電磁プラズマ粒子シミュレーション
pCANS

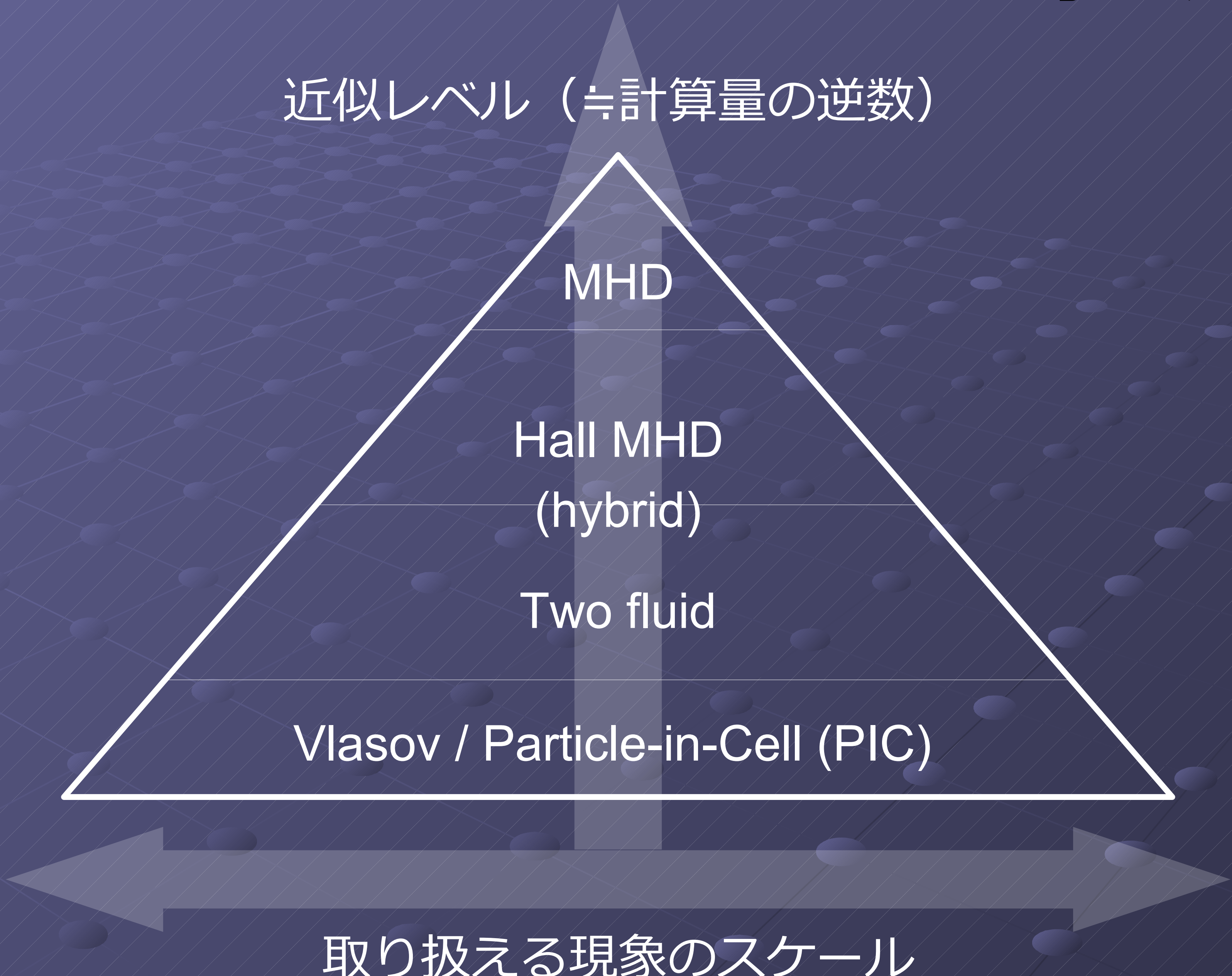
松本洋介
千葉大学理学研究科

内容

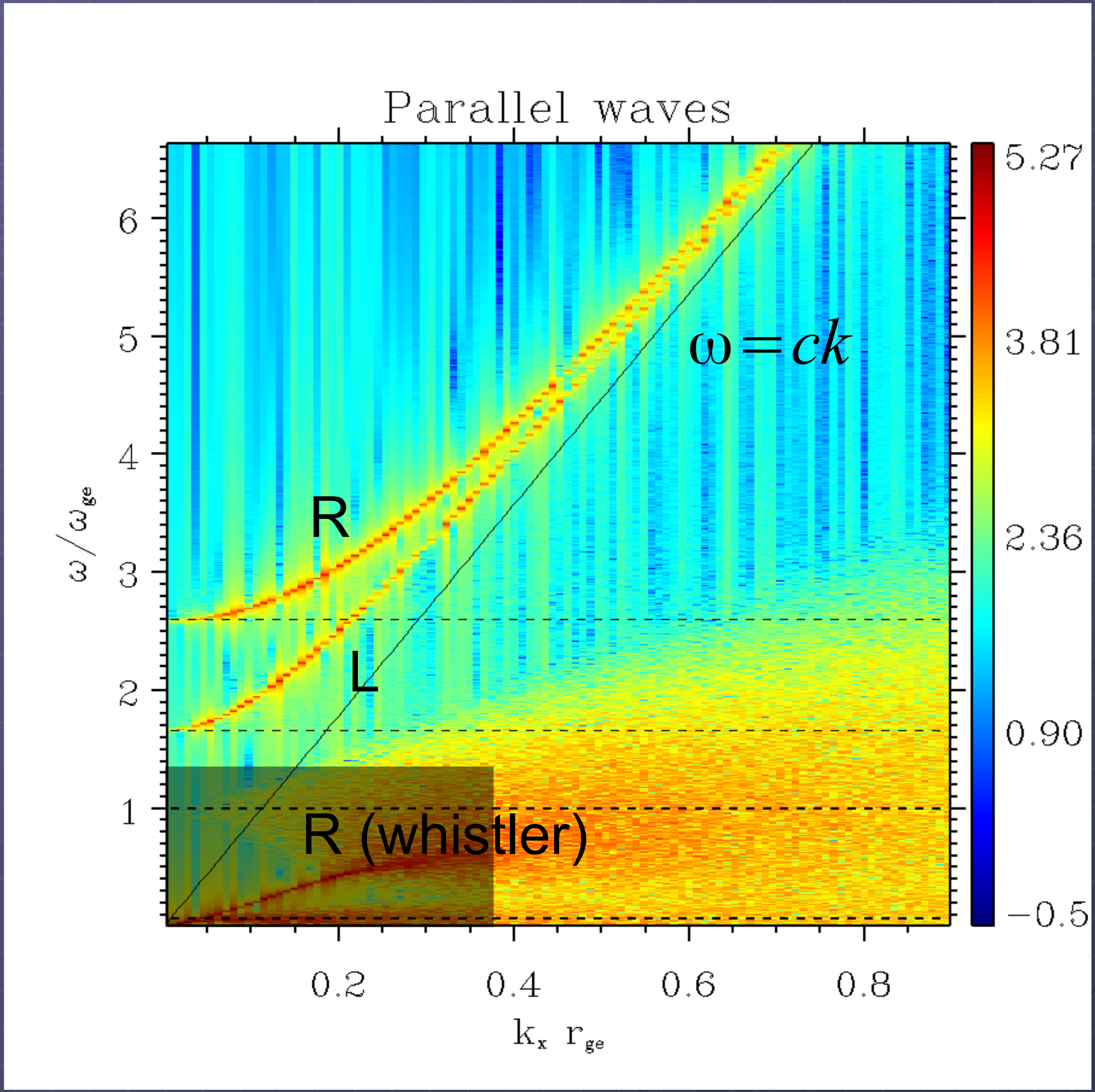
- イントロダクション
- 電磁プラズマ粒子シミュレーション（３章）
- pCANSの紹介（１，２，４、５章）

