

宇宙プラズマ計算機シミュレーションの問題解決環境の提案

村田 健 史^{†1} ヌルディヤナ ガーニ^{†1} 白 井 英 之^{†2}
上 田 裕 子^{†3} 岡 田 雅 樹^{†4}
大 村 善 治^{†2} 松 本 紘^{†2}

宇宙プラズマシミュレーションは、コードやアルゴリズムが複雑で、数値不安定性が生じやすい。コードの複雑さのため、開発者以外は、コードを改良したり、共同開発を行ったりすることが困難である。また、スケール長が異なるコードが混在しており、マルチスケール計算の必要性が高まっている。したがって、コード開発コストや時間を削減し、コードの生産性と利用環境を向上する、問題解決環境 (PSE) が必要とされている。本稿では、モデル設定、パラメータテスト、ジョブ管理、およびデータ可視化を備えた PSE を提案する。提案する PSE では、WWW サーバに、データベースを用いた知識ベースを組み込む。これにより、マルチスケール計算に対応し、知識ベースを利用した数値不安定性や計算結果の予測が可能な環境を実現する。さらに、オブジェクト指向によってコードを開発・実装することにより、WWW 上での初期パラメータおよびモデル設定が可能で、かつ、コードの改良・再利用が容易な環境となる。

A Problem Solving Environment for Space Plasma Computer Simulations

KEN T. MURATA,^{†1} NURDIYANA BINTI ABDUL GHANI,^{†1}
HIDEYUKI USUI,^{†2} HIROKO O. UEDA,^{†3} MASAKI OKADA,^{†4}
YOSHIHARU OMURA^{†2} and HIROSHI MATSUMOTO^{†2}

Due to development of super computers and high-speed network, roles of computer simulations are getting important. Plasma simulations have contributed a lot to the studies of space plasma, fusion plasma, and process plasma. However, simulation environments have not been friendly for researchers who don't program their own simulation codes. We herein propose a new PSE system for plasma simulation studies. This system is composed of WWW server, computational server, DB and DBMS server, visualization server, and other servers. The simulation codes are designed and implemented via object-oriented methodology. With help of the present system, space plasma simulations become more familiar with non-programming researchers, and even to general (non research) users.

1. はじめに

計算科学は、理論と実験の橋渡しとなる第3の研究手法として認知されている。特に、数値シミュレーションは、計算科学の手法の1つとして、多くの分野で用いられている。宇宙プラズマ現象も、数値シミュ

レーションが有効な分野の1つである^{1),2)}。

宇宙プラズマシミュレーションは、太陽地球系空間 (Geospace) や銀河 (Galaxy) のプラズマ現象を取り扱う。特に、プラズマ不安定性の成長や、非線形現象を解析するのに用いられる。宇宙空間で起こる現象は、人間が直接実験や観測を行うことができない。したがって、コンピュータ上で対象をモデル化し、シミュレーションを行うことで、現象を推測する手法が有効である。また、人工衛星観測により得られた結果を、計算機シミュレーションによって理解することもある³⁾。宇宙プラズマ現象の研究において、計算機シミュレーションの果たす役割は大きい。

問題解決環境 (PSE) とは、解決したい問題を、コンピュータを効率的に利用して解く環境 (システム)

^{†1} 愛媛大学工学部

Faculty of Engineering, Ehime University

^{†2} 京都大学宇宙電波科学研究センター

Radio Science Center for Space and Atmosphere, Kyoto University

^{†3} 宇宙開発事業団

National Space Development Agency of Japan

^{†4} 国立極地研究所

National Institute for Polar Research

である^{4),5)}。計算機シミュレーションは、一般に、(1) 問題のモデル化、(2) 解決手法の選択、(3) 差分法などの離散化、(4) プログラミング、(5) 計算の実行、(6) データ解析と可視化など、いくつかのプロセスからなる。PSEでは、これらのプロセスにおいて、ソフトウェア開発のコストや時間を削減し、プログラムの生産性を向上させることを目的とする。特に、シミュレーションコードの複雑化にともない、プログラミングフリーに計算機シミュレーションを行うことができる環境が望まれている。本稿では、宇宙プラズマ計算機シミュレーションに有効なPSEについて議論し、WWWを基本としたPSEの提案を行う。

2. 宇宙プラズマシミュレーション環境の問題点

現在、宇宙プラズマシミュレーション環境がかかえる問題点が多い。本研究で調べた結果、1の6つのプロセスのうち、(4)プログラミングにおけるシミュレーションコードの複雑さやタイムチャートの複雑さ、(5)計算実行におけるマルチスケール計算と数値安定性や結果予測の必要性などが、PSEによる解決の望まれる点であることが分かった。本章では、これらの問題点についてまとめる。

2.1 プログラミングの問題点

2.1.1 プラズマシミュレーションコード

宇宙プラズマの計算機シミュレーションコードは、表1に示すとおり、計算スケールに応じて多岐にわたる。ブラゾフコードは、プラズマの最も基本的なブラゾフ方程式を解く。最大6次元空間の連続量を解くため、現在の計算機では実現が難しい。フル粒子コードは、電子のイオンを（超）粒子として解く。主に、電子の運動論を調べるために用いられる。ハイブリッドコードは、イオンを粒子、電子を流体として解く。二流体コードは、イオン、電子ともに流体として解き、MHDコードはイオン流体と電子流体をあわせ、一流体として解く。

プラズマ粒子コードとは、プラズマ粒子を超粒子^{6),7)}として扱い、プラズマと電磁場の相互作用について調べるシミュレーションコードである。プラズマ粒子コードでは、PM-PIC法により数値計算を行う^{*}。図1(a)に示すように、プラズマ粒子は空間内を自由に移動し、電場、磁場、電流は、格子点上において定義される。格子点上の電荷値や電流値は、図1(b)のように、荷電粒

表1 代表的な宇宙プラズマシミュレーションコード：ブラゾフコードは速度分布関数 f の方程式である

Table 1 A list of typical space plasma simulation codes: f in Vlasov code stands for velocity distribution function.

code	ion model	electron model
Vlasov code	$f(x, v, t)$	$f(x, v, t)$
Full particle code	particle	particle
Hybrid code	particle	fluid
Two fluid code	fluid	fluid
MHD code	(one fluid)	(one fluid)

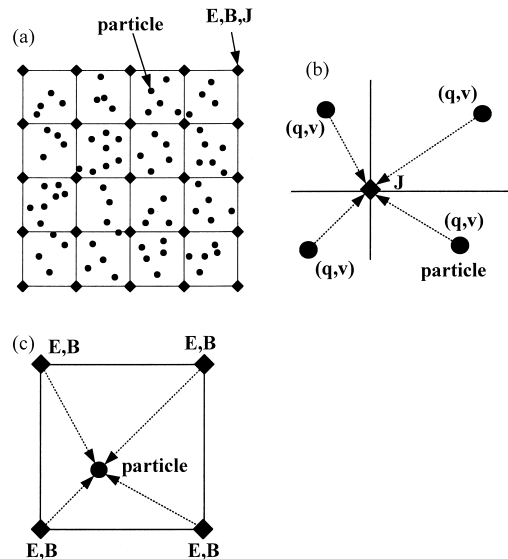


図1 プラズマ粒子コードのPM-PIC法の概要：(a) 粒子は任意の位置、電磁場と電流は格子点上で定義される。(b) 粒子量は、格子点上に足しこまれる。(c) 粒子位置の電磁場は、近傍格子点から求められる

Fig. 1 A schematic picture of PM-PIC (Particle In Cell) method. (a) Particles located at any position in the region. (b) Current values defined on grid points. (c) Electromagnetic field at a particle.

