B10　粒子モデルによるプラズマ・シミュレーション

田村栄悦（日本アイ・ビー・エム東京第1データ・センター）

§1　プラズマ・シミュレーション

プラズマの理論計算には大別してプラズマを連続体として流体力学の方程式から求めるものと粒子としてシミュレーションを行って理解を得る二つに分けられる．前者は高密度で衝突の激しい状態のプラズマに対しては良く表現でき小型計算機でも扱えるので比較的なされているが，そうした場合を除いてはプラズマのふるまいは複雑な多体問題を解く事になってプラズマ粒子の運動と相互作用の場を刻々シミュレーションして求めていく方法が有効である．衝突の影響がなければプラズマを支配する運動方程式と相互作用の場は電磁気的な物で完全に記述でき難しさは多体問題としての複雑さにあるので計算機向きの問題であるとも言える．

§2　シミュレーション・プログラムの機能

プラズマ・シミュレーションは長い計算時間を要する上にシミュレーションを進めるまでは結果の予想がつかずさらに膨大な量のデータが人手で処理できない程発生するので，最近の原子核実験で代表される大規模な実験に良く見られるような問題が多い．こうした実験で要求される事は，

1. 精度の高い安定な実験装置
2. 広い意味でSignal/Noiseが良い
3. 現在の実験状況がモニターできる
4. 実験データの処理が速い
5. 一時中断しても連続して再開始できる

等であろう．シミュレーションについても同様に

1. モデル化による歪みが小さい適切な計算モデルと計算誤差の集積が無視でき発散を生じない数値計算法
2. 統計誤差に関連する単位メッシュ当りの粒子数が十分多く，メッシュ間の場の変化がなめらかで差分近似によるノイズが小さいメッシュのとり方
3. シミュレーションの進行状況をリアル・タイムでモニターできる．
4. データ処理を計算機で行なう
5. リスタート可能

が同じ意味で必要である．

こうして考えるとシミュレーション・プログラムはその機能として，

1. シミュレーション計算

2. モニター及びデータ処理

3. リスタート

の3つが必要でデータ処理の部分は独立しても働く事が要求されよう．上の3つを独立なモジュールとする事も考えられる．

§3　計算モデル

計算モデルはGuiding-Centor Drift Modelを用いている．これはプラズマ自身が作る電磁場の中をプラズマ粒子（陽子と電子）が磁力線にからみつくようにして旋回しながら運動しているがこの旋回中心を粒子の位置と考えて追跡していく．

プラズマ粒子の運動　　　　　　　　断面図

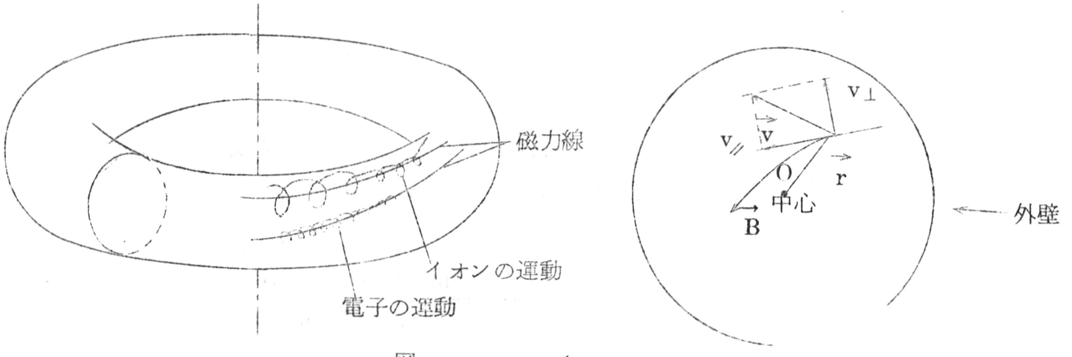


図　1

粒子の運動方程式（Guiding-Centor Drift Equation）は

$$\frac{d\vec{r}}{dt}=v_{/\!/}\cdot\vec{n}+\vec{V}_{\pm}\pm\frac{1}{\Omega_{\pm}B}\left(\frac{\mu_{\pm}B}{m_{\pm}}+v_{/\!/}^{2}\right)\cdot\vec{n}\times\vec{\nabla}B$$

$$\frac{dv_{/\!/}}{dt}=-\frac{1}{m_{\pm}}\vec{n}\,\vec{\nabla}(\mu B\pm e\Phi)+\frac{v_{/\!/}}{B}\vec{V}\cdot\vec{\nabla}B \qquad (3-1)$$

$$\frac{d\mu}{dt}=0$$

但し

$$\vec{V}=-\frac{\vec{\nabla}\Phi\times\vec{n}}{B}$$

$\Omega_{\pm}$ は旋回角速度で

$$\Omega_{\pm}=\frac{eB}{m_{\pm}}$$

$\mu_{\pm}$ は粒子の磁気モーメントで

$$\mu_{\pm}=\frac{mv^2_{\perp}}{2B}$$

である.

