

面向大规模并行的全隐式托卡马克 MHD 数值模拟*

蒋子超¹, 江俊扬¹, 孙哲², 姚清河¹

1. 中山大学航空航天学院, 广东 广州 510006
2. 日本理化学研究所, 日本 东京 197-0804

摘要: 提出了一种基于环形托卡马克模型的 MHD (magneto hydrodynamic) 方程并行求解算法, 开展了等离子体的非理想 MHD 不稳定性及其演化过程的数值模拟, 采用了全隐式的离散方法, 并运用 Newton-Krylov 方法求解非线性系统。相对传统算法, 文章提出的基于全隐格式的求解算法具有时间步长限制小、并行可扩展性高的优势, 对于大规模的并行计算具有良好的适应性。根据在超级计算平台上的并行测试结果, 文章开发的求解器在大规模并行中具有良好的并行效率与并行可扩展性, 与传统求解算法结果具有良好的数值一致性, 可适用于大规模的并行磁流体仿真计算。

关键词: 磁流体动力学; 并行计算; 等离子体仿真; 磁流体不稳定性

中图分类号: O361.7 **文献标志码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2021) 06-0009-06

Large-scale parallel simulation of MHD in Tokamak based on a fully implicit method

JIANG Zichao¹, JIANG Junyang¹, SUN Zhe², YAO Qinghe¹

1. School of Aeronautics and Astronautics, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510006, China
2. Institute of Physical and Chemical Research, Tokyo 197-0804, Japan

Abstract: In this paper, a parallel solving algorithm for the MHD equations based on the toroidal tokamak model is proposed, and the algorithm focuses on the numerical simulation of the nonideal MHD instability and its development process. In the proposed algorithm, we selected a fully-implicit scheme in the discretization, which has less limited time steps than the classic methods, and Newton-Krylov method for solving the nonlinear systems. Furthermore, according to the scalability test on the HPC platform, the solver based on the proposed algorithm has high parallel efficiency in the large-scale parallel computation, and the computational result has a good numerical consistency with the classic solvers. Therefore, the proposed algorithm has excellent adaptability for large-scale numerical simulation of MHD in the Tokamak plasma.

Key words: magneto hydrodynamic; parallel computation; plasma simulation; magneto hydrodynamic instability

* 收稿日期: 2020-06-13 录用日期: 2020-07-23 网络首发日期: 2020-11-12
基金项目: 国家重点研发计划国际合作项目 (2018YFE9103900); 国家自然科学基金 (11972384)
作者简介: 蒋子超 (1996年生), 男; 研究方向: 计算流体力学、并行算法、偏微分方程数值解;
E-mail: jiangzch3@mail2.sysu.edu.cn
通信作者: 姚清河 (1980年生), 男; 研究方向: 计算流体力学、并行算法、偏微分方程数值解;
E-mail: yaoqhe@mail.sysu.edu.cn

等离子体的 MHD 不稳定性是限制托卡马克等磁约束核聚变装置长期稳定运行的主要因素之一。撕裂模等 MHD 不稳定性的发展容易导致磁面破坏、输运增强, 从而导致等离子体的约束退化。因此, 探索等离子体不稳定性的抑制手段已经成为目前磁约束核聚变研究中的关键问题之一^[1]。

针对托卡马克中的磁流体不稳定性, 目前学界多采用基于 MHD 方程的数值模拟方法进行研究。20 世纪 90 年代, Barmin^[2] 和 Nesyahu 等^[3] 已分别采用逆风格式和二阶精度高分辨率无振荡的中心差分格式求解一维/二维 MHD 方程^[4]。此后, 学界开始尝试对三维托卡马克位形下的等离子体进行数值模拟, 但是受制于有限的计算能力, 针对托卡马克等离子体的仿真求解器多基于全显或半隐格式, 且问题规模和模型精度也较为受限。Harned 和 Kerner^[5] 以及 Harned 和 Schnack 等^[6-7] 首先提出了简化代数算子的方法以半隐格式进行求解, 近年来经过多次改进与优化^[5-7], 目前已被广泛应用于 MHD 仿真计算领域求解器的开发, 例如: XTOR^[8] 和 NIMROD^[9]。此外, 较为成熟的托卡马克磁流体求解器还有 M3D^[10]、BOUT++^[11] 等; 我国比较成熟的托卡马克等离子体求解器包括浙江大学马志为教授团队开发的 CLT^[12]/CLT-K^[13] 求解器。