子のモーメントを、各格子点上に足しこむことにより得られる。一方、粒子位置の電磁場は、図1(c)に示すように、近傍の格子点上の電磁場から求められる。粒子の運動方程式の数値解法としては、Bunemann-Boris法⁸⁾が一般的に用いられる。一方、電磁場の差分解法は、Lax-Wendroff法やTDV法、FDTD法などが採用されている⁹⁾。

2.1.2 コードの複雑さ

宇宙プラズマシミュレーション分野では、開発者以外の研究者であってもシミュレーションコードを利用できるよう、プロトタイプコードの作成が試みられてきた。プログラムの変更を行うためには、プログラム全体を理解する必要がある。不十分な理解に基づいた

^{*} ほかに、荷電粒子間力を計算する手法として、PPPM法をはじめ、種々の手法がある。本稿では、よく使われるPM-PIC法を用いた。

コード改良は、多くの場合、プログラムバグとなるからである。しかし、現在、プロトタイプコードは、実用化されていない。これは、プラズマシミュレーションの普及を阻害している理由の1つである。

一般に、プラズマシミュレーションコードの内部プログラムは、複雑である。これは、2.1.3 項や2.1.4 項で示すように、(1) 方程式系が複雑であること、(2) 数値安定性を実現するため複雑なアルゴリズムを採用していること、などが理由としてあげられる。特に、粒子コードでは、粒子量と流体量の間でデータ交換しながら計算を進めるため、コードはさらに複雑になる。そのため、開発者以外には、コードの共同開発や改良が容易ではない。

2.1.3 方程式の複雑さ

以下は、表1のフル粒子コードの方程式系である。

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{q_s}{m_s}(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (1)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E} \quad (3)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho_e}{\epsilon_0} \quad (5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (6)$$

式(1)、式(2)は第 s 種のイオンの運動方程式、式(3)、式(4)はマクスウェル方程式群、式(5)はポアソンの式、式(6)は磁場のソレノイダル条件式である。パラメータは、 $\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{J}$, ρ_e がそれぞれ電場、磁場、電流密度、電荷密度を表し、粒子については、 m_s , q_s , $\mathbf{v}$, $\mathbf{r}$ がそれぞれ、第 s 種の粒子(イオンまたは電子)の質量、電荷量、速度、位置を表す。 ϵ_0 は、真空の誘電率である。

一方、表1のハイブリッドコードで用いられる基本方程式は、以下のとおりである。

$$m_s \frac{d\mathbf{v}}{dt} = q_s(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (7)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v} \quad (8)$$

$$-en_e + \sum_s q_s n_s = 0 \quad (9)$$

$$n_e m_e \frac{d\mathbf{u}_e}{dt} = 0 = -en_e(\mathbf{E} + \mathbf{u}_e \times \mathbf{B}) + \eta \mathbf{J} \quad (10)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u}_e \cdot \nabla\right) P_e = -\gamma_e P_e \nabla \cdot \mathbf{u}_e + \eta J^2 \quad (11)$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E} \quad (12)$$

$$\mathbf{J} = \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \mathbf{B} \quad (13)$$

$$\mathbf{J} = -en_e \mathbf{u}_e + \sum_s q_s n_s \mathbf{u}_s \quad (14)$$

式(7)と(8)は第 s 種のイオンの運動方程式、式(9)は電荷の準中性条件式、式(10)は電子の運動量方程式(無質量の流体として扱う)、式(11)は電子のエネルギー式、式(12)と(13)はマクスウェル方程式、式(14)は電流密度の定義式である。共通の変数はフル粒子コードに等しい。また、 P_e は電子圧力を表す。 m_s , q_s , n_s , $\mathbf{v}$, $\mathbf{r}$ は、第 s 種イオンの質量、電荷量、数密度、速度、位置となる。 m_e , e , n_e , $\mathbf{u}_e$ は、電子の質量、電荷量、数密度、流速である。比熱比 γ_e および電気抵抗 η は、定数で与えられる。

以上のように、プラズマ粒子シミュレーションでは、基礎方程式数が比較的多い。そのため、2.1.4 項で示すように、タイムチャートやコード内部プログラムが、複雑になる傾向がある。

2.1.4 差分式・タイムチャートの複雑さ

シミュレーションコードでは、2.1.3 項の方程式を差分化し、タイムチャートに沿って数値計算を進める。基礎方程式数が多いため、差分化式数も10から30程度と多くなる。

図2に、フル粒子コードの1つである(a) KEMPOコード⁷⁾、および(b) ハイブリッドコード⁷⁾のタイムチャートを示す。各ステップが、1つまたは複数の方程式に対応する。

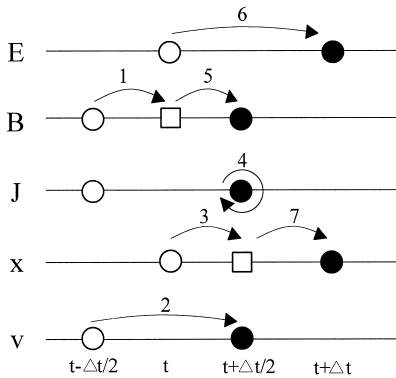
一般に、プラズマ粒子シミュレーションコードでは、このように、タイムチャートが複雑である。これは、数値安定性のため、コードごとに、さまざまな工夫をしているからである。なお、タイムチャートの自動作成は容易ではなく、汎用的な手法が求められている。

2.2 計算実行の問題点

2.2.1 マルチスケール計算

多くのプラズマ現象では、ミクロスケール現象とマクロスケール現象が混在する。ミクロスケール現象がマクロスケール現象に影響を与え、逆に、マクロスケール現象が作る外部環境によりミクロスケール現象が左右される。したがって、ミクロスケールとマクロスケールを、1つのコードで統一的に解くことが望ましい。たとえば、図3は、同じパラメータを用いた、(a) マクロスケールコード(MHDコード)と、(b) ミクロスケールコード(ハイブリッドコード)による、リコネクション現象のシミュレーションである¹⁰⁾。こ

(a) KEMPO code



(b) Hybrid code

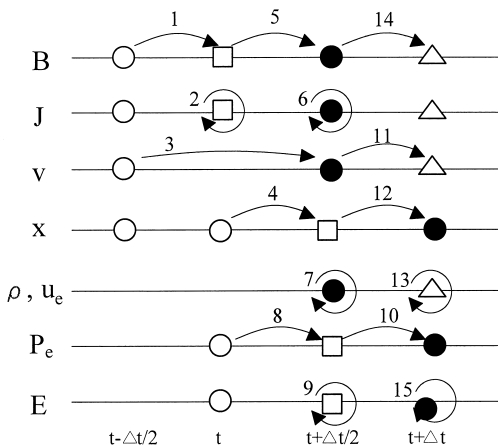


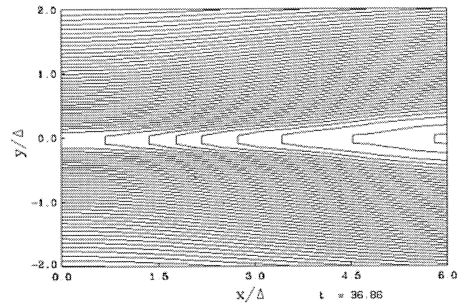
図2 (a) KEMPO コードおよび、(b) ハイブリッドコードのタイムチャート：○は初期値，□は中間値，●は最終値，△は予測値

Fig. 2 The time-chart in (a) KEMPO code and (b) Hybrid code. ○: initial value, □: intermediate value, ●: destination value and △: predicted value.

