) の観点から非常に重要な活動である。大型ヘリカル装置 (LHD) データを用いたベンチマーク活動の促進によって、コードの正当性の検証に加えて、妥当性の確認 (Validation) の加速も図るべく、異なる数値解析コード間で同一の3次元平衡や温度・密度分布を容易に共有できる環境の整備を目的として、実験解析型統合輸送スイート (Suite) TASK3D-a を基盤とした共有データの統一的整備を行っている。その内容の紹介とともに、このように準備されたデータの共有によって、国際的なベンチマーク活動が加速された一例を述べる。これにより、LHD 放電を活用した Verification & Validation (V&V) 活動のさらなる進展を期するものである。

### Keywords:

TASK3D-a, code benchmarking, three-dimensional equilibrium, density and temperature profiles, verification and validation

## 1. はじめに

同様の物理課題をターゲットとした複数の数値解析コード間のベンチマークは、解析コードの正当性検証 (Verification) の上で非常に重要な活動である。国際的な取り組みの例として、多様な概念に基づく複数のステラレーターヘリオトロン装置の3次元磁場配位における単一エネルギー新古典拡散係数[1]、国際トカマク物理活動ITPAを舞台としたアルフベン固有モード[2]、DIII-Dの放電を参照した、いわゆるサイクロンベースケース[3]を用いた乱流輸送計算などを挙げることができる。

ヘリカル系国際協力研究の枠組みの一つとして、ヘリカル系調整作業会合 (CWGM: Coordinated Working Group Meeting) [4]が継続的に開催され、その中で、数値解析コードの Verification & Validation (V&V) 活動の促進も重要課題となっている[5]。V&V 活動を行う際に、異なる数値解析コード間で、同一の3次元平衡や温度・密度分布を共有することが必要であるが、個々の取り組みでは、必ずしもこのことは容易に実現していないのが実情である。そこで、国際的な V&V 活動の円滑な推進を図るため、LHD 実験解析を主眼として開発を進めている統合輸送解析スイート (Suite) TASK3D-a[6]において同定される3次元平衡、及び、数値解析コード向けにプロセスされた温度・密度分布計測データを関係者間で共通で利用するという取

り組みを進めている。

本稿では、この取り組みについて、具体例とともに紹介する。これにより、LHD 実験データを用いた数値解析コードの V&V 活動のさらなる促進を図りたい。

なお、本稿は、複数コード間の結果の詳細比較について述べることは目的ではない。その観点は、当該課題に関する研究論文等でなされるものである。

## 2. TASK3D-a による共有データの生成

TASK3D-a は、LHD 実験データとのインターフェイス、3次元平衡計算、プラズマ加熱計算 (NBI, ECH 加熱に対応)、エネルギー／運動量バランスをはじめとした各種物理課題に関する解析モジュール群を統合した、LHD 実験解析型統合輸送解析スイートである。本稿で重要となるのは、LHD 実験データとのインターフェイス、3次元平衡計算で生成される下記のようなデータである。以下に述べる事柄を概念的に示したのが図1である。

### 2.1 3次元平衡

LHD プラズマの数値解析を行うに当たって、3次元平衡データは不可欠なデータの一つである。この平衡を規定する手法を本節で述べる。

LHD では、トムソン散乱による電子温度計測[7]がなされているタイミングに対して、座標マッピングシステム

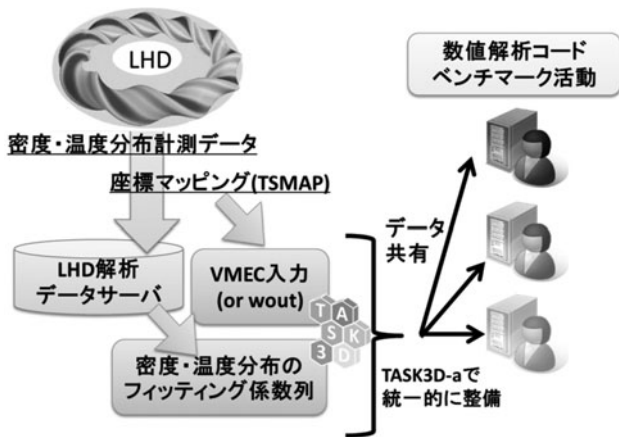


図1 TASK3D-aによる3次元平衡および密度・温度分布のフィッティング係数の統一的整備と、その共有による数値解析コードのベンチマーク活動の促進に関する概念図。