虽然基于全显式和半隐式的求解器已经取得了许多计算成果, 但是基于此开发的求解算法的时间步长严格受限于 CFL (courant-friedrichs-lewy) 条件。撕裂模等 MHD 不稳定性的形成及饱和过程的模拟需要较长的时间跨度 (通常大于 10^4 个 Alfvén 时间), 因此全显式和半隐式将导致过多的计算步数, 而采用全隐格式则可解除 CFL 条件的限制, 实现较大时间步长的全局求解。此外, 捕捉非理想等离子体不稳定性需要高分辨率网格, 但对计算机内存以及计算机求解能力的要求就越严苛, 一般的主机和集群无法满足要求。

基于上述因素, 本文提出了一种面向大规模并行计算的 MHD 方程组的全隐式数值求解方法, 对托卡马克等离子体的撕裂模不稳定性进行了数值模拟。本研究以浙江大学马志为教授团队开发的显格式求解器 CLT 为参考, 采用了与之相同的稳态等离子体物理场数据与几何模型, 并基于 MPI 和并行开源框架 PetSc 开发了新型全隐式求解器。本研究在日本理化学研究所 (RIKEN) 的 HOKU-SAI 高性能计算平台上完成了对所开发求解器的并

行可扩展性测试, 并得到了托卡马克等离子体撕裂模的模拟结果。

1 数值模型及算法实现

针对托卡马克等离子体的撕裂模不稳定性, 采用带 Hall 项的非理想单流体 MHD 方程^[14-15], 并假定等离子体为冷等离子体, 即电子压力与流体压力相等, 可得

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho v) + \nabla \cdot [D \nabla (\rho - \rho_0)], \\ \frac{\partial p}{\partial t} = -v \cdot \nabla p - \Gamma p \nabla \cdot v \\ \quad + \nabla \cdot [\kappa \nabla (p - p_0)], \\ \frac{\partial v}{\partial t} = -v \cdot \nabla v + (J \times B - \nabla p) / \rho \\ \quad + \nabla \cdot [\nu \nabla (v - v_0)], \\ \frac{\partial B}{\partial t} = -\nabla \times E, \\ E = -v \times B + \eta (J - J_0) \\ \quad + \frac{c}{\omega \rho} (J \times B - \nabla p), \\ J = \nabla \times B. \end{array} \right. \quad (1)$$

式中待解变量 ρ, p, v, E, B, J 分别为等离子体的密度、压力、速度、电场、磁感应强度与电流密度。参量 η, κ, ν, D 分别为等离子体的电阻、热传导速度、运动粘度、扩散系数; Γ 为等离子体绝热系数, 一般取 $\Gamma = \frac{5}{3}$; 常数 c 为光速, ω 为等离子体频率; 下标 0 表示平衡态的物理量取值, 即初始条件中各物理量取值。上述变量均经过了无量纲化处理, 即

$$\frac{x}{a} \rightarrow x, \frac{B}{B_m} \rightarrow B, \frac{\rho}{\rho_m} \rightarrow \rho, \frac{v}{v_\alpha} \rightarrow v, \frac{t}{\tau_\alpha} \rightarrow t,$$

$$\frac{p}{\left(\frac{B_m^2}{\mu_0}\right)} \rightarrow p, \frac{J}{\left(\frac{B_m^2}{\mu_0 a}\right)} \rightarrow J, \frac{E}{v_\alpha B_m} \rightarrow E, \frac{\eta}{\left(\frac{\mu_0 a^2}{\tau_\alpha}\right)} \rightarrow \eta,$$