Φ, $\vec{B}$ は静電ポテンシャル，磁場を示す. $\vec{n}$ は磁場方向の単位ベクトルで

$$\vec{n}=\vec{B}/B$$

±はイオン(+)，電子(−)を示し，$v_{/\!/}$，$v_{\perp}$ は磁場に平行，垂直な速度成分を示す.

ポテンシャルΦは電荷分布$\rho_{\pm}(r)$を与えてポアソン方程式を解き求まる.

$$\nabla^2\Phi(\vec{r})=-(\rho_+(\vec{r})-\rho_-(\vec{r}))/\varepsilon_0 \qquad (3-2)$$

磁場$\vec{B}$はプラズマ圧力Pを与えることによりマクスウェル方程式を解いて求まる.

$$\vec{J}=\frac{1}{\mu_0}\vec{\nabla}\times\vec{B}$$

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{B}=0$$

$$\vec{J}\times\vec{B}=\vec{\nabla}P$$

$\vec{J}$はプラズマ電流である.

主要な式はこの3つであるが，プラズマ・シミュレーションは計算時間との競争なので，解法上どの式をとっても問題は大きい. ちなみに数少いシミュレーション論文の一つを示す.

Smith and Bishop達の例と目標との比較

〔1〕

	目 標 値	Smith & Bishopの例
追跡粒子数	10,000	57,600
メッシュ数	1,000	144
運動方程式の積分法	オイラー法	プレディクター・コレクター法
磁場計算	あり	あり
ポテンシャル計算	あり(FACR法)	あり(差分法)
空間体系	トロイダル	トロイダル
1ステップの計算時間	15sec(CPU)	200sec〜1000sec(推定)
全計算時間	1.5時間/500ステップ	35時間
使用計算機	S/360J75	IBM7094

図 2

§4 シミュレーションの体系

1 座標系の選択

計算を容易にするために座標系は擬トロイダル座標系(r, θ, ζ)と円筒座標系(R, Θ, Z)の組み合せた物を用いる. 粒子の三次元運動はZ一軸に関して軸対称性を仮定して(r, θ)平面上に投影した二次元運動として求める.

座標系

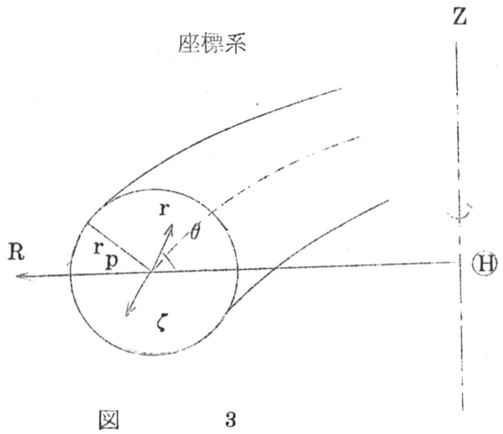


図　　　3

2　メッシュの切り方

空間分布を求めるためのメッシュの切り方は（r^2, θ）について等間隔に分割する.

$$\Delta r_i^2 = i \Delta r^2 \qquad i = 0,\ 1,\ \cdots\cdots,\ N_r$$

$$\theta_j = j \Delta\theta \qquad j = 1,\ 2,\ \cdots\cdots,\ N_\theta$$

但し

$$\Delta r^2 = r_p^2 / N_r$$

$$\Delta\theta = 2\pi / N_\theta$$

N_θ, N_r は θ 及び r 方向の分割数.

こうするとメッシュの面積が全部等しくなり粒子数のバラツキが各メッシュで一様になるし，平滑化する場合も便利である.

§5　数値計算法

1　運動方程式

運動方程式（3－1）は時間ステップ毎にシミュレーション粒子の個数だけ解かれなければならないので計算時間に最も影響する.