のように、ミクロスケールのシミュレーションにより、マクロスケールコードでは現れない現象を解析することができる。

しかし、電子とプロトンの質量比は 1,843 と大きく、特徴的な空間・時間スケールが異なる。したがって、電子の運動論とイオンの運動論を同時に計算することは、現在のスーパーコンピュータをもってしても、困難である。そのため、ミクロスケールとマクロスケールの相互作用を研究するには、複数のシミュレーションコードを組み合わせたマルチスケール計算が有効である。現在、複数コード間でデータの受け渡しを行うことによって、マルチスケール計算を行う手法が検討されている¹¹⁾。複数のコードの組合せによるマルチスケール計算が、自己無撞着 (self-consistent)⁷⁾に実現

(a) MHD code



(b) Hybrid code

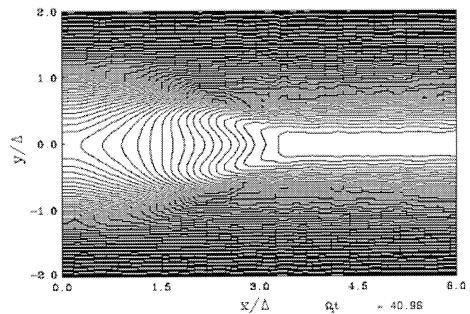


図3 等しい初期パラメータによる、(a) MHD コード（原点付近を拡大表示）と、(b) ハイブリッドコード計算による地球磁気圏尾部リコネクション現象の磁力線。原点に与えられた異常抵抗により、磁力線のつながりかえが起こる。ハイブリッドコードでは、自己誘電磁場により、HMD コードでは現れない、磁力線の Σ 形状を示す²¹⁾

Fig. 3 (a) MHD code simulation and (b) Hybrid code simulation with same initial parameters: Reconnection are triggered with the anomalous resistivity at zero point. A Σ structure is found in the hybrid code that is not found in the MHD code²¹⁾.

されるための、計算機シミュレーション環境が必要となる。

2.2.2 数値不安定性

近年の計算機シミュレーションは、大スケール、長時間計算が主流である。しかし、数値不安定性によって、計算が異常終了することもまれではない。このような異常終了を予測するための、PSEが必要である。特に、粒子コードは、数値不安定性が生じやすい。これは、有限個の超粒子でプラズマを表すため、粒子が希薄な領域が生じたり、粒子の過加速がランダムに発生することにより生じる。

このような数値不安定性は、主に、(1) 計算パラメータに依存した不安定性と、(2) モデルに依存した数値不安定性に大別される。(1) は、クーラン条件やデバイ長条件などの、数値計算独特の不安定性である⁷⁾。

(2) は、計算が進むにつれて不安定性が発生する場合である。たとえば、計算領域内のほとんどの粒子が計算領域外に排出される場合や、密度や圧力の変化により局所的に数値安定条件が満たされなくなり、数値不安定になる場合である。

2.2.3 計算結果の予測

プラズマシミュレーションの多くは、理論計算では困難な非線形現象を数値的に解く。非線形現象では、パラメータによっては、線形理論では物理的・数値的にまったく予測できない結果を得ることもある。

しかし、線形理論や準線形理論の予測値を、計算前に知ることには意義がある。たとえば、波動-波動相互作用による三波共鳴を調べる際には、理論から予測される波長および周波数が実現可能なパラメータ設定（空間グリッド幅や時間ステップ幅）を選択しなくてはならない。また、線形成長率より、時間ステップ幅や計算ステップ数を決定できる場合もある。

プラズマ密度や電磁場の空間構造があるモデルでは、領域各点での分散関係や理論解を求めたい場合がある。これは、結果の予測以外に、数値安定性の検証にも利用できる。最も数値的に不安定になる個所を検出して、数値安定性条件を満たすパラメータを選択することができるからである。

3. 宇宙プラズマシミュレーションのための問題解決環境

3.1 WWW の利用

松本らは、WWW による計算機シミュレーション問

題解決環境の提案をしている¹²⁾。近年、ますます充実している WWW 技術の発展を背景に、本稿でも、プラズマシミュレーションのための PSE として、WWW を導入する。

WWW による PSE システム例を、図 4 に示す。システムは、ユーザインタフェースとなる WWW サーバ、計算結果やジョブ情報を保存するデータベースサーバ、データベースを管理するための DBMS サーバ、計算部を受け持つ並列計算機（スーパーコンピュータ）などによる計算サーバ、出力データを保存するためのディスクアレイやマストレージなどのファイルサーバ、データの可視化を担当する可視化サーバから構成される。また、ジョブの終了などをユーザに連絡するメールサーバと、ユーザがネットワークを介してデータを取得するための FTP サーバも配置する。

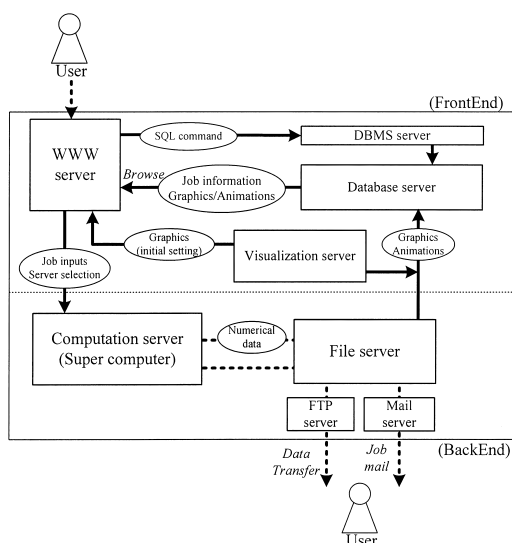


図 4 システムの構成と処理の流れ

Fig. 4 Overview of a PSE system and flow of process.

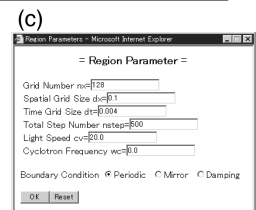
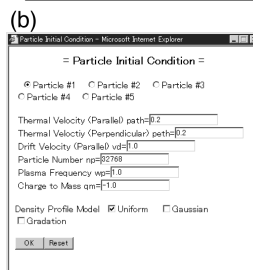
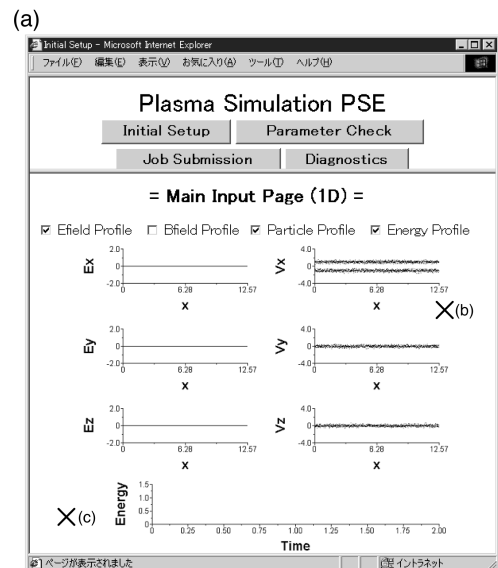


図 5 提案する WWW モデル：GUI によるパラメータ入力ページ（1 次元）。(a) メイン設定画面、(b) 粒子パラメータ設定画面、(c) 領域パラメータ設定画面

Fig. 5 WWW model: Parameter setting through GUI. The symbol $\times$ represents “mouse click,” and dot arrow indicates the following action: (a) Main input page, (b) Particle parameter input page and (c) Region parameter input page.