TSMAP[8]で、実座標（大半径）から実効小半径へのマッピングが行われている。このマッピングでは、計測された電子温度分布に最も適した（電子温度分布のピークに対応する大半径位置が磁気軸位置に対応、その磁気軸を挟んでトラス内側／外側の分布対称性が満たされる）平衡が、すでに計算済みのVMEC[9]平衡データベースから選出される。この平衡データベースには、圧力・電流の値とその分布形状をスキャンした固定境界VMEC計算の結果が格納されている。平衡データベース作成の際には最外殻磁気面の位置があらかじめ仮定（固定）されているため、TASK3D-aの3次元平衡計算部において、現実の放電に対応した平衡を規定するべく、蓄積エネルギーの99%を含むプラズマ小半径( $a_{99}$ )位置を最外殻としたVMEC固定境界平衡計算を改めて行う。この際、圧力分布は、データベースから選出されたものをそのまま使い、電流の値としては、磁気計測値を用いるようにしている（データベースでの値からのこの変更による影響は小さい）。このように再計算された平衡は、TSMAPで選出されたVMEC平衡と完全には一致しないが、その差異は、VMECデータベースで固定していた小半径と $a_{99}$ との差異によるもので、その差異が顕著でない限り、平衡の精度に本質的な影響を及ぼさないことが確かめられている[10]。これまでTASK3D-aが対象としてきている低ベータ放電に対してはこの差異は顕著ではない。したがって、次節で述べる、TSMAPでの規格化小半径の関数として表される密度・温度分布との整合性も、この差異の範囲内で保たれていると考えている。

この手法は、回転変換、磁気井戸などの平衡基礎量を必ずしも再現しておらず、いわゆる「平衡再構築」として満足のいく手法ではない。また、例えば高ベータプラズマにおける周辺部磁場構造の乱れなども起こりうるため、広範なLHD放電における平衡規定法としては不十分な点もあり、3次元平衡に関する研究動向を反映した改良を行っていくことが必要である。

この平衡再計算時に用いるVMEC入力、数値解析コードのベンチマークを行う際の共有データの一つとなる。VMEC出力の一つであるwoutと呼ばれるファイルを共有

することも可能であるが、物理課題によって平衡精度への要求が異なる、などの理由で、VMEC入力を共有し、ユーザーが、それぞれが持っているVMECで各々が必要とする精度で平衡再計算することが多い。図1において、座標マッピング(TSMAP)からVMEC入力(or wout)と書かれている部分が本節の内容に対応する。

## 2.2 温度・密度分布データ

2.1節で規定されたVMEC平衡が有する座標マッピングの情報（実座標と実効小半径との対応）に基づいて、実座標の関数である計測分布データが、規格化小半径( $r_{\text{eff}}/a_{99}$ )の関数として整理される[11]。

温度・密度分布の入力形式として、多くの数値解析コードが規格化トロイダルフラックス（ほぼ $(r_{\text{eff}}/a_{99})^2$ に比例）のべき乗関数形でのフィッティング係数列を用いている。このため、標準的には、

$$F(x) = c_0 + c_2 * x^2 + c_4 * x^4 + c_6 * x^6 + c_8 * x^8, \quad (1)$$

によってフィッティング係数を求めている。ここで、 $F(x)$ は温度・密度分布、 $x = (r_{\text{eff}}/a_{99})$ である。温度分布に対しては $c_6$ まで、ホロー形状を有することがある密度分布に対しては $c_8$ までの係数を求めている。トラス内側／外側の対称性の観点から、 $x$ の偶数べき乗を用いてフィッティングを行っている。もちろん、プラズマ中心部に急峻な電子温度勾配を有する高電子温度プラズマ[12]など、ガウス分布の寄与も加味した関数形[13]を用いる方がより妥当である場合もあり、個別にそのような対応も行われている。

また、複数イオン種の存在を考慮した数値解析コード開発の進展[14, 15]に伴って、炭素イオン( $C^{6+}$ )密度分布（荷電交換分光[16]）や、軽水素イオン( $H^+$ )／ヘリウムイオン( $He^{2+}$ )密度比（周辺部における分光計測[17]から径方向一定と仮定）を加味して、これらイオン種の密度分布に関するフィッティング係数も求めるように整備を進めた。プラズマ内部での水素、ヘリウム密度分布を荷電交換分光計測から求める[18]ことも行われており、この進展も密度分布データ整備の改善に取り込んでいく予定である。

これらのフィッティング係数は、LHD解析データサーバ[19]に、表1に示すような解析データ（いわゆるeg形式ファイル）として登録されている。図1において、密度・温度分布計測データからLHD解析データサーバ、密度・温度分布のフィッティング係数列と書かれている部分が本節の内容に対応する。