実質的には r, θ, $v_{/\!/}$ を未知数とする三元連立常微分方程式であるので一般には安定性や精度の良いルンゲークッタ法とかプレディクター・コレクター法が用いられるが，方程式の右辺が場を含む複雑な形なので，誤差評価は大きくなるが最も簡潔なオイラー法によっている.

$$\vec{r}(t+\Delta t) = \vec{r}(t) + v_{/\!/}(t)\vec{n} + \vec{V}_{\pm}(t) + \frac{1}{\Omega_{\pm} B(t)}\left(\frac{\mu^{\pm} B(t)}{m_{\pm}} + v_{/\!/}^2(t)\right)\vec{n} \times \vec{\nabla} B(t) \qquad (5-1)$$

$$v_{/\!/}(t+\Delta t) = v_{/\!/}(t) - \frac{1}{m_{\pm}}\vec{n}\vec{\nabla}\left(\mu B(t) \pm e\Phi(t)\right) + \frac{v_{/\!/}(t)}{B(t)}\vec{V}(t)\vec{\nabla} B(t)$$

2 ポテンシャル計算

ポアソン方程式は高速解法であるFourier Analysis/Cyclic Reduction (FACR) Method 〔2〕を用いている．但しドーナッツの主半径がドーナッツ断面半径r_pに較べ十分大きいとし，ポテンシャルに関しては円筒座標を用いる．そうすると（3－2）式は

$$\nabla^2 \Phi = \frac{\partial^2 \Phi(r,\theta)}{\partial r^2} + \frac{\partial \Phi(r,\theta)}{r\,\partial r} + \frac{\partial^2 \Phi(r,\theta)}{r^2\,\partial \theta^2}$$

$$= -\frac{\rho(r,\theta)}{\varepsilon_0} \equiv q(r,\theta) \qquad (5-2)$$

となる．

これを5点差分近似すると

$$\Phi_{s,\,t+1} + (A_t \Phi_{s+1,\,t} + B_t \Phi_{s,\,t} + A_t \Phi_{s-1,\,t}) + C_t \Phi_{s,\,t-1} = q_{s,\,t} \qquad (5-3)$$

となる．係数A_t, B_t, C_t はtの函数 N_r, N_θ はr及びθ方向の分割数である．

FACR法ではこの差分式を次の3ステップ（正確にはOdd/Even Reduction を含み5ステップになるが今回は使用してない）で計算する．

1. 電荷密度qの有限フーリェ分解

$$q_{s,\,t} = \frac{1}{2} q^c_{0,\,t} + \frac{1}{2} q^c_{N\theta/2,\,t} (-1)^s + \sum_{k=1}^{N\theta/2-1} \{ q^c_{k,\,t} \cos \frac{2\pi k s}{N_\theta} + q^s_{k,\,t} \sin \frac{2\pi k s}{N_\theta} \}$$

（5－4）

但し

$$q^c_{k,\,t} = \frac{2}{N_\theta} \sum_{s=0}^{N\theta-1} q_{s,\,t} \cos \frac{2\pi k s}{N_\theta}$$

$$q^s_{k,\,t} = \frac{2}{N_\theta} \sum_{s=0}^{N\theta-1} q_{s,\,t} \sin \frac{2\pi k s}{N_\theta}$$

2. Cyclic Reduction

一方cos，sin函数の直交性から（5－3）式をフーリェ分解したものはN_θ 個の独立な方程式に分解され，

$$\phi_{k,\,t+1} + \lambda_t \phi_{k,\,t} + C^*_t \phi_{k,\,t-1} = q^*_{k,\,t} \qquad (5-5)$$

$$0 \leq t \leq N_r$$

$$0 \leq k \leq N_\theta$$

となる．但しq^*, ϕはq, Φのフーリェ成分で添字のc, sは省いてある．λ_t, C^*_t はtの函数である．

（5－5）式を

$$\partial \phi / \partial r |_{r=r_p} = 0$$

の境界条件下でCyclic Reduction により解くとフーリェ成分ϕがすべてのk, tにつ

いて求まる.

3　ϕのフーリエ合成

こうして得られたフーリェ成分$\phi_{k,t}$ を再び（５－４）の形でフーリェ合成してポテンシャル$\Phi_{s,t}$を求める.

フーリェ分解及び合成は高速フーリェ変換法で行っている.