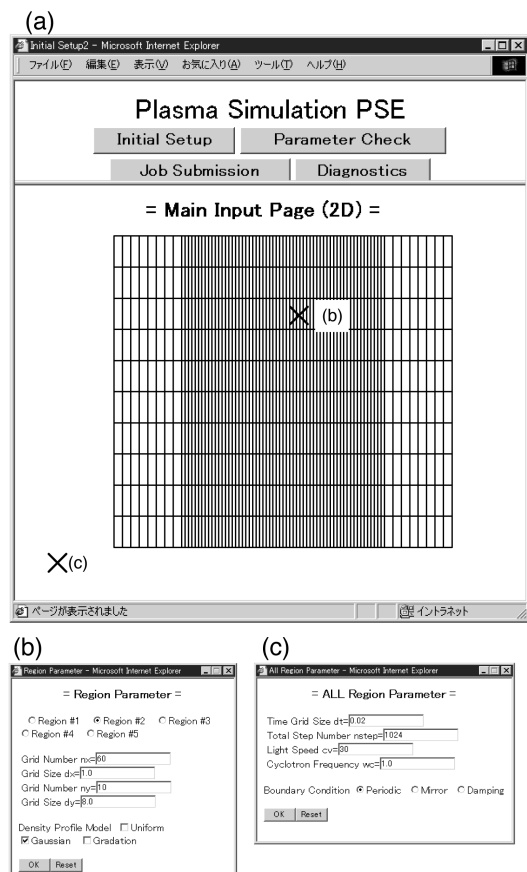


図6 提案する WWW モデル：GUI による領域設定とパラメータ入力ページ（2次元）. (a) メイン設定画面，(b) 領域パラメータ設定画面，(c) 全領域パラメータ設定画面

Fig.6 WWW model: Region setting and parameter setting through GUI (2D). (a) Main input page, (b) Region parameter input page and (c) All region parameter input page.

ユーザインタフェースを管理する WWW サーバと、シミュレーションコードが動作する計算サーバが別のマシンである場合は、図の点線のように機能を分割するとよい。

本稿で提案する WWW 環境の構築例を、図に示す。

図5と図6はGUIによる領域設定とパラメータ入力、図7は結果の予測（線形解析）、図8は数値安定性の確認、図9はジョブの発行、図10は可視化に関する、WWW 環境である。図5～図10は、1次元フル粒子シミュレーションのために試験的に実装したものである。WWW サーバは、Windows2000 ServerをOSとし、IIS 5.0によって構築した。図中、×はマウスクリックとアクション結果のウィンドウを表す。なお、図6、図7と図10(b)については、2次元シミュレーションの例を、模式的に示したものである。

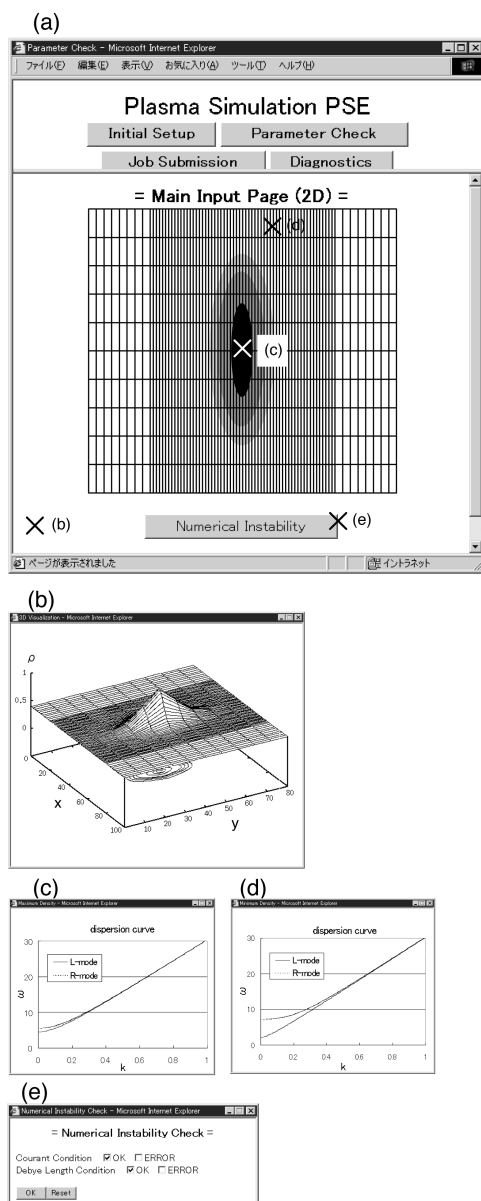


図7 提案する WWW モデル：結果の予測ページ（線形解析）. (a) 図6により密度分布が表示されたメイン設定画面，(b) (a)の密度分布を3次元表示する可視化画面，(c)・(d)領域を選択したときの分散曲線表示画面，(e)数値安定性の確認画面

Fig.7 WWW model: Prediction of results (linear analysis). (a) Main page, (b) 3D visualization page, (c) and (d) Dispersion curve plot page and (e) Numerical instability check page.

以降、3.2～3.6節では、図5～図10の実装例を用いて、2章で示したシミュレーション環境の各問題点を、どのように解決するかを検討する。

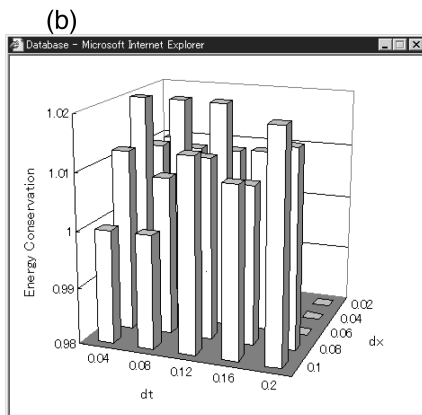
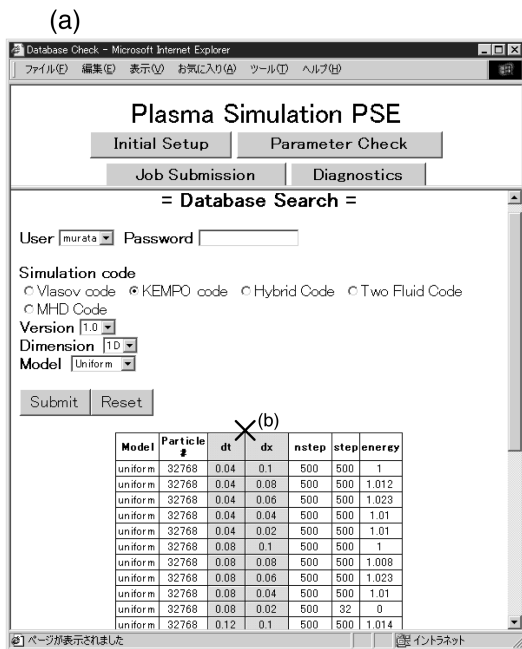


図8 提案する WWW モデル：数値安定性の確認ページ。POM::KEMPO1 によるパラメータサーベイの例である。(a) データサーベイページ、(b) 空間グリッド幅 dx 、時間ステップ幅 dt とエネルギー保存表示

Fig.8 WWW model: Diagnostics of numerical instability. An example of parameter survey via POM::KEMPO1. (a) Data survey and (b) Plot of dx , dt and energy conservation.