表1 各種分布データのフィッティング係数が格納されている解析データ名。

分布データ	解析データ名
電子密度, 電子温度	tswpe
イオン温度	cxswpi7, cxsecti7(高空間分解能) cxswpi6, cxsecti6(高時間分解能)
$H^+$ , $C^{6+}$ , $He^{2+}$ 密度 ( $C^{6+}$ 密度計測データがあるタイミングのみ)	nion_6_fit

### 3. データ共有による数値解析コードベンチマーク活動促進の実例

本節では、2章で述べたデータの共有による数値解析コードベンチマーク活動促進の実例を紹介する。

近年、複数イオン種の存在を考慮した、ヘリカル系新古典輸送解析コードの開発が各極において行われている。FORTEC-3D [20], DKES [21]/PENTA [22], SFINCS [23], EUTERPE [24]などが代表例である。これら数値解析コード間のベンチマークは、CWGMにおいても不純物輸送解析と相まって議題として取り上げられている。

また、TASK3D-aは、最近、DKES/PENTAコードと連携した [25]。これまでのTASK3D-aの要素計算コードは、ローカルなサーバで自動かつ連続した計算が実行可能であったが、これと対照的にDKES/PENTAは、CPUコア数、メモリともに格段に大きな資源を必要とするため、TASK3D-aのサーバ群で、他の要素計算コードと同様に自動かつ連続した実行を行うことは現実的に不可能である。このため、TASK3D-aの実行段階では、TASK3D-aの計算が行われるタイミング全てに対して、DKES/PENTAの計算実行に必要な入力データ一式を逐次自動的に準備するに留め、ユーザー自身が、興味のあるタイミングの入力データ一式を大型計算機（例えば、核融合研のプラズマシミュレータ）に手動でコピーしてDKES/PENTAの計算を実行することとした。今後、TASK3D-aが、多様な大規模シミュレーションコードと連携を行っていく上でのモデルケースとなるものである。

SFINCSに関しては、開発者本人のLHDプラズマ解析への参画の意向に応じて、プラズマ流計測結果に関する論文 [26]で提示されていたケース（放電番号90493, 時刻2.33 s）の3次元平衡データ、温度・密度分布（当時は、イオン密度の情報はH<sup>+</sup>とC<sup>6+</sup>のみ）を送付し、計算実行可能である

ことを確認しつつ、計算結果を入手していた。これと同様のデータ一式でDKES/PENTAを実行した（momentum-correction [27]適用なし）。図2に、 $r_{\text{eff}}/a_{99} = 0.5$ における (a) 2種のイオン（H<sup>+</sup>とC<sup>6+</sup>）と電子の粒子拡散フラックス、(b) C<sup>6+</sup>の粒子拡散フラックス ((a)のズームアウト)の径電場依存性を示している。SFINCSの結果は、Fokker Planck full trajectory, Pitch angle scattering DKES trajectory, Pitch angle scattering full trajectoryの3ケース [23]が示されている。このように両数値解析コード間のベンチマークを行うことができています。

また、CIEMAT（エネルギー環境科学技術研究センター：スペイン）において用いられているDKESコード [28]には、イオン温度5 keV超のケース（放電番号113208, 時刻4.84 s）のデータを提供し、図3に示すように、DKES/PENTAにおけるDKES計算結果の確認という観点での比較を行うことができています。同一の計算コードであっても、それぞれの導入先での入出力インターフェイスの改良などが独自に行われていることがあるため、このように両者での比較を行った。これにより、少なくともこの両者の間では、同一の平衡・分布データの共有が有効であることが確認できた。

このようなデータ提供・共有を通じて、これらの数値解析コード間で、TASK3D-aで統一的に準備されるデータ一式で計算を行えることとVerificationが可能であることが確かめられた。

上記のケースとは別の放電・タイミングのケースではあるが、同様のデータ一式は、FORTEC-3DやGKV-X [29], 複数イオン種に対応したNBI加熱計算コード [30]などにも提供され、それぞれの計算に活用されている。それぞれの数値解析コードの実行にはコードごとに異なるフォーマットの分布入力データファイルを準備する必要が