其中 a 为环形 Tokamak 圆截面的半径, 又称为小半径; B_m 为平衡态中磁轴处的磁感应强度; ρ_m 为平衡态中磁轴处的等离子体密度; 阿尔芬时间 (Alfvénic time) $\tau_\alpha = \frac{a}{v_\alpha}$; 阿尔芬速度 (Alfvénic

speed) $v_\alpha = B_m(\mu_0 a)^{1/2}$, 上述参量均可由模型确定。

进一步, 将方程(1)中电场和电流密度方程分别代入速度方程与磁场方程, 即可消去待解变量 E 、 J 得到方程(2), 从而减少待求解变量的数目, 进而节约存储开销。

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho v) + \nabla \cdot [D \nabla (\rho - \rho_0)], \\ \frac{\partial p}{\partial t} = -v \cdot \nabla p - \Gamma p \nabla \cdot v \\ \quad + \nabla \cdot [\kappa \nabla (p - p_0)], \\ \frac{\partial v}{\partial t} = -v \cdot \nabla v + [(\nabla \times B) \times B - \nabla p] / \rho \\ \quad + \nabla \cdot [\nu \nabla (v - v_0)], \\ \frac{\partial B}{\partial t} = \nabla \times (v \times B) \\ \quad - \nabla \times \{ \eta (\nabla \times B - J_0) \\ \quad + \frac{c}{\omega \rho} [(\nabla \times B) \times B - \nabla p_e] \}. \end{array} \right. \quad (2)$$

为了研究托卡马克中磁流体动力学效应, 可取如图1所示的几何模型, 其中 a 为截面圆半径, R 为截面圆圆心所在的大圆半径, 简称环半径。

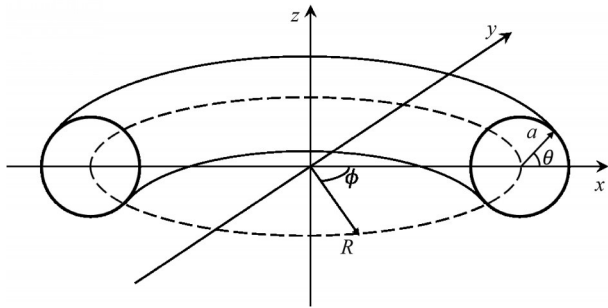


图1 托卡马克模型
Fig. 1 Tokamak model

对应的扰动模式, 使体系产生不稳定性效应。等离子体处于平衡态时, 方程(2)忽略了霍尔效应, 且时间导数项为0, 可以得到平衡态时的方程。借助专门针对平衡场求解的NOVA程序^[16], 对图1所示的模型进行平衡态的求解, 其结果可作为模拟等离子体不稳定性初始分布场。对于图1所示模型中的撕裂模不稳定性, 扰动模式如式(3)所示。

$$\eta_t = \eta_0 \cos(n\phi + m\theta) \exp\left(-\left(\frac{\psi(x, z) - \bar{\psi}}{\delta}\right)^2\right), \quad (3)$$

式中 ϕ 为该点环向角, θ 为该点的极向角; η_0 是背景电阻率, 在计算过程中为固定值; ψ 是磁通量, 由具体模型确定; 系数 $\bar{\psi}$ 为磁轴位置, 在本文算例中均取-0.095 83, 系数 δ 为常数, 取0.03。系数 m 与 n 确定了扰动模式的类型, 如撕裂模对应 $m/n = 2/1$, 扭曲模对应 $m/n = 1/1$ 。

由式(3)可知, 扰动模式与时间无关, 且服从系数为 $\bar{\psi}$ 与 δ 的高斯分布。在对方程(2)的实际数值求解过程中, 需根据 Maxwell 方程组计算出相应的磁场扰动 B_p 以引入计算, 磁场扰动为

$$B_p = \Delta t \nabla \times E_p = \Delta t (\nabla \eta_t \times J_0 + \eta_t \nabla \times J_0). \quad (4)$$