3.2 オブジェクト指向シミュレーションコード

3.2.1 オブジェクト指向コードの開発

近年、オブジェクト指向開発技法とオブジェクト指向プログラミングによる、プラズマ粒子シミュレーションコードの開発が進められている^{13)~16)}。図 11 は、Ueda らによるオブジェクト指向電磁界ソルバ¹⁵⁾を発展させ、オブジェクト指向フル粒子コードとして設計したものである。(a) はオブジェクトモデル図であり、(b) は各クラスのクラス図である。(b) の各物理量ク

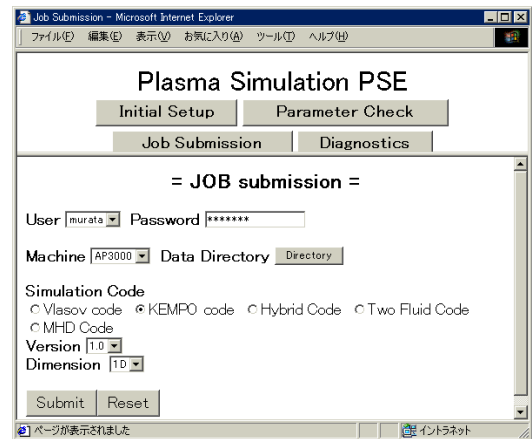


図9 提案する WWW モデル：ジョブの発行ページ

Fig.9 WWW model: Submission of jobs

ラスは、既存の手続き型コードのサブルーチンに対応する。

本研究では、このモデルをもとに、オブジェクト指向フル粒子コードの 1 次元版 (POM::KEMPO1^{*}) を、C++言語により実装した¹⁶⁾。実装は、2.1.4 項の KEMPO コードをもとに行った。なお、図 11 のコードの仕様については、文献 16) に詳しい。

図 11 (a) および (b) のように、各サブルーチン（物理量）をクラス化することにより、2.1.2 項で指摘した、コードの改良が容易になる。また、オブジェクト指向コードでは、あるクラスの変更が、他のクラスには影響を与えない。したがって、各クラス内部のプログラムを理解していなくても、独自クラスを継承することにより、独自の機能を追加することができる。

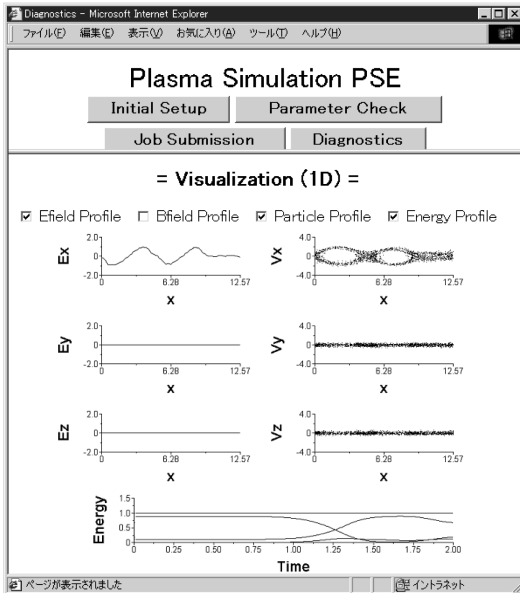
独自機能追加の例を、図 11 (c) に示す。たとえば、図 11 (c) の F1 では、既存の外部境界条件を独自の外部境界条件で交換している。図 11 (c) の F2 では、さらに、独自の内部境界条件を追加している。図 11 (c) の F3 では、既存の数値解法を、他のクラスに影響することなく、独自の数値解法モデル（Lax-Wendroff 法や TVD など）と交換することができる。

3.2.2 オブジェクト指向開発技法

オブジェクト指向コードは、オブジェクト指向開発技法にのっとり構築することが望ましい。オブジェクト指向開発技法の 1 つである OMT (Object Modeling Technique) では、システム開発を、静的モデルであるオブジェクトモデルと、動的モデルとに分ける^{17),18)}。図 11 (a) は、オブジェクトモデルの 1 つである、ドメ

^{*} POM は、P_{IC} via Object-oriented Methodology の略。

(a)



(b)

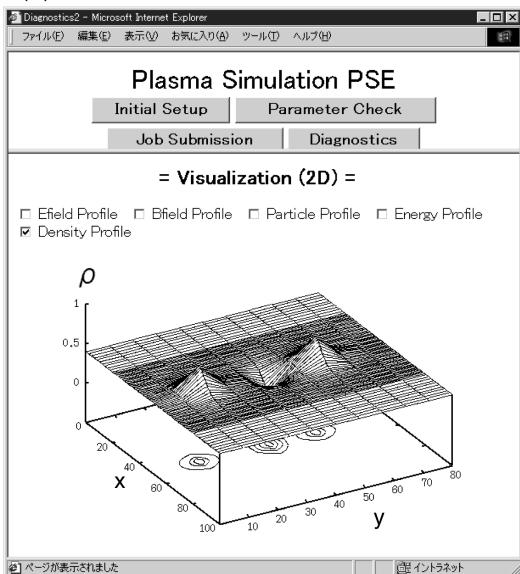


図 10 提案する WWW モデル：1 次元と 2 次元の可視化ページ。
(a) 1 次元計算結果, (b) 2 次元計算結果

Fig. 10 WWW model: Visualization. (a) Visualization of 1D simulation and (b) Visualization of 2D simulation.

インオブジェクトモデルである。

2.1.4 項で述べたタイムチャートは、OMT では、動的モデルとして表現される。動的モデルと静的オブジェクトモデルは、別々のモデルで表されるため、OMT を用いれば、複雑なタイムチャートと、サブルーチン

(クラス) を切り離すことが可能となる。クラス変更を行う際、タイムチャートを理解する必要はない。したがって、2.1.4 項のタイムチャートの複雑さを改善できる。

3.2.3 WWW 上での初期パラメータ・モデル設定

提案するプラズマシミュレーションの PSE では、WWW 上で初期パラメータとモデルを設定する。モデル設定は、シミュレーション領域や粒子のパラメータ、外部および内部境界条件の設定などを、マウスなどの GUI 操作によって行う。たとえば、図 5 (b) は、本研究で構築した、1 次元シミュレーションコード (3.2.1 項の POM::KEMPO1) の、粒子パラメータを設定する場合である。また、2 次元シミュレーションで、異なる状態の 3 つの領域を接合して計算を行う場合は、図 6 となるであろう。

図 5 (c) で、新しい境界条件を追加する場合を考える。コードがオブジェクト指向により設計されているため、図 11 (c) で独自のクラスを継承し、図 5 (c) に新しい境界条件の入力環境を追加することで、容易に実現が可能である。

3.2.4 WWW 環境とオブジェクト指向コード

松本らは、実行効率向上のため、実行プログラムに WWW 機能を実装し、シミュレーションと WWW 機能を一元化することを提案している¹²⁾。このような WWW 上の初期パラメータ設定環境は、プラズマシミュレーションコードにおいても、OMT で開発を行うことにより、実現が可能である。OMT では、オブジェクトモデルを、システムに依存しないドメインオブジェクトモデルと、依存するアプリケーションオブジェクトモデルに分割する^{17),18)}。この場合、各領域の位置関係、接合条件などの初期設定は、システムに依存する WWW リソースを用いるため、アプリケーションオブジェクトモデルで実現される。一方、プラズマシミュレーションコードは、ドメインオブジェクトモデルで実現される。この関係を、図 12 に示す。