イントロダクション

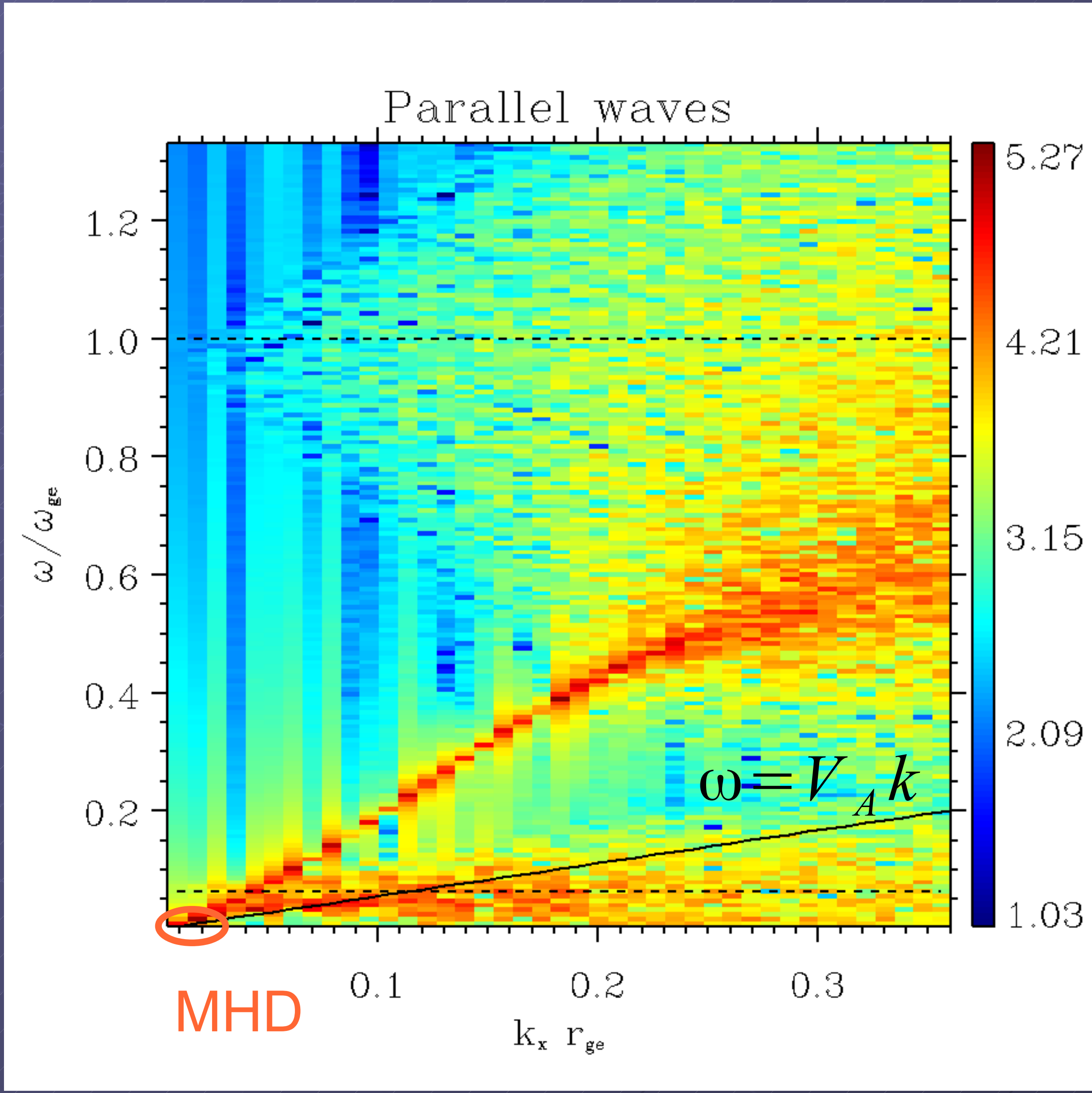
プラズマシミュレーション手法



プラズマ分散関係（横波・並行伝搬）



プラズマ分散関係（横波・並行伝搬）



MHD vs. PIC

MHD

- 流体的な大規模構造
- 構造形成（宇宙ジェット、星形成、銀河団）
- ダイナモ（地球、太陽）
- 恒星風、フレア
- 有限体積（差分）法
- 数値スキームにバリエーション（Roe's、HLLD、CIP、etc.）
- 計算コスト小
- 並列化効率大

PIC

- MHDスケールから電子スケールまで記述できる、無衝突プラズマ第一原理シミュレーション手法
- 粒子加速（無衝突衝撃波、磁気リコネクション）
- 粒子輸送（KH不安定、乱流）
- 磁場生成（Weibel不安定）
- 粒子法
- アルゴリズムはほぼ完成
- 計算コスト大
- 並列化に工夫が必要

基礎方程式

Vlasov-Maxwell方程式系

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} + \boldsymbol{v}\cdot\nabla f_s + \frac{q_s}{m_s}\left(\boldsymbol{E} + \frac{\boldsymbol{v}}{c}\times\boldsymbol{B}\right)\cdot\nabla_v f_s = 0$$

s=ion, electron

$$\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} = c\nabla\times\boldsymbol{B} - 4\pi\boldsymbol{J}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} = -c\nabla\times\boldsymbol{E}$$