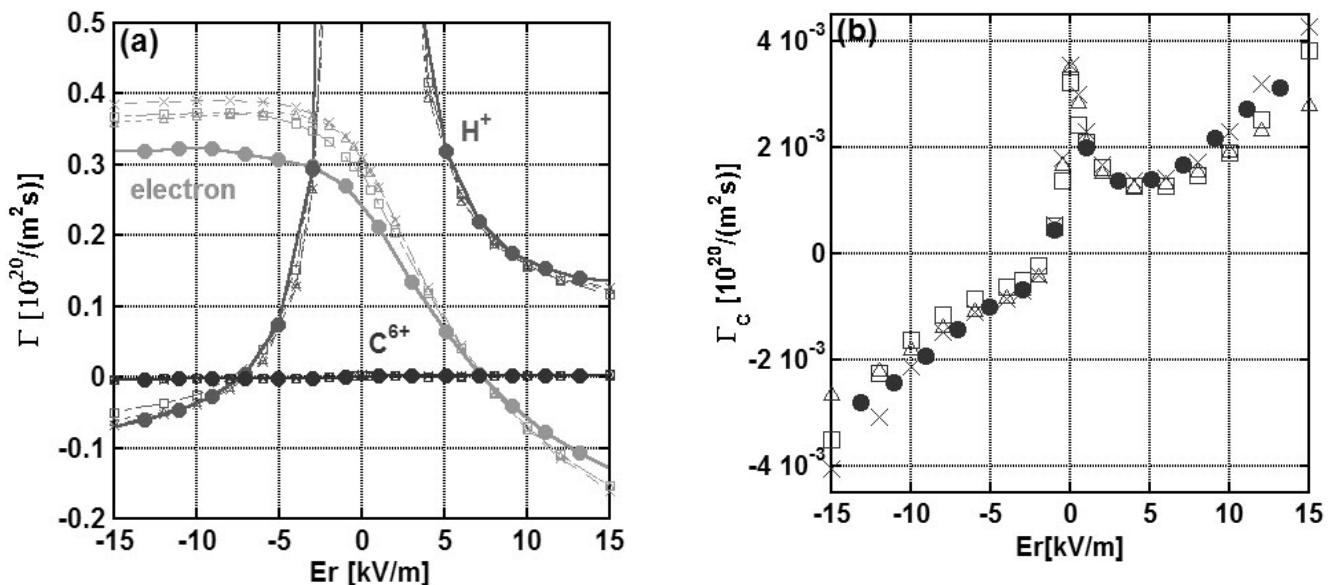


図2 LHDの放電番号90493, 時刻2.33 s [26]の3次元平衡、温度・密度分布（イオン密度の情報はH<sup>+</sup>とC<sup>6+</sup>のみ）を共有して行った、SFINCSコード（Fokker Planck full trajectory (□), Pitch angle scattering DKES trajectory (×), Pitch angle scattering full trajectory (△)の3ケース）と、TASK3D-aと連携したDKES/PENTAコード（塗りつぶし記号, momentum-correction適用なし）のベンチマーク計算の一例。(a) 2種のイオン（H<sup>+</sup>とC<sup>6+</sup>）と電子の粒子拡散フラックス、(b) C<sup>6+</sup>の粒子拡散フラックス ((a)のズームアウト)の径電場依存性を示している。

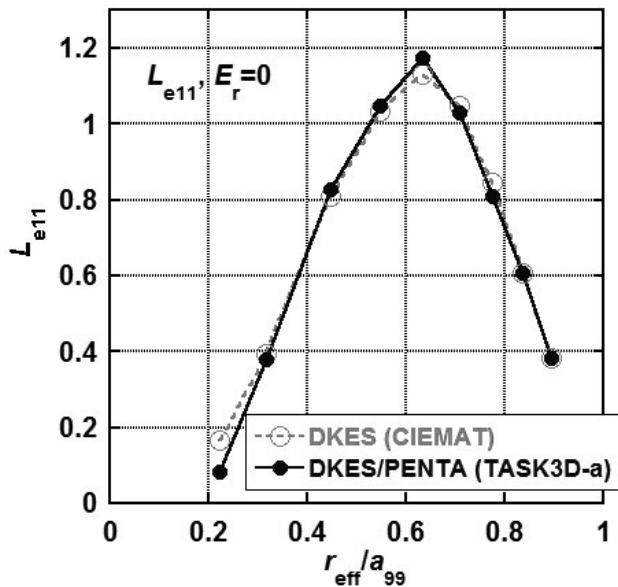


図3 LHDの放電番号113208, 時刻4.84 sの3次元平衡, 温度・密度分布を共有して行った, CIEMATにおけるDKESコード(点線)と, TASK3D-aと連携したDKES/PENTAコード(実線)の計算結果(単一エネルギー拡散係数)比較の一例. 径電場ゼロと仮定した場合の単一エネルギー電子拡散係数の径方向依存性を示している.

あるが, TASK3D-aの実行で複数の数値解析コード用の入力ファイルが自動的に生成され, それぞれのユーザーがすぐにシミュレーションを開始できるような環境を整備中である.