结合方程(2)的数值特性与磁流体不稳定性模拟中对求解精度的要求, 本算法采用了全隐式的4阶Crank-Nicholson格式进行有限差分离散以保证求解的数值精度与稳定性, 对于离散后的非线性系统, 本文采用了Newton-Krylov法进行迭代求解, 其流程如图2所示。

由图2可知, 求解过程以平衡态下的物理场作为求解的初始条件, 算法采用了两层嵌套的迭代计算: 在每个时间步中, 首先根据差分方程计算出雅克比矩阵, 然后利用基于并行Krylov子空间的迭代法对所得线性系统进行求解, 求得各牛顿步的增量, 若该增量小于收敛判据, 则推进至下一个时间步的计算。特别地, 在计算开始的一定数量的时间步内(在本文中, 取计算时间 $< 1\tau_a$ 作为判据), 在每个牛顿步收敛后将由式(4)计算的扰动磁场添加至计算结果中, 随后进入下一个时间步的循环。

2 结果分析

为验证本文提出的数值模拟方法与求解器的可靠性, 选择 $m/n = 2/1$ 的撕裂模算例, 取 $\eta_0 = 10^{-5}$, 与CLT求解器在同模型下的计算结果进行对比, 如图3所示。由图3可明显观察到磁场的撕裂模不稳定性, 本文提出的求解器与CLT的计算结果在物理场分布上具有较好的一致性。

为进一步验证本文提出算法的精度与结果的网格独立性, 分别对同模型下取不同空间步长时的计算结果的相对误差进行校验。由于本物理模型不存在精确的解析解, 在如图4所示的精度校验中, 本文选用了具有最高空间网格密度的算例作为计算误差的基准算例, 并以式(5)进行相对精度阶数的计算, 具体误差数据如表1所示。计算误