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

$$\nabla\cdot\boldsymbol{E} = 4\pi\rho_e$$

Vlasov方程式の数値解法

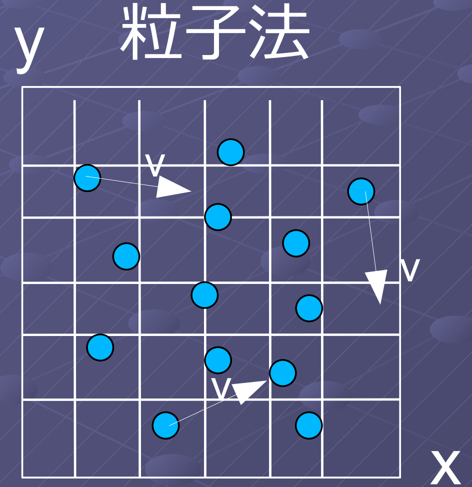
実空間の移流（移動）

$$\frac{\partial f_s}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\nabla f_s+\frac{q_s}{m_s}\left(\boldsymbol{E}+\frac{\boldsymbol{v}}{c}\times\boldsymbol{B}\right)\cdot\nabla_v f_s=0$$

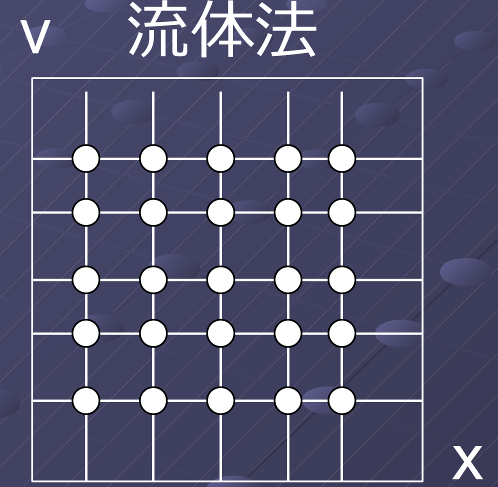
速度空間の移流（加速）

$$\frac{\partial f_s}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\nabla f_s+\frac{q_s}{m_s}\left(\boldsymbol{E}+\frac{\boldsymbol{v}}{c}\times\boldsymbol{B}\right)\cdot\nabla_v f_s=0$$

粒子法



流体法



- 分布関数f_sを粒子によって表現
- アルゴリズムが単純、安定
- 非熱的成分の運動を記述するのに、膨大な粒子数が必要
- 超並列計算機での効率的な計算が困難

- 位相空間をグッリドで定義して、f_sを直接解く手法
- 最大６次元線形移流問題
- 非熱的成分まで記述可能
- 高効率なベクトル化・並列化が容易

電磁プラズマ粒子シミュレーション

粒子と電磁場

粒子の運動、加速

$$\frac{d\boldsymbol{x}_p}{dt}=\frac{\boldsymbol{u}_p}{\gamma_p}$$

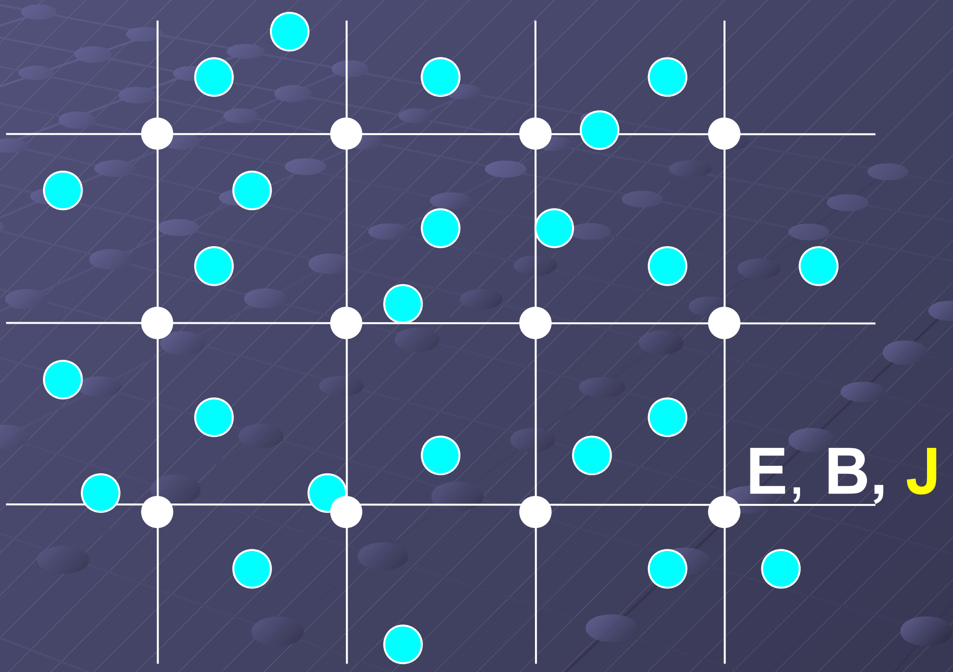
$$\frac{d\boldsymbol{u}_p}{dt}=\frac{q}{m}\left(\boldsymbol{E}+\frac{\boldsymbol{u}_p}{c\gamma_p}\times\boldsymbol{B}\right)$$

$$\boldsymbol{J}=\sum_p q_p\frac{\boldsymbol{u}_p}{\gamma_p}$$

Maxwell equation

$$\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}=-c\nabla\times\boldsymbol{E}$$

$$\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}=c\nabla\times\boldsymbol{B}-4\pi\boldsymbol{J}$$



流体スケールからデバイ長まで自己無撞着に解くことができる。

全体の流れ

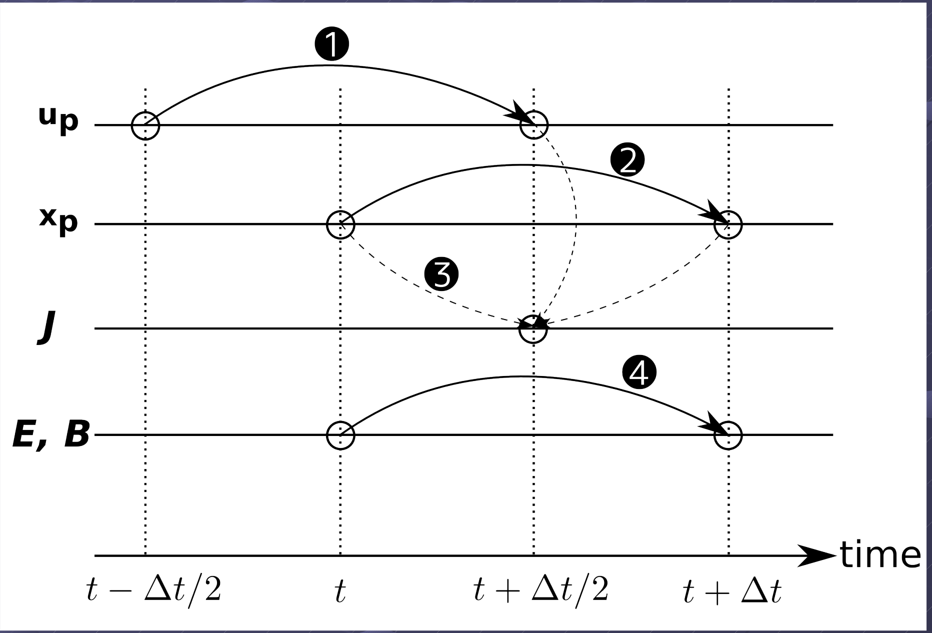
1. $$\frac{\boldsymbol{u}_p^{t+\Delta t/2}-\boldsymbol{u}_p^{t-\Delta t}/2}{\Delta t}=\frac{q_p}{m_p}\left(\boldsymbol{E}^t+\frac{\boldsymbol{u}_p^t}{c\gamma_p^t}\times\boldsymbol{B}^t\right)$$