Fourie Analysic／Cyclic Reduction Methodのメッシュ数と必要なCPU－timeとの関係

MESH NUMBER	8×8	32×32	128×128
フーリェ解析（sec）	0.02	0.15	2.37
Cyclic Reduction（sec）	0.02	0.27	4.32
フーリェ合成（sec）	0.02	0.17	2.63
合　計　（sec）	0.05	0.58	9.33
計算誤差（相対）	5×10^{-6}	2×10^{-5}	*) 5×10^{-3}

使用計算機はIBM　S／360　M75J

FORTRANIV G-Compiler使用

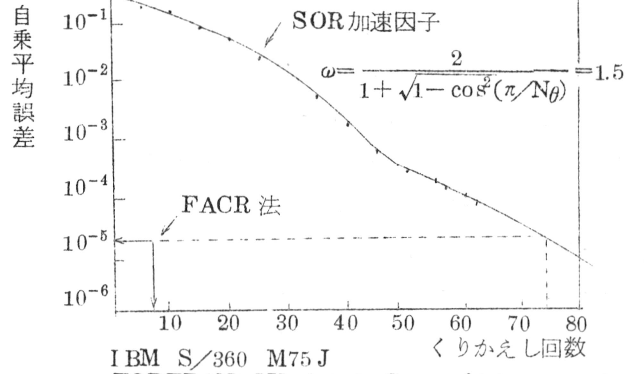
Single Precisionで計算

＊）メッシュ数の増加と共に誤差が増すのはCyclic Reductionの丸め誤差のためで，この部分のみdouble precisionにすることにより～10^{-5}まで小さくできる.

図　　4

かなり複雑な手続きになるが$N_r = N_\theta = 32$ 程度を他のガウス消去法や繰り返し法であるSORで解こうとすると，前者では系数行列（1024×1024になる）がコアに入らないし時間もかかる．後者でも収束が鈍くなる事は十分予想される．事実，比較した結果ではFACR 法は32×32の場合，SORで行った1／10の計算時間で済んでいる.

SOR法とFourier Analysis／Cyclic Reduction法との比較



IBM S／360 M75J

FORTRAN IV level G コンパイラー

§6　平滑化による改善

シミュレーション粒子から得られたミクロスコピックな値いを直接的に場のようなマクロスコピックな量に拡大すると統計的ゆらぎがノイズとなってプラズマを過熱してしまう。ミクロな量はマクロな量を平均値として分散していると考えられるので，これらのゆらぎを平滑化によって消すことが期待される。

代表的な物としてParticle－In－Cell（PIC）法〔4〕があるが，ここでは次の改善を行なう。

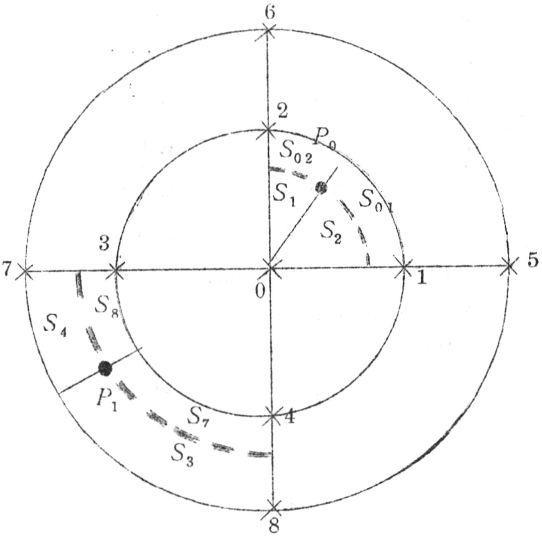


図　7　平滑化の方法

P_1に粒子が位置する時，この粒子の荷電を4隅のメッシュ点3，4，7，8へ次のように分配する。

$$e_i = e \cdot S_i / \sum_i S_i \qquad i = 3,\ 4,\ 7,\ 8$$

eはシミュレーション粒子の電荷，e_iはiメッシュ点へ分配する電荷である。

粒子が中心のメッシュ内にある時は4分割するのは適当でないので円の中心と扇形の先の2メッシュ点の3点で一度分配し，中心の分配量を再度中心を囲む一番近いメッシュ点に等分配する。P_0がそうした点の例である。即ち，

$$e_1 = e \cdot S_1 / (S_{01} + S_{02} + S_1 + S_2)$$

$$e_2 = e \cdot S_2 / (S_{01} + S_{02} + S_1 + S_2)$$

$$e_0 = e (S_{01} + S_{02}) / (S_{01} + S_{02} + S_1 + S_2)$$

とし，$e_0/4$を1，2，3，4のメッシュ点へ分配し，

$$e_1 = e(S_1 + (S_{01} + S_{02})/4)/(S_{01} + S_{02} + S_1 + S_2)$$
$$e_2 = e(S_2 + (S_{01} + S_{02})/4)/(S_{01} + S_{02} + S_1 + S_2)$$
$$e_3 = e_4 = e(S_{01} + S_{02})/4(S_{01} + S_{02} + S_1 + S_2)$$