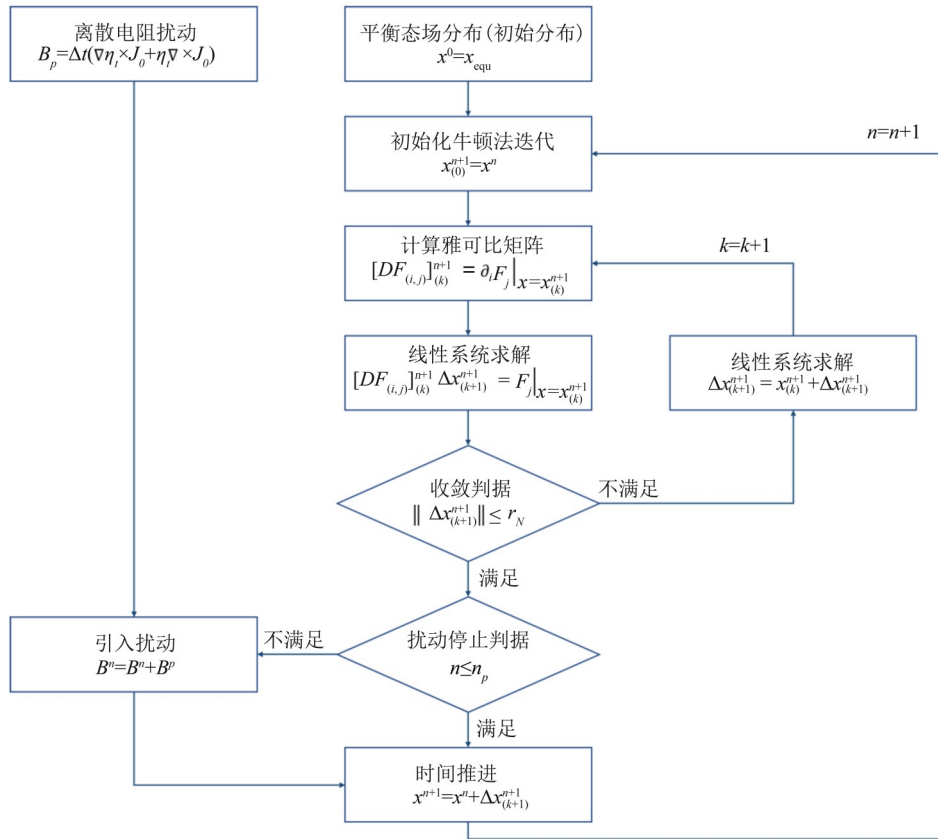


图2 求解器算法流程

Fig. 2 Algorithm flow of the solver

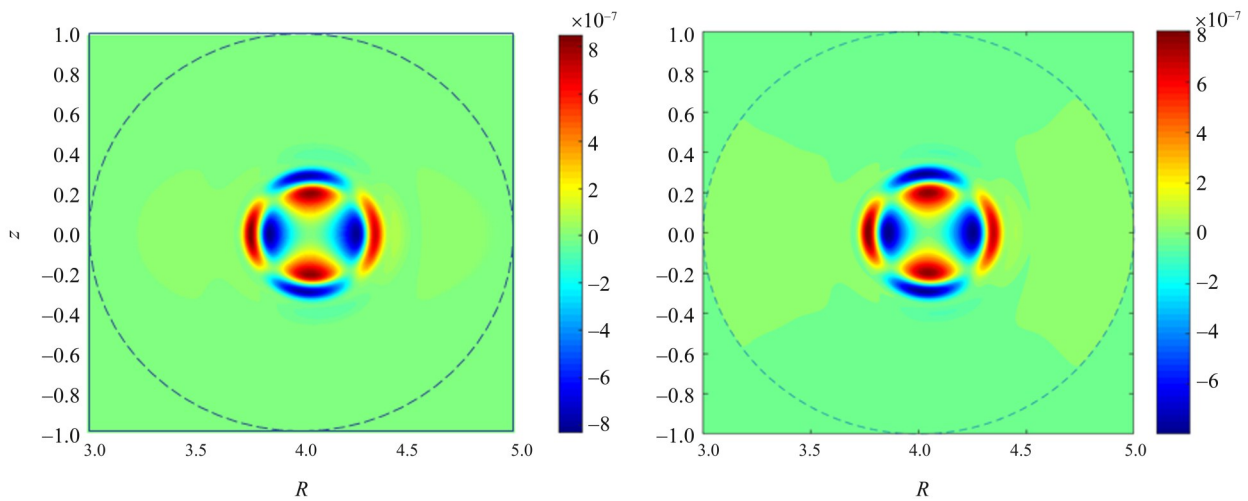


图3 70\tau_a时环向磁场强度计算结果对比

Fig.3 Calculation results of circumferential magnetic field strength when 70\tau_a

差数据选取环向磁场与环向速度场的计算结果，并以环向空间步长为 1/8 时的算例为参考，计算其相对精度阶数。

相对精度阶数

$$= \frac{\log \|u_1 - u^*\| - \log \|u_2 - u^*\|}{\log \Delta x_1 - \log \Delta x_2}, \quad (5)$$

式中 u^* 表示网格密度最高的近似精确解。本文以环向空间步长 $\Delta\phi$ 作为空间网格密度的控制变量，并假设 $\Delta\phi = 1/64$ 时的计算结果为近似精确解；可以证明，当趋近于解析解时，由式 (5) 计算得到的相对精度阶数趋向于实际精度阶数。

表1 不同环向空间步长下环向磁场与速度场的相对误差与相对精度阶数
Table 1 Relative error and relative accuracy order of B_ϕ , V_ϕ under different $\Delta\phi$

$\Delta\phi$	B_ϕ	相对精度阶数	$\Delta\phi$	V_ϕ	相对精度阶数
1/8	8.04×10^{-8}	-	1/8	2.88×10^{-7}	-
1/16	5.29×10^{-9}	3.93	1/16	1.89×10^{-8}	3.93
1/24	1.04×10^{-9}	4.01	1/24	3.72×10^{-8}	4.01
1/32	3.17×10^{-10}	4.13	1/32	1.13×10^{-9}	4.14