2. $$\frac{\boldsymbol{x}_p^{t+\Delta t}-\boldsymbol{x}_p^t}{\Delta t}=\frac{\boldsymbol{u}_p^{t+\Delta/2}}{\gamma_p^{t+\Delta/2}}$$

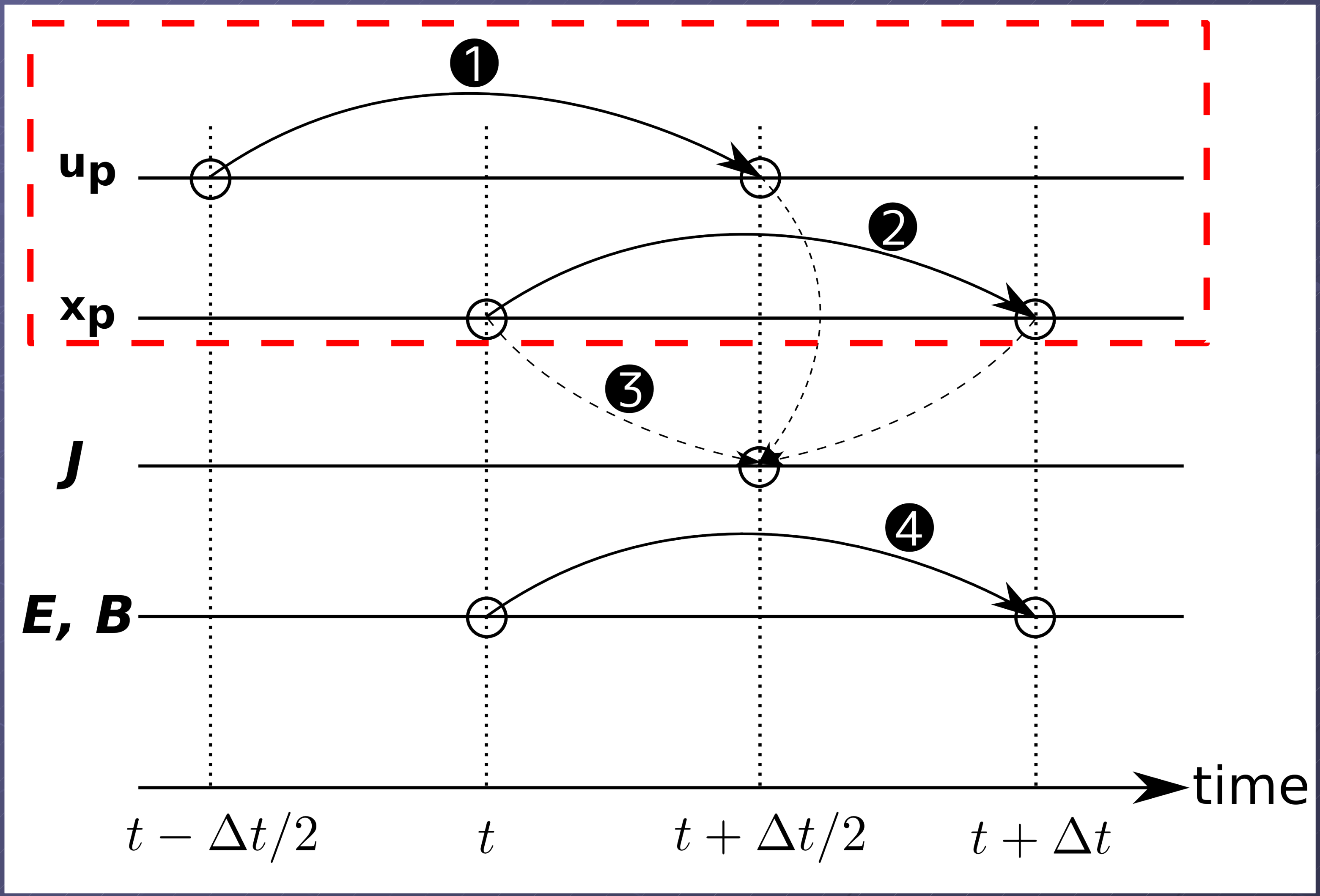
3. $$\boldsymbol{J}^{t+\Delta t/2}=\sum_p^N q_p\frac{\boldsymbol{u}_p^{t+\Delta t/2}}{\gamma_p}$$

4. $$\frac{\boldsymbol{B}^{t+\Delta t}-\boldsymbol{B}^t}{\Delta t}=-c\nabla\times\boldsymbol{E}^{t+\Delta t/2}$$

$$\frac{\boldsymbol{E}^{t+\Delta t}-\boldsymbol{E}^t}{\Delta t}=+c\nabla\times\boldsymbol{B}^{t+\Delta t/2}+4\pi\boldsymbol{J}^{t+\Delta t/2}$$



粒子の加速・移動



Buneman-Boris 法

$$\frac{\boldsymbol{u}_p^{t+\Delta t/2}-\boldsymbol{u}_p^{t-\Delta t}/2}{\Delta t}=\frac{q_p}{m_p}\left(\boldsymbol{E}^t+\frac{\boldsymbol{u}_p^t}{c\gamma_p^t}\times\boldsymbol{B}^t\right)$$

ここで、

$$\boldsymbol{u}_p^-=\boldsymbol{u}_p^{t-\Delta/2}+\frac{q_p\boldsymbol{E}^t}{m_p}\frac{\Delta t}{2}$$

$$\boldsymbol{u}_p^+=\boldsymbol{u}_p^{t+\Delta/2}-\frac{q_p\boldsymbol{E}^t}{m_p}\frac{\Delta t}{2}$$