WWW をオブジェクト指向コードが同一プログラムで実現されるかどうかは、WWW サーバと計算サーバが同一計算機で実現されているかに依存する。たとえば、本研究で構築した PSE は、図 4 の点線で区切られた 2 つの計算機からなる^{*}。したがって、図 5 や図 6 の GUI により、WWW 上で与えられた初期入力パラメータを、計算サーバに送信する。これは、図 4 の、WWW サーバから計算サーバへの入力データ送

^{*} 本研究の試験システムでは、計算サーバとして、愛媛大学総合情報処理センターの富士通 AP3000 並列計算機を用いた。

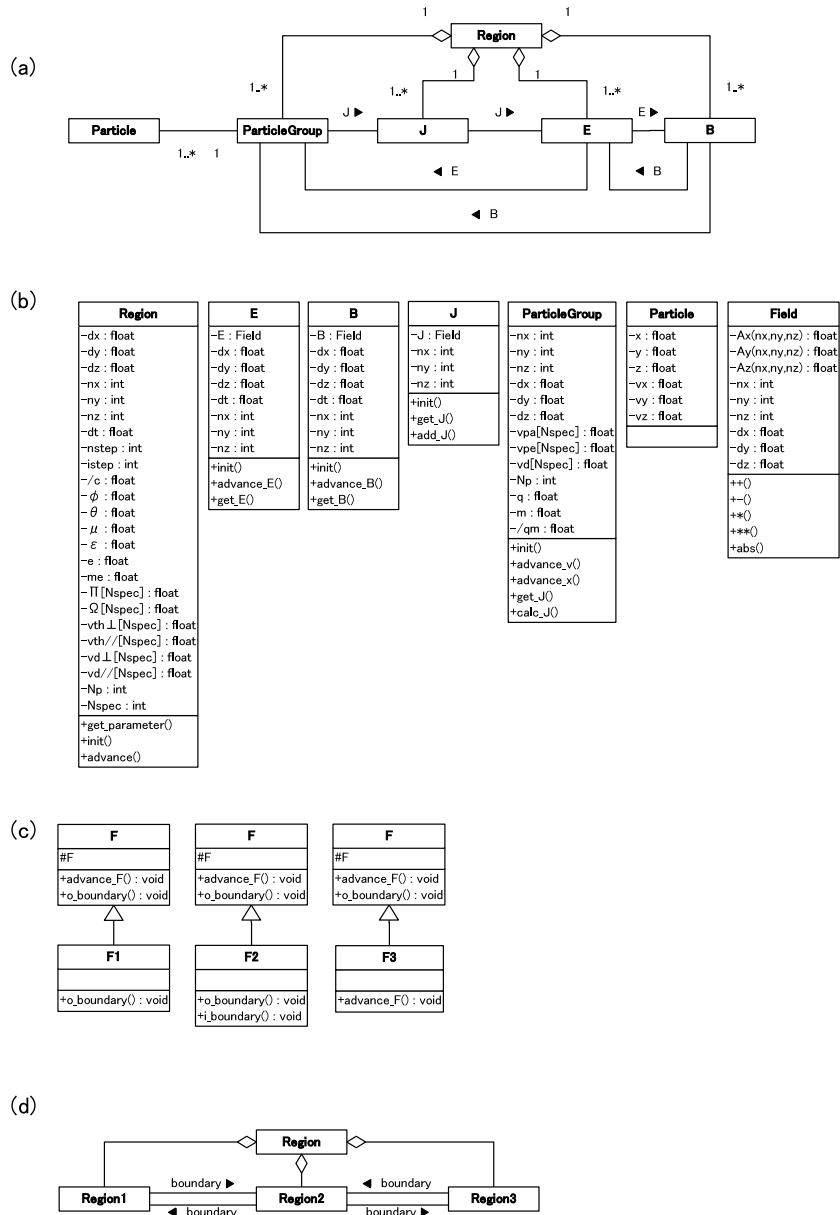


図 11 オブジェクト指向フル粒子シミュレーションコードの, (a) ドメインオブジェクトモデル, (b) 各クラスの仕様 (クラス名は式 (1)~式 (4) に, 変数は文献 7), 16) に準ずる), (c) 独自機能追加のためのクラスの継承 (advance は数値解メソッド, o_boundary は外部境界条件メソッド, i_boundary は内部境界条件メソッド), (d) 3 つの領域の接合時のオブジェクトモデル

Fig. 11 (a) A domain object mode for a full particle plasma simulation code, (b) Model of each class in (a) (class names and parameters depend on Eqs.(1)~(4) and reference 7), 16)), (c) Sub-classes for field super class (advance, outer boundary, and inner boundary functions are overridden) and (d) An object model for joint of multiple regions.

信に対応する。

計算サーバ上では, このパラメータを用いて, 図 11 (a) および, 同図 (b) の各クラスのインスタンスの作成, およびパラメータの初期設定を行う。図 6 の各領域の位置関係およびパラメータの設定は, 図 11 (d)

の Region1~Region3 クラスのインスタンス生成, および各クラスの属性の設定と対応する。

3.3 計算結果の予測と数値安定性試験

プラズマシミュレーションでは, 数値計算結果予測が有効である。非線形現象の予想は容易ではないが,

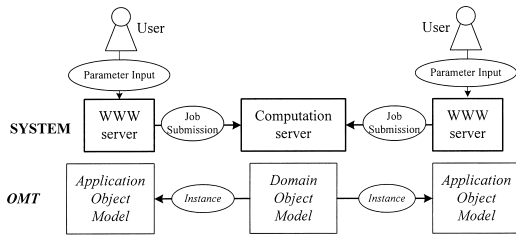


図 12 オブジェクト指向プラズマシミュレーションコードのドメインオブジェクトモデル/アプリケーションオブジェクトモデルと PSE システムの対応関係

Fig. 12 Relationship of Domain/Application object models with the present PSE system.

線形理論による結果予測は、WWW の GUI を利用して、実現が可能である。たとえば、図 7 に、密度勾配があるモデルの、各領域における分散曲線の表示例を示す。(a) または (b) の任意の領域にマウスポインタを移動することにより、その点における分散曲線を、(c) や (d) のように表示する。これにより、伝搬可能な波動のモードや周波数が分かり、入力パラメータ設定に利用することができる。

プラズマ粒子シミュレーションでは、初期状態に任意の速度分布を与えることができる。任意の速度分布を持つプラズマ波動の線形解析には、分散ソルバ (dispersion solver)¹⁹⁾ が有効である。分散ソルバは、与えられた速度分布より、分散関係と成長率を数値的に求める。

また、2.2.2 項で述べたように、プラズマシミュレーションには、さまざまな数値不安定性が存在する。したがって、ジョブ発行前に安定性の確認を行うことが望ましい。提案する PSE では、計算領域をサーベイして、既知の数値不安定性について調べる。図 7(e) では、2.2.2 項で指摘した、クーラン条件やデバイル長条件の確認を行っている。

3.4 知識ベース利用

保志らは、PSE への知識ベースの導入を提案している²⁰⁾。知識ベースとは、対象問題が与えられたときに、その問題を解釈し、その問題を解くための最適な計算手法または既存ツールを推測・助言し、既存ツールに対して最適な入力パラメータを選択し、さらに計算結果を評価するものである。

プラズマシミュレーションでは、計算手法とコードは一体化している。そのため、問題が定義されたとき、計算方法や用いるツールはほぼ一意に決定される。一方、問題に対する最適な入力パラメータ設定や計算結果の評価を、PSE を通じて行うことは有効である。本稿では、データベースを用いて、最適な入力パラメータ