となる。

2　高次のフーリエ成分切り捨てによる平滑法

ポテンシャルはフーリエ合成

$$\Phi_{s,t} = \frac{1}{2}\phi^c_{0,t} + \frac{1}{2}\phi^c_{N\theta/2,t} + \sum_{k=1}^{N\theta/2-1} \{\phi^c_{k,t}\cos\frac{2\pi ks}{N_\theta} + \phi^s_{k,t}\sin\frac{2\pi ks}{N_\theta}\}$$

で求めているが，この高次の項を切り捨てると θ 方向にある平滑化を行うことになり，細かい振動は消える。

1.と2.を合せて平滑化するとボーム半径のオーダーで起るゆらぎだけをかなり効果的に消せ平滑化による人為的影響を少くできると思う。

§7　シミュレーションの結果

プログラムはすべてFORTRAN IVで書かれ，プログラムに約80kバイト，さらに粒子1個につき12ワードのコア・ストレージが必要である。従って10^4個の粒子を追うモデルではシングル・プレシジョンの場合，全部で $80 + 12 \times 4 \times 10^4 / 1024 \simeq 560$k バイトのコア・ストレージを要するがS/360 M75J（$\overline{\mathrm{OS}}$−MVT）で十分処理できる大きさである。

計算時間は1ステップ当り約15秒（S/360 M75J でのCPU時間）かかる。各ルーチンの所要時間を図に示す。　500step

主なルーチンの計算時間

ルーチン名	CPU−time (sec/step)
運動方程式	8.90
ポテンシャル	0.58
その他	5.50
合　　計	14.98

粒子数　10^4

メッシュ数　10^3

IBM S/360 M75J

FORTRAN IV level Gコンパイラー

シミュレーション結果の具体的内容はシンポジウムで述べるので割合いする。

参 考 文 献

〔1〕 C. G. Smith and A. S. Bishop, Third Conference On Plasma Physics and Controlled Nuclear Fusion Research, International Atomic Energy Agency, CN-24/D-9, 1968, 1

〔2〕 Hockney, R. W. Methods in Computational Physics 9, (Academic Press, New York, 1970, 135)

〔3〕 P. L. Morse. 〔2〕の文献

本 PDF ファイルは 1972 年発行の「第 13 回プログラミング―シンポジウム報告集」をスキャンし、項目ごとに整理して、情報処理学会電子図書館「情報学広場」に掲載するものです。

この出版物は情報処理学会への著作権譲渡がなされていませんが、情報処理学会公式 Web サイトの https://www.ipsj.or.jp/topics/Past_reports.html に下記「過去のプログラミング・シンポジウム報告集の利用許諾について」を掲載して、権利者の捜索をおこないました。そのうえで同意をいただいたもの、お申し出のなかったものを掲載しています。

過去のプログラミング・シンポジウム報告集の利用許諾について

情報処理学会発行の出版物著作権は平成 12 年から情報処理学会著作権規程に従い、学会に帰属することになっています。

プログラミング・シンポジウムの報告集は、情報処理学会と設立の事情が異なるため、この改訂がシンポジウム内部で徹底しておらず、情報処理学会の他の出版物が情報学広場 (=情報処理学会電子図書館) で公開されているにも拘らず、古い報告集には公開されていないものが少からずありました。

プログラミング・シンポジウムは昭和 59 年に情報処理学会の一部門になりましたが、それ以前の報告集も含め、この度学会の他の出版物と同様の扱いにしたいと考えます。過去のすべての報告集の論文について、著作権者（論文を執筆された故人の相続人）を探し出して利用許諾に関する同意を頂くことは困難ですので、一定期間の権利者捜索の努力をしたうえで、著作権者が見つからない場合も論文を情報学広場に掲載させていただきたいと思います。その後、著作権者が発見され、情報学広場への掲載の継続に同意が得られなかった場合には、当該論文については、掲載を停止致します。

この措置にご意見のある方は、プログラミング・シンポジウムの辻尚史運営委員長 (tsuji@math.s.chiba-u.ac.jp) までお申し出ください。

加えて、著作権者について情報をお持ちの方は事務局まで情報をお寄せくださいますようお願い申し上げます。

期間：2020 年 12 月 18 日 〜 2021 年 3 月 19 日
掲載日：2020 年 12 月 18 日

プログラミング・シンポジウム委員会

情報処理学会著作権規程
https://www.ipsj.or.jp/copyright/ronbun/copyright.html