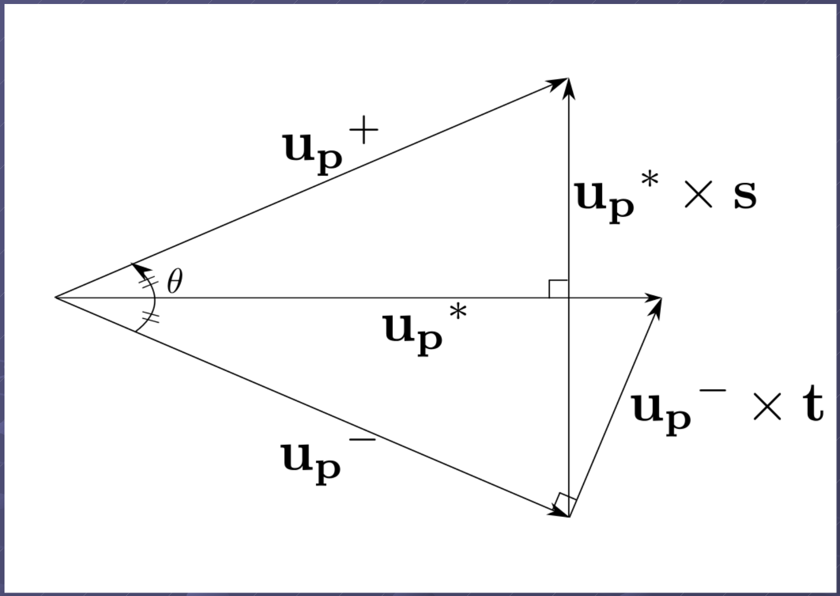
を導入して、上式に代入。

$$\boxed{\begin{gathered}\frac{\boldsymbol{u}_p^+-\boldsymbol{u}_p^-}{\Delta t}=\frac{q_p}{2\gamma_p m_p c}\left(\boldsymbol{u}_p^+-\boldsymbol{u}_p^-\right)\times\boldsymbol{B}^t\\ |\boldsymbol{u}_p^+|=|\boldsymbol{u}_p^-|\end{gathered}}$$

$$u_p^* = u_p^- + u_p^- \times t$$

$$u_p^+ = u_p^- + u_p^* \times s$$

$$t = \frac{q_p B}{m_p \gamma_p c} \frac{\Delta t}{2} \quad s = \frac{2t}{1+t^2}$$



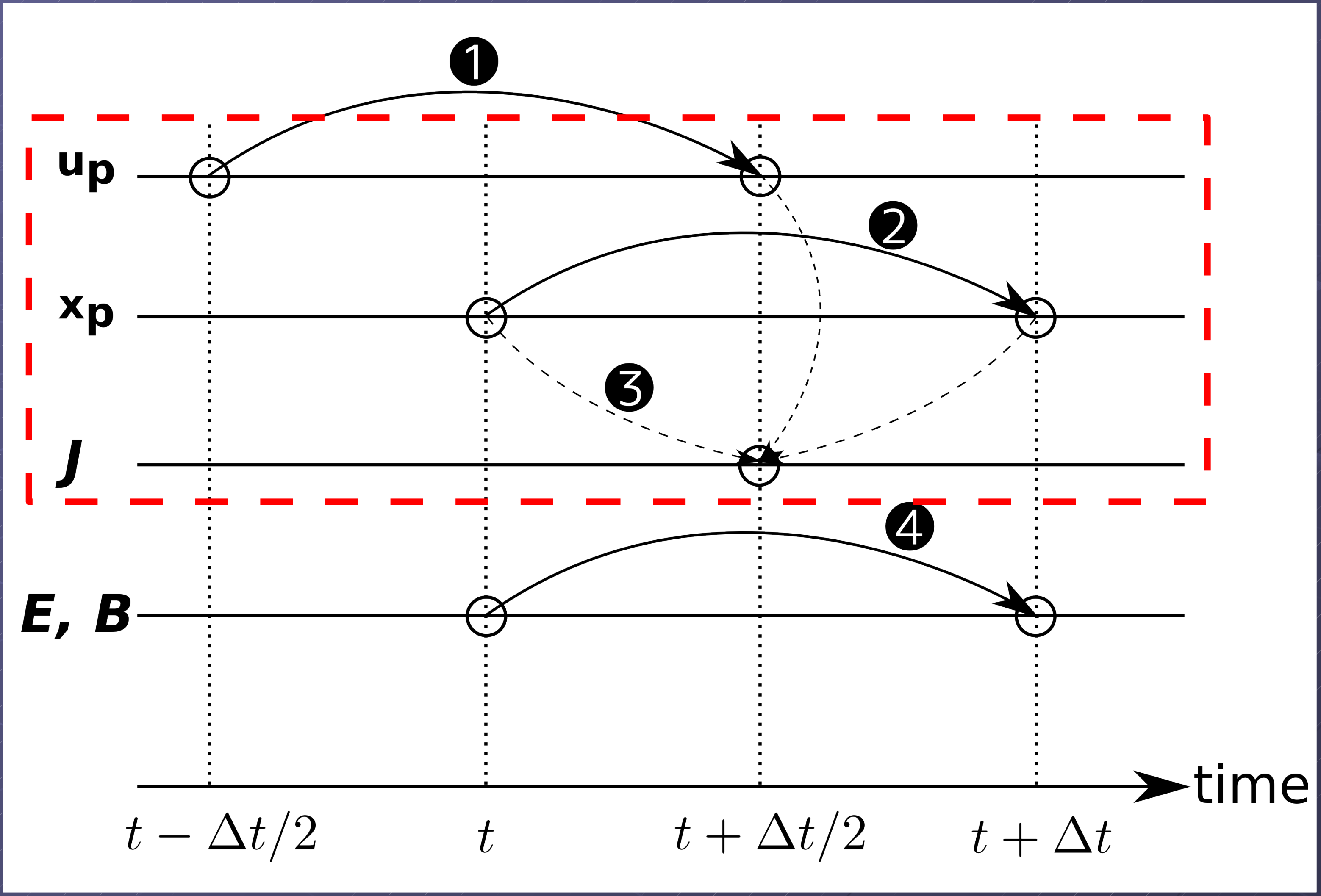
まとめると、、、

$$u_p^{t-\Delta t/2} \xrightarrow{\text{電場による加速}} u_p^- \xrightarrow{\text{磁場による回転}} u_p^+ \xrightarrow{\text{電場による加速}} u_p^{t+\Delta t/2}$$