タの設定を行う PSE を提案する。

多くのシミュレーションでは、1つのモデルに対して、パラメータサーベイを行う。たとえば、非線形現象のシミュレーションでは、結果の予測が困難なため、計算結果が数値誤差に依存しないことを確認しなければならない。多くの場合、より精度の高いパラメータでサーベイし、結果が定性的、定量的に等しくなることによって、数値誤差の影響がないことを確認する。

最適パラメータ発見の有効な手段の1つは、過去の計算履歴をデータベース化し、それらより、最適なパラメータを選択することである。図 8 は、3.2.1 項の POM::KEMPO1 により行ったパラメータサーベイの結果をデータベース化し、PSE の提供する WWW 上で表示したものである。データベースは、MS-ACCESS 2000 で構築し、ASP によって、WWW から SQL を発行している。データベースより、コード名、バージョン、シミュレーションの次元数、モデルなどを選択し、過去の履歴を表示する。これにより、最も数値的に安定なパラメータを推測することができる。

図 8 の例では、空間グリッド幅 (dx) と時間ステップ幅 (dt) の、エネルギー保存率の関係を図示している。 dt が小さく、 dx が大きい場合に、高い精度が見込まれる。しかし、 dt が 0.04 と 0.08 の場合の計算精度はほぼ等しいため、 dt を 0.08 とする方が、経済的であることが分かる。

プラズマシミュレーションの最適パラメータ推測・抽出は、これまでに有効な手法が提案されていない。図 8 は、最適な dx と dt の選択のためのデータベースの利用例であった。しかし、2.2.2 項で述べたように、プラズマ非線形現象は、パラメータの違いにより結果がまったく異なることもある。最適パラメータ抽出の知識ベース構築を行うためには、今後の研究が必要となる。

3.5 ジョブ管理とマルチスケール計算

3.2.4 項でも述べたとおり、WWW サーバと並列計算機などの計算サーバは、一般的に、ネットワークで接続された異なる計算機となる。そのため、WWW サーバは、リモートシェルなどにより、計算サーバにジョブを発行する形で数値計算を行う。図 9 は、本研究で構築したシステムの、ジョブ発行ページである。

2.2.1 項のマルチスケール計算は、ジョブ発行時に、WWW 上で複数のコードを選択することにより実現する。たとえば、マクロスケールコードによって計算した結果を、ミクロスケールの初期パラメータとして用いる。さらに、ミクロスケール計算結果を、マクロスケール計算の初期パラメータとして利用する。異なる

るスケールのコード間でデータのやりとりを行うためには、統一した規格化手法と近似方法が必要となる。村田により提案されている手法²¹⁾により、擬似自己無撞着 (pseud-self-consistent) 的に、複数のコードによるマルチスケール計算を実現することができる。マルチスケール計算環境の WWW への実装は、今後の課題である。

なお、図 4 のデータベースには、ジョブ情報 (入力パラメータ, 利用者, 計算機環境) および計算結果 (計算ステップ数, 精度) などを蓄積し, 同図の DBMS で管理する。これらの情報は, 3.4 節の知識ベースで利用される。

3.6 データ解析・可視化とデータフォーマット

WWW 上でシミュレーション結果の可視化は, Java 言語などを用いれば容易である²²⁾。図 4 に示す可視化サーバにより画像を作成し, WWW 上で閲覧することもできる。図 10 に, (a) POM::KEMPO1 によるシミュレーション結果の可視化や, (b) 2 次元計算の 3 次元可視化例を示す。可視化・解析環境は, 図 5, 図 6, 図 7 などの初期設定環境と共有することで, 資源の共有利用が可能となる。

異なるシミュレーションコード間で統一した可視化環境を提供するためには, コード間での出力データフォーマットの統一が必要となる。これまで, netCDF, HDF などのフォーマットなどの統一データフォーマットが提案されている²³⁾。また, グラフ化プログラムにより, データ構造の動的変化に対応する手法が, Manabe らにより提案されている²⁴⁾。

4. おわりに

1970 年代に問題解決環境 (PSE) の研究が始まり, 計算機とネットワークの発展とともに, 国内外において研究が進められてきた²⁵⁾。計算機シミュレーションにおいても, さまざまな分野で PSE が提案されている。しかし, 宇宙プラズマシミュレーション分野では, これまで, 十分な PSE 研究が行われていない。

筆者らは, 過去, 多くのプラズマシミュレーションから, プラズマシミュレーションの持つ問題点を認識してきた。^{26)~30)} 本研究は, 宇宙プラズマシミュレーションの問題点を整理し, これまで提案されてきた PSE 研究を適用・応用して, WWW をベースとした, 宇宙プラズマシミュレーションのための PSE の概要を提案したものである。提案した PSE の構成をまとめると, 次のようになる。

- モデル設定
- パラメータテスト (数値安定性と結果予測)

- データベースと知識ベース
- ジョブ管理
- 計算結果可視化・解析

本研究では, WWW をベースとしたプラズマシミュレーションのための PSE を, 試験的に構築した。その結果, 提案する PSE が, これまでのシミュレーション環境を改善することが, 明らかになった。ただし, 知識ベース, マルチスケール計算手法などについては, 今後, 詳細なデザインを検討し, 構築を進める必要がある。また, 2 次元・3 次元解析環境の実装, 衛星観測データとの比較のための環境, 並列計算などのハイパフォーマンスコンピューティングとの融合などが, これからの課題としてあげられる。

謝辞 本研究は, 科学技術振興事業団計算科学技術活用型特定研究開発推進事業での成果である。

参考文献

- 1) 松本 紘: 宇宙開拓とコンピュータ, 共立出版 (1996).
- 2) Matsumoto, H., Sato, T. and Reidel, D.: *Computer Simulations Space Plasmas*, Terra Publishing Co. (1984).
- 3) Omura, Y., Kojima, H., Miki, N., Mukai, T., Matsumoto, H. and Anderson, R.: Electrostatic Solitary Waves Carried by Diffused Electron Beams Observed by GEOTAIL Spacecraft, *Journal of Geophysical Research*, Vol.104, No.A7, pp.14, 627-14, 637 (1999).
- 4) Gallopoulos, E., Houstis, E. and Rice, J.R.: Problem-Solving Environments for Computational Science, *IEEE Computational Science and Engineering* (1994).
- 5) Markus, S., Weerawarana, S., Houstis, E. and Rice, J.R.: Scientific Computing via the World Wide Web, The Net // ELLPACK PSE Server, CSD-TR97-022 (1997).
- 6) 矢部 孝, 川田重夫, 福田昌宏: シミュレーション物理入門 — 超粒子モデルの世界, 朝倉書店 (1998).
- 7) Matsumoto, H. and Omura, Y.: *Computer Space Plasma Physics: Simulation Techniques and Software*, Terra Scientific Publishing Company, Tokyo (1993).
- 8) Bunemann, O.: Time reversible difference procedures, *J. Comp. Phys.* (1967).
- 9) 保原 充, 大宮司久明: 数値流体力学, 東京大学出版会, 東求 A (1994).
- 10) 村田健史, 高橋誠治, 大村善治, 松本 紘, 鶴飼正行: 2 次元ハイブリッドコードと MHD コードによるリコネクション現象の計算機実験, 愛媛大学工学部紀要, Vol.17, pp.499-510 (1998).