由图4与表1可知, 在该托卡马克磁流体撕裂模不稳定性的算例中, 算法表现出良好的网格独立性, 且具有近似4阶精度, 与算法所采用的差分离散格式的理论精度保持一致。

在并行效率与可扩展性方面, 使用基于本文提出的求解器进行了测试, 测试结果如图5所示, 其中相对加速比根据式(6)计算得到, 直接反映了求解器对于计算资源的利用效率, 即弱可扩展性。

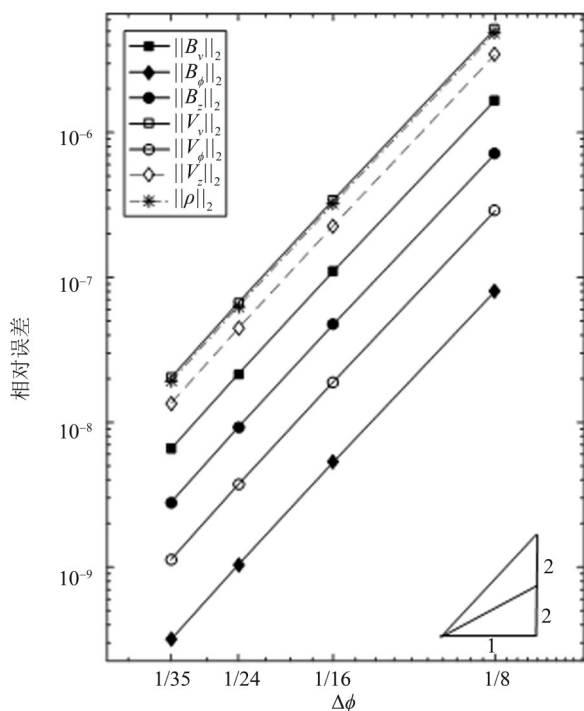


图4 不同环向空间步长下各待解变量的相对误差

Fig. 4 The relative error of variables under different $\Delta\phi$

$$\text{相对加速比} = \frac{t_n n^*}{t^* n} \quad (6)$$

式中 t^* 与 n^* 分别为基准点核心数与计算时间 (本测试中, 选用160核心作为基准测试点), t_n 为核心数为 n 时的计算时间。

本文采用的测试平台是日本理化学研究所 (RIKEN) 的 HOKUSAI 超级计算机, 测试中分别对

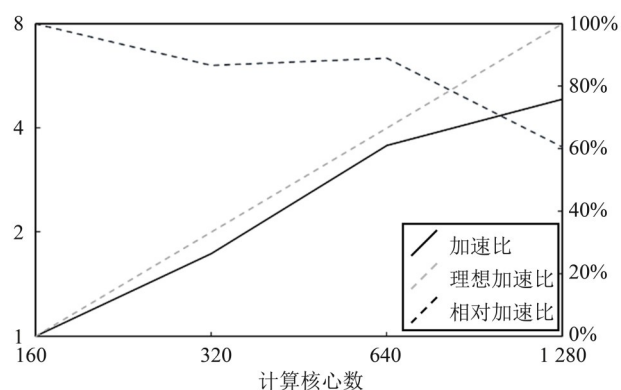


图5 并行可扩展性测试结果

Fig. 5 Parallel scalability test results

160、320、640、1280核心下求解器的计算效率进行了测试。表2中展示了单步求解的平均耗时数据, 相对加速比参照式(6)计算。由图5可知, 对于一千核以上级别的大规模并行计算, 基于本文提出的算法开发的求解器依然可以保持60%以上的并行效率, 由此可见本求解器在实际的大规模磁流体仿真求解中具有较高的使用可行性与参考意义。

表2 $100\tau_a$ 内单步求解的平均耗时及相对加速度

Table 2 Average time consuming and relative acceleration of single step solution in $100\tau_a$

计算核心数	单步平均耗时/s	相对加速比/%
160	33.708 362 51	100
320	19.460 931 51	86.61
640	9.464 195 428	89.04
1280	6.956 566 243	60.57