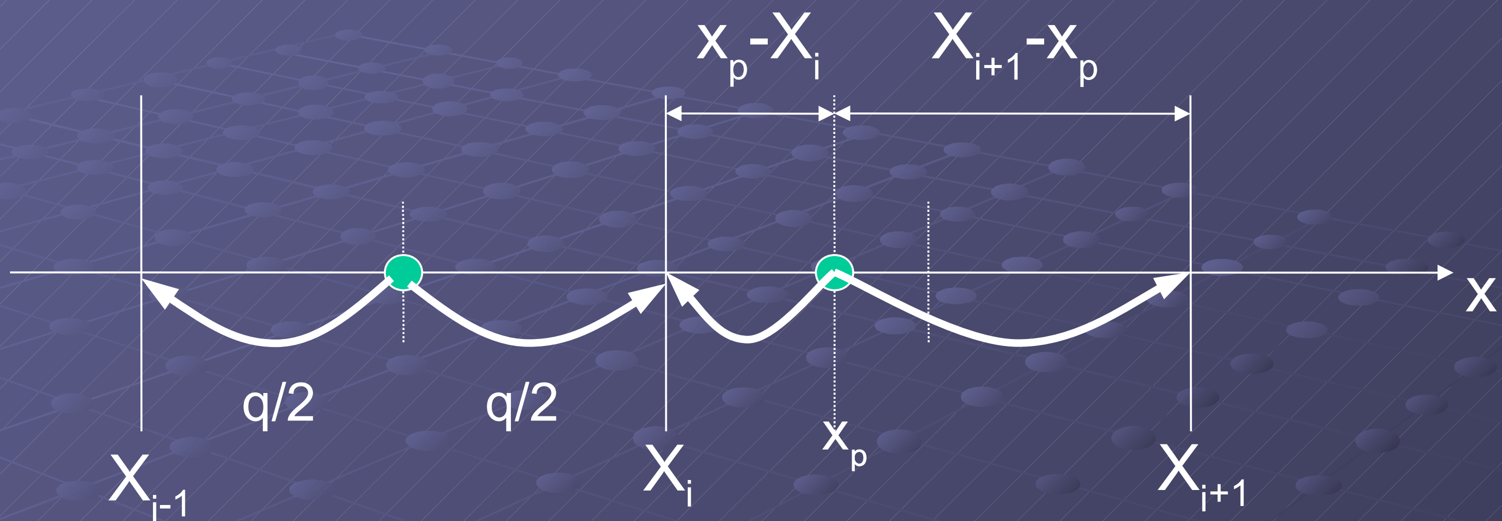
位置の更新

$$x_p^{t+\Delta t} = x_p^t + \frac{u_p^{t+\Delta t/2}}{\gamma^{t+\Delta t/2}} \Delta t$$

Particle-in-Cell法



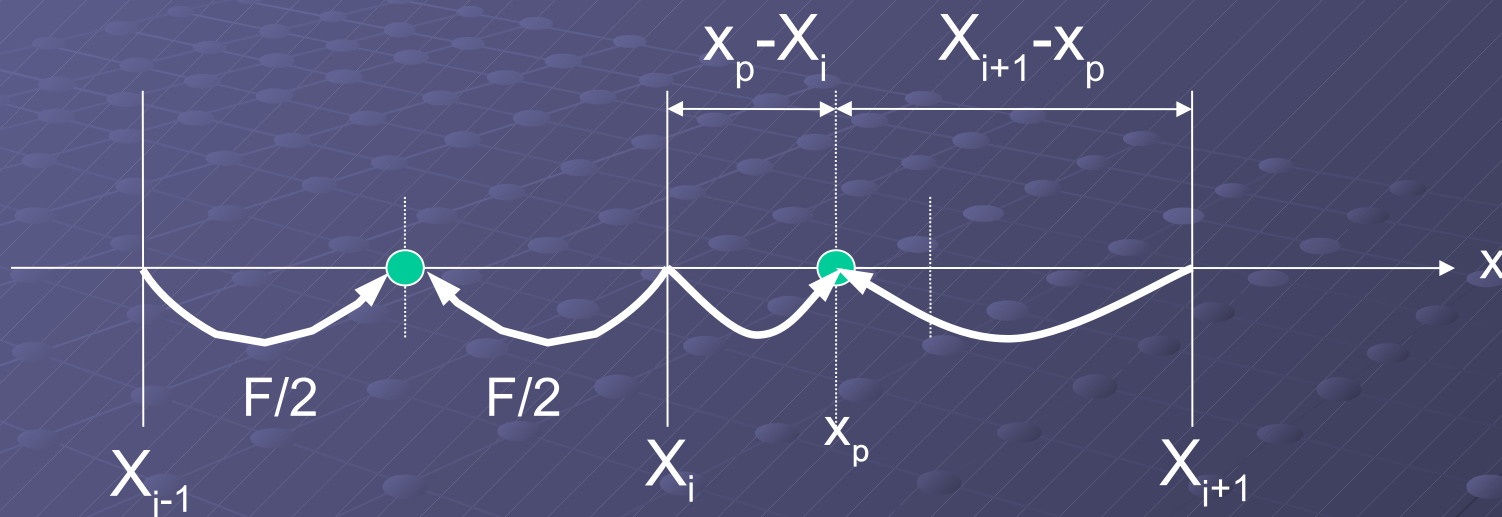
グリッド点に対する粒子の影響度合い



$$J_i = \sum_p q_p v_p \left(1 - \frac{x_p - X_i}{\Delta x}\right)$$ 一次の形状関数

$$J_{i+1} = \sum_p q_p v_p \left(\frac{x_p - X_i}{\Delta x}\right)$$

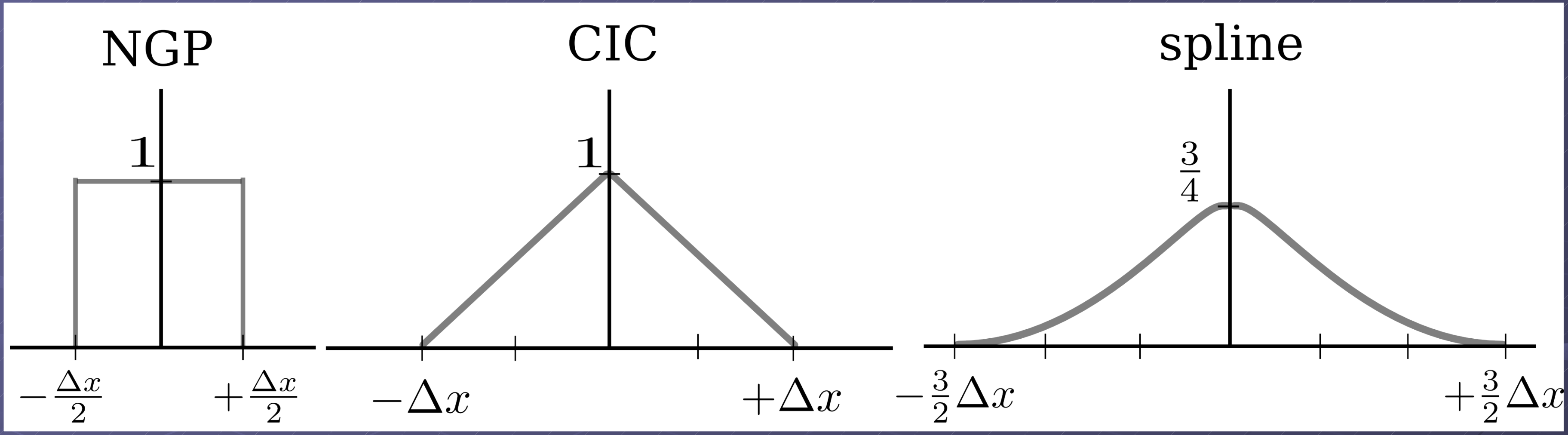
逆もまた然り



$$F_p = F_i\left(1 - \frac{x_p - X_i}{\Delta x}\right) + F_{i+1}\left(\frac{x_p - X_i}{\Delta x}\right)$$