#### 4. まとめ

本稿では, TASK3D-aに基づいて生成される3次元平衡データと, LHD解析サーバに登録されている温度・密度分布のフィッティング係数をパッケージとして関係者間で共有することで, 国際的な数値解析コードベンチマーク活動の促進が図られていることを紹介した.

従前は, ベンチマークを行う際に, 平衡が同じであるか, 分布が同じであるか, などの確認が必要で手間取ることもあったが, この統一的な共有データの整備によって, そのような問題が解消された.

今後は, これまで散発的であった国際ステラレータ-ヘリオトロン分布データベース[31]への登録も活性化し, データベースの拡充とともに流通性を高めるとともに, さらに広範な物理課題に関連した数値解析コードへのデータ供給によって, V&V活動の促進に貢献していく予定である.

#### 謝辞

TASK3D-a開発・運用に携わっている共同研究者の皆様, 特に本稿の内容に関連した解析環境整備に対する鈴木千尋氏, 江本雅彦氏(ともに核融合研)の多大な貢献に感

謝いたします. また, SFINCSコードでの計算結果を提供いただいたM. Landreman博士(マサチューセッツ工科大学), DKESコードでの計算結果を提供いただいたJose-Luis Velasco博士(CIEMAT), および, DKES/PENTAコードを提供いただいたD.A. Spong博士(オークリッジ国立研究所)のご協力に感謝いたします.

なお, TASK3D-aの開発・運用共同研究は, 核融合科学研究所予算NIFS14UNTT006(数値実験炉プロジェクト), NIFS14KNTT025(一般共同研究)の支援を受けています.

#### 参考文献

- [1] C.D. Beidler *et al.*, Nucl. Fusion **51**, 076001 (2011).
- [2] A. Koenies *et al.*, ITR/P1-34, 24th IAEA Fusion Energy Conf. (2012, San Diego).
- [3] A.M. Dimits *et al.*, Phys. Plasmas **7**, 969 (2000).
- [4] <http://ishcdb.nifs.ac.jp/>
- [5] Stellarator News 150 (Oct., 2015), <http://web.ornl.gov/sci/fed/stelnews> (being under reconstruction).
- [6] M. Yokoyama *et al.*, Plasma Fusion Res. **9** Special Issue **2**, 3402017 (2014).
- [7] K. Narihara *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **72**, 1122 (2001).
- [8] C. Suzuki *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **55**, 014016 (2013).
- [9] S.P. Hirshman and J.C. Whitson, Phys. Fluids **26**, 3553 (1983).
- [10] M. Yokoyama *et al.*, Plasma Fusion Res. **8**, 2403016 (2013).
- [11] M. Emoto *et al.*, J. Plasma Fusion Res. **90**, 562 (2014).
- [12] H. Takahashi *et al.*, Phys. Plasmas **21**, 061506 (2014).
- [13] K. Ida *et al.*, Phys. Rev. Lett. **91**, 085003 (2003).
- [14] M. Nunami *et al.*, Plasma Fusion Res. **10**, 1403058 (2015).
- [15] M. Nakata *et al.*, TH/P2-2, 26th IAEA Fusion Energy Conference (2016, Kyoto).
- [16] M. Yoshinuma *et al.*, Fusion Sci. Tech. **58**, 375 (2010).
- [17] M. Goto *et al.*, Phys. Plasmas **10**, 1402 (2003).
- [18] K. Ida *et al.*, Rev. Sci. Instrum. **86**, 123514 (2015).
- [19] M. Emoto *et al.*, Fusion Eng. Design **81**, 2019 (2006).
- [20] S. Satake *et al.*, Plasma Fusion Res. **1**, 002 (2006).
- [21] S.P. Hirshman *et al.*, Phys. Fluids **29**, 2951 (1986).
- [22] D.A. Spong, Phys. Plasmas **12**, 056114 (2005).
- [23] M. Landreman *et al.*, Phys. Plasmas **21**, 042503 (2014).
- [24] G. Jost *et al.*, Phys. Plasmas **8**, 3321 (2001).
- [25] M. Sato and M. Yokoyama, NIFS memo 76 (Aug. 31, 2016).
- [26] K. Ida *et al.*, Nucl. Fusion **50**, 064007 (2010).
- [27] H. Sugama and S. Nishimura, Phys. Plasmas **15**, 042502 (2008).
- [28] Jose-Luis Velasco and F. Castejon, Plasma Phys. Control. Fusion **54**, 015005 (2012).
- [29] M. Nunami *et al.*, TH/P2-3, 26th IAEA Fusion Energy Conference (2016, Kyoto).
- [30] P. Vincenzi *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **58**, 125008 (2016).
- [31] <https://ishpdb.ipp-hgw.mpg.de/>