3 结论

本文基于全隐格式有限差分法及大规模并行模拟提出了一种新型的并行求解MHD方程的算法, 并基于该算法对托卡马克装置中的磁流体撕裂模不稳定性进行了验证性的仿真模拟, 结果与基于全显格式开发的CLT求解器吻合良好。

在并行效率方面,求解器在HOKUSAI高性能计算平台上进行了可扩展性测试,结果表明:该算法对于跨节点的并行平台具有良好的并行效率

与可扩展性,可适用于大规模并行求解。这对于进一步研究更高精度格式与更接近真实托卡马克装置模型的仿真计算具有重要的参考意义。

参考文献:

- [1] 何开辉,潘传红,冯开明.托卡马克等离子体大破裂及防治综述[J].中国核科技报告,2002(00):117-129.
- [2] BARMIN A A, KULIKOVSKIY A G, POGORELOV N V. Shock-capturing approach and nonevolutionary solutions in magnetohydrodynamics [J]. *Journal of Computational Physics*, 1996, 126(1): 77-90.
- [3] NESSYAHU H, TADMOR E. Non-oscillatory central differencing for hyperbolic conservation laws [J]. *Journal of Computational Physics*, 1990, 87(2): 408-463.
- [4] 陶詹晶.磁流体力学方程的高效数值方法研究[D].南昌:南昌航空大学,2011.
- [5] HARNED D S, KERNER W. Semi-implicit method for three-dimensional compressible magnetohydrodynamic simulation [J]. *Journal of Computational Physics*, 1985, 60(1): 62-75.
- [6] SCHNACK D D, BARNES D C, MIKIC Z, et al. Semi-implicit magnetohydrodynamic calculations [J]. *Journal of Computational Physics*, 1987, 70(2): 330-354.
- [7] HARNED D S, SCHNACK D D. Semi-implicit method for long time scale magnetohydrodynamic computations in three dimensions [J]. *Journal of Computational Physics*, 1986, 65(1): 57-70.
- [8] LÜTJENS H, LUCIANI J F. The XTOR code for nonlinear 3D simulations of MHD instabilities in Tokamak plasmas [J]. *Journal of Computational Physics*, 2008, 227(14): 6944-6966.
- [9] PLIMPTON S J, SCHNACK D D, TARDITI A, et al. Nonlinear magnetohydrodynamics simulation using high-order finite elements [J]. *Journal of Computational Physics*, 2005, 195(1): 355-386.
- [10] PARK W, BELOVA E V, FU G Y, et al. Plasma simulation studies using multilevel physics models [J]. *Physics of Plasmas*, 2000, 6(5): 1796-1803.
- [11] DUDSON B D, UMANSKY M V, XU X Q, et al. BOUT: A framework for parallel plasma fluid simulations [J]. *Computer Physics Communications*, 2008, 180(9): 1467-1480.
- [12] WANG S, MA Z W. Influence of toroidal rotation on resistive tearing modes in tokamaks [J]. *Physics of Plasmas*, 2015, 22(12): 2251-S202.
- [13] ZHU J, FU G Y, MA Z W. Nonlinear dynamics of toroidal Alfvén eigenmodes driven by energetic particles [J]. *Physics of Plasmas*, 2013, 20(7): 21-E.
- [14] SAKAI J I, FUSHIKI T. 3-D MHD simulation of the generation of a shell current loop with closure current [J]. *Solar Physics*, 1995, 156(2): 281-292.
- [15] ZHANG X G, PU Z Y, MA Z W, et al. Roles of initial current carrier in the distribution of field-aligned current in 3-D Hall MHD simulations [J]. *Science in China*, 2008, 51(3): 323-336.
- [16] CHENG C Z, CHANCE M S. NOVA: A nonvariational code for solving the MHD stability of axisymmetric toroidal plasmas [J]. *Journal of Computational Physics*, 1987, 71(1): 124-146.

(责任编辑 王海蓉)