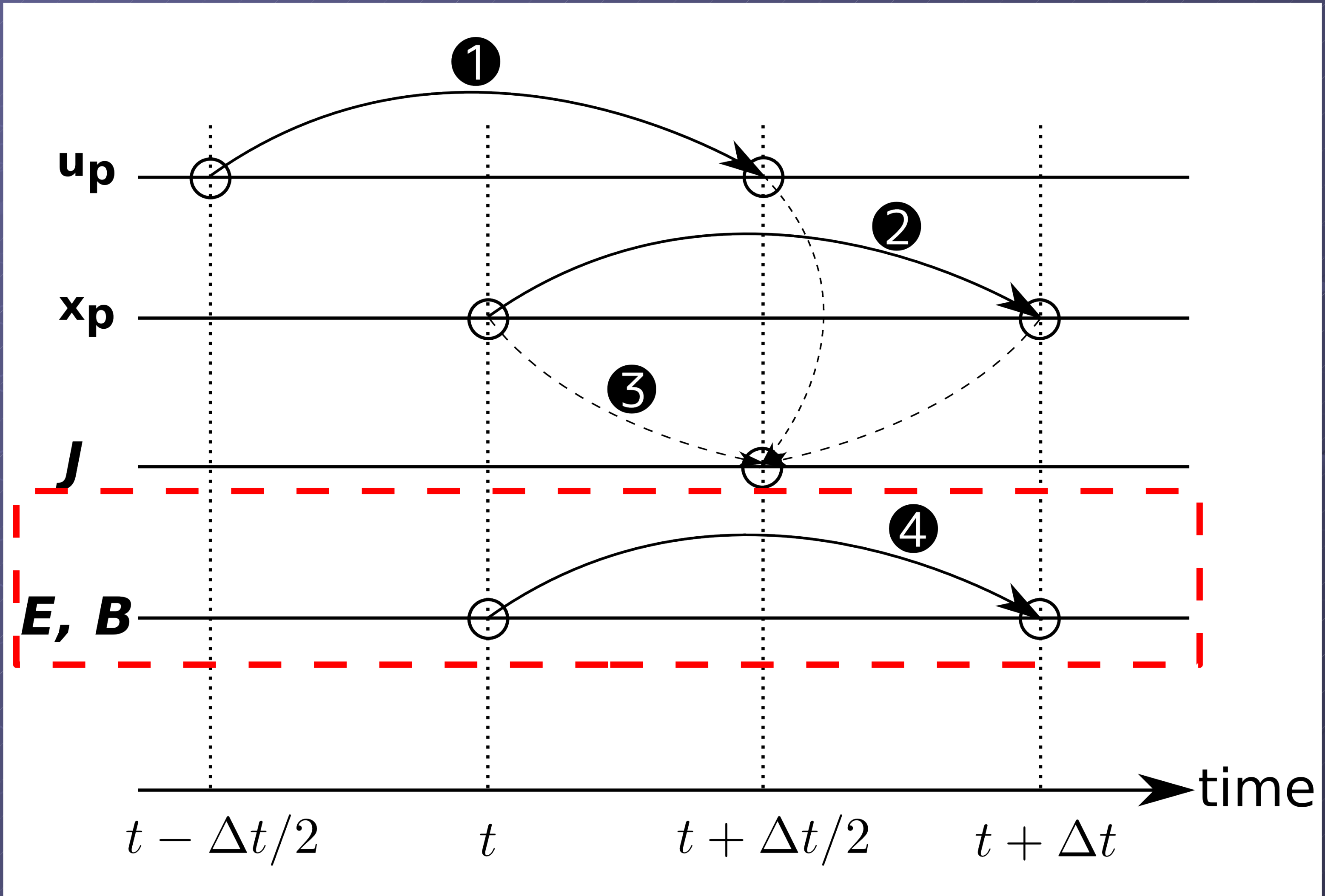
電流計算の時と同じ形状関数

様々な形状関数



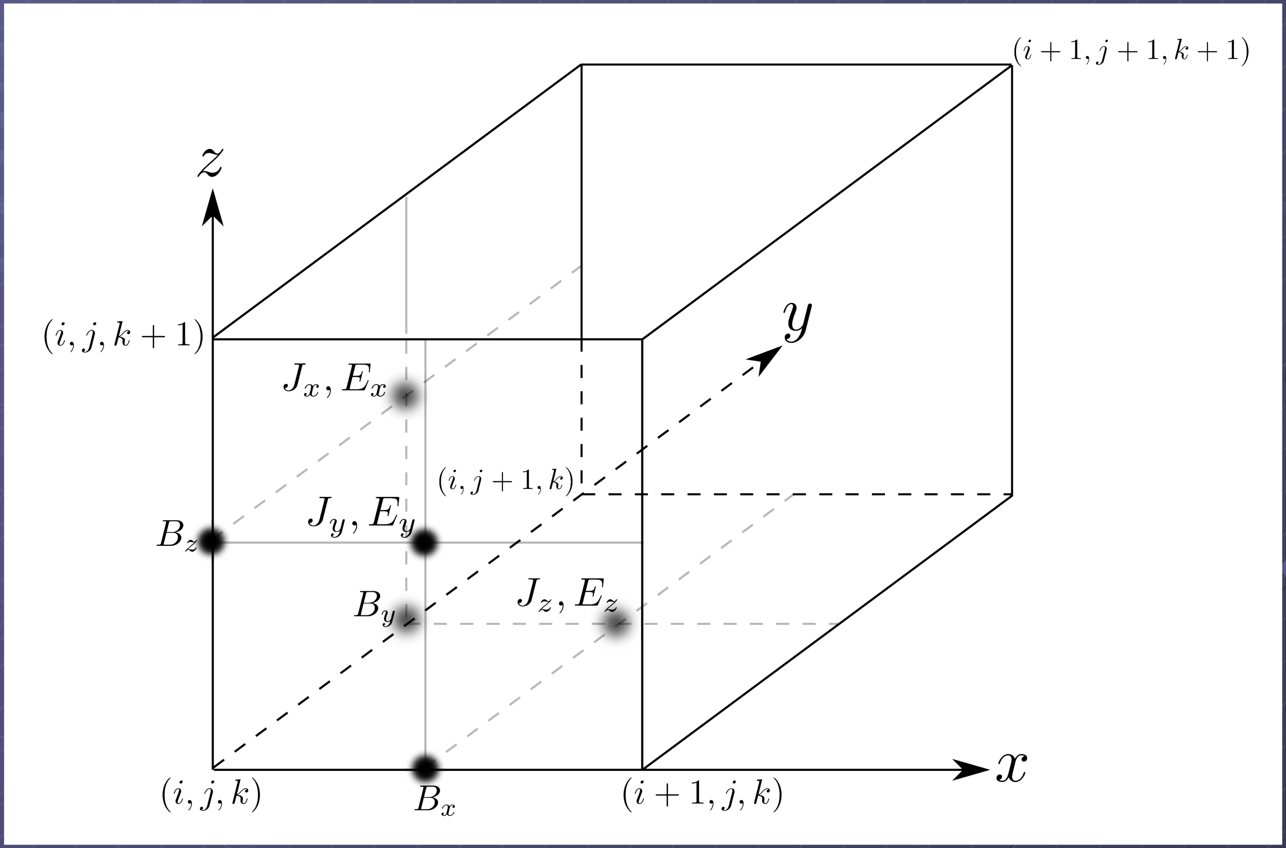
- 計算コストが一番低いのはNGPだが、コストと精度のバランスがとれたCIC法が広く使われる。
- 二次のスプラインの方法により、形状関数によるノイズを大きく減らせる。相対論的流れの現象を取り扱うのに必要とされる。

電磁場の数値解法



グリッド点への電磁場の配置

Yeeグリッド



- 空間二次精度で差分化
- レギュラー格子に対して、数値分散が軽減
- 磁場の発散なし条件（divB=0）を満たす

電磁場の陰的解法

$$\frac{\boldsymbol{B}^{t+\Delta t}-\boldsymbol{B}^{t}}{\Delta t}=-c\nabla\times\left(\theta\,\boldsymbol{E}^{t+\Delta t}+(1-\theta)\,\boldsymbol{E}^{t}\right)$$

$$\frac{\boldsymbol{E}^{t+\Delta t}-\boldsymbol{E}^{t}}{\Delta t}=c\nabla\times\left(\theta\,\boldsymbol{B}^{t+\Delta t}+(1-\theta)\,\boldsymbol{B}^{t}\right)\underbrace{-4\pi\boldsymbol{J}^{t+\Delta/2}}_{\text{from PIC}}$$

- 右辺に未来の情報を含む。この種の陰解法という。一方、過去の情報から求める方法を陽解法という。
- 電場と磁場は同じ時間ステップに定義される（↔FDTD法）
- θ=0.5のとき、クランク・ニコルソン法。θ=1.0で、後進オイラー法
- 陰解法は陽解法に比べて数値的に安定。
- 逆行列を求める必要があり、計算コストは大だが、粒子計算ではPIC法が全計算コストの大部分を占めるため、電磁場の陰解法化に伴う計算コストの増大は軽微

$$\delta B = -\theta c \Delta t \nabla \times \delta E - c \Delta t \nabla \times \boldsymbol{E}^t$$

$$\delta E = \theta c \Delta t \nabla \times \delta B + c \Delta t \nabla \times \boldsymbol{B}^t - 4\pi \Delta t \boldsymbol{J}^{t+\Delta t/2}$$

$\delta B = \boldsymbol{B}^{t+\Delta t} - \boldsymbol{B}^t$ $\delta B = \boldsymbol{B}^{t+\Delta t} - \boldsymbol{B}^t$

$$\left(I - (\theta c \Delta t)^2 \nabla^2\right) \delta \boldsymbol{B} = \theta (c \Delta)^2 \left(\nabla^2 \boldsymbol{B}^t + \frac{4\pi}{c} \nabla \times J^{t+\Delta t/2} \right) - c \Delta t \nabla \times \boldsymbol{E}^t$$