- 11) ライス, J.R.: 21 世紀の計算科学・工学, 別冊サイエンス, Vol.130, pp.16–19 (2000).
- 12) 松本正巳, 西守克巳, 川田重夫: WWW を用いた数値シミュレーション支援環境の構築, *Trans. JSCES*, Paper No.19990005 (1999).
- 13) Reynders, J.V.W., Forslund, D.W., Hinker, P.J., Tholburn, M., Kilman, D.G. and Humphrey, W.F.: OOPS: An Object-oriented Particle Simulation Class Library for Distributed Architectures, *J. Comp. Phys.*, Vol.87, pp.212–224 (1995).
- 14) Verboncoeur, J.P., Langdon, A.B. and Gladd N.T.: An Object-oriented Electromagnetic PIC Code, *J. Comp. Phys.*, Vol.87, pp.199–211 (1995).
- 15) Ueda, H.O., Nakata, M., Murata, T., Usui, H., Okada, M. and Ito, K.: An Object-oriented Design of Electromagnetic Wave Simulator for Multi Schemes, the Special Issue on Techniques for Constructing Microwave Simulators, *IEICE Trans. Electronics* (2001).
- 16) 上岡功治, 村田健史, 岡田正樹, 上田裕子, 大村善治, 松本 紘: オブジェクト指向プラズマ粒子シミュレーションコードの設計, 情報処理学会第 61 回全国大会講演論文集 (分冊 1), pp.13–14 (2000).
- 17) Rambaugh, J., Blaha, M., Premerlani, W., Eddy, F. and Lorensen, W.: *Object-Oriented Modeling and Design*, Prentice Hall (1991).
- 18) Rambaugh, J.: *OMT Insights*, Sigs Reference Library (1996).
- 19) Nakamura, T.K. and Hoshino, M.: One-over-polynomial Approximation for Linear Kinetic Dispersion and its Application to Relativistic Cyclotron Resonance, *Phys of Plasmas*, 5, 3547 (1998).
- 20) 保志克則, 藤井義巳: 科学・工学のための問題解決システム, 別冊サイエンス, Vol.130, pp.90–95 (2000).
- 21) 村田健史: マルチスケール計算のための規格化手法についての考察, 応用数学会論文誌 (2001). (投稿中).
- 22) 山本芳人: Java による図形処理入門, 工学図書, 東京 (1998).
- 23) 宮村倫司, 田中伸哉, 田久保宏行, 吉村 忍, 矢川元基: 大規模並列計算力学システムにおける入出力データの標準化, *Trans. JSCES*, Paper No.20000028 (2000).
- 24) Manabe, Y., Kawata, S. and Boonmee, C.: Use of Stored-numerical-data Information Extracted From a Computing Program in Scientific Visualization, *International Journal of Modeling and Simulation*, Vol.17, No.2, pp.166–168 (1997).
- 25) 田子精男: 問題解決を手助け—計算科学における問題解決環境 (PSE), 電子情報通信学会誌, Vol.82, No.4, pp.367–371 (1999).
- 26) Usui, H., Yamashita, F. and Matsumoto, H.: Computer Experiments on the Measurement of Reentry Plasma With Radio Waves, *Adv. in Space Res.*, 24, pp.1069–1072 (1999).
- 27) Omura, Y., Kojima, H., Umeda, T. and Matsumoto, H.: Observational Evidence of Dissipative Small Scale Processes: Geotail Spacecraft Observation and Simulation of Electrostatic Solitary Waves, Accepted for the Publication in *Astrophys. Space Sci. Journal* (2000).
- 28) Okada, M., Omura, Y. and Matsumoto, H.: Computer Experiments of Spacecraft-plasma Interactions in a Dilute and High-beta-e Plasma With a Fast Plasma Flow, *J. Geophys. Res.*, 100, pp.21549–21559 (1995).
- 29) Ueda, H., Omura, Y. and Matsumoto, H.: Computer Simulations for Direct Conversion of HF Electromagnetic Wave Into Upper Hybrid Wave in Ionospheric Heating Experiments, *Ann. Geophysicae*, 16, pp.1251–1258 (1998).
- 30) 竹中聡, 臼井英之, 松本 紘: 再突入宇宙機ブラックアウト現象と磁場印加によるその回避法の計算機実験, 信学論 (B-II), Vol.J80-B-II, No.3, pp.257–264 (1997).

(平成 13 年 8 月 20 日受付)

(平成 13 年 10 月 23 日再受付)

(平成 13 年 11 月 19 日採録)

村田 健史 (正会員)



平成 7 年京都大学大学院工学研究科研究指導認定退学. 平成 7 年愛媛大学工学部助手. 平成 8 年愛媛大学工学部講師. 宇宙プラズマ計算機実験, 宇宙電波解析システムおよび無線ネットワークの研究に従事. 博士 (工学). 電子情報通信学会, 応用数学会, 地球電磁気・地球惑星圏学会, アメリカ地球物理学会 (AGU) 各会員.

Nurdiyana binti Abdul Ghani

(学生会員)



平成 13 年愛媛大学工学部情報工学科卒業. 平成 13 年同大学大学院工学研究科博士前期課程在籍. 問題解決支援環境の研究とシステムの開発に従事.

**白井 英之**

昭和 61 年京都大学大工学部電気第二学科卒業。平成元年同大学大学院修士課程修了。平成 4 年同研究指導認定退学。同年同大学超高層電波研究センター助手。平成 10 年同大学宙空電波科学研究センター助教授、現在に至る。電磁粒子コードを用いた計算機実験による宇宙プラズマ電磁気学環境の研究に従事。工学博士。地球電磁気・地球惑星圏学会、アメリカ地球物理学会（AGU）各会員。

**上田 裕子**

平成 4 年電気通信大学大学院電気通信学研究科単位取得退学。平成 4 年千葉大学工学部助手。平成 13 年宇宙開発事業団技術研究本部副主任研究員。宇宙プラズマおよび電磁波動計算機シミュレーションの研究に従事。博士（工学）。電子情報通信学会、地球電磁気・地球惑星圏学会、アメリカ地球物理学会（AGU）各会員。

**岡田 雅樹（正会員）**

平成 6 年京都大学大学院工学研究科研究指導認定退学。平成 6 年文部省国立極地研究所助手。宇宙飛翔体電磁波環境シミュレーションおよび地球磁気圏物理学の研究に従事。博士（工学）。地球電磁気・地球惑星圏学会、アメリカ地球物理学会（AGU）各会員。

**大村 善治**

昭和 60 年京都大学大学院工学研究科博士後期課程電気工学第二専攻研究指導認定退学。昭和 60 年京都大学工学部助手。昭和 63 年同大学超高層電波研究センター助手。平成元年同大学超高層電波研究センター助教授。平成 12 年同大学宙空電波科学研究センター教授。専門は電子ビーム不安定性と静電孤立波の計算機実験および電波科学計算機実験システムの開発。アメリカ地球物理学会（AGU）、地球電磁気・地球惑星圏学会各会員。

**松本 紘**

昭和 40 年京都大学工学部電子工学科卒業。昭和 42 年同大学大学院工学研究科修士課程修了。昭和 52 年同大学超高層電波研究センター教授。平成 4～10 年京都大学超高層電波研究センター長。平成 12 年同大学宙空電波科学研究センター教授、現在に至る。文部科学省宇宙科学研究所客員教授併任。文部科学省核融合科学研究所客員教授併任。独立行政法人通信総合研究所客員研究官およびアドバイザーボード。中国武漢大客座教授。工学博士。地球電磁気・地球惑星圏学会評議員。国際電波科学（URSI）会長。JGR アジア・太平洋地域編集長。河上記念財団作工会賞。昭和 50 年日本電磁気学会田中館賞。平成 5 年。平成 10 年 NASA Group Achievement Award。平成 11 年情報通信月間推進協議会志田林三郎賞。平成 12 年アンテナ・伝播国際シンポジウム論文賞受賞。アメリカ地球物理学会フェロー、IEEE シニア各会員。