既知量

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

Conjugate gradient method
(共役勾配法)

束縛条件

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0$$
$$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 4\pi\rho_e$$

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

Yeeグリッド上に定義された磁場はd/dt (divB)=0を丸め誤差の範囲で満たすので、初期条件で満たせばその後の計算中も丸め誤差の範囲で満たす

誘導方程式のYeeグリッド上での差分化

$$B^{t+\Delta t}_{x,i+1/2,j} = B^{t}_{x,i+1/2,j} - \frac{E^{t+\Delta t/2}_{z,i+1/2,j+1/2} - E^{t+\Delta/2}_{z,i+1/2,j-1/2}}{\Delta y}\Delta t$$

$$B^{t+\Delta t}_{y,i,j+1/2} = B^{t}_{y,i,j+1/2} + \frac{E^{t+\Delta t/2}_{z,i+1/2,j+1/2} - E^{t+\Delta/2}_{z,i-1/2,j+1/2}}{\Delta x}\Delta t$$

差分化した $\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=\frac{B_{x,i+1/2,j}-B_{x,i-1/2,j}}{\Delta x}+\frac{B_{y,i,j+1/2}-B_{y,i,j-1/2}}{\Delta y}=0$$

差分化した誘導方程式を上式に代入すると、電場の項が打ち消し合って、

$$\frac{B^{t+\Delta t}_{x,i+1/2,j}-B^{t+\Delta t}_{x,i-1/2,j}}{\Delta x}+\frac{B^{t+\Delta t}_{y,i,j+1/2}-B^{t+\Delta t}_{y,i,j-1/2}}{\Delta y}=$$

$$\frac{B^{t}_{x,i+1/2,j}-B^{t}_{x,i-1/2,j}}{\Delta x}+\frac{B^{t}_{y,i,j+1/2}-B^{t}_{y,i,j-1/2}}{\Delta y}$$

時間ステップ前後で、差分化したdivBは維持される

$\underline{\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 4\pi\rho_e}$

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{J} = 0$$

ρ_eとJを独立にPIC法で計算すると、必ずしも電荷保存則を満たさないため、（静）電場に誤差が生じる。

電場補正による方法

1. ***E****へ更新 $$\frac{\boldsymbol{E}^* - \boldsymbol{E}^t}{\Delta t} = c\nabla \times \left(\theta \boldsymbol{B}^{t+\Delta t} + (1-\theta)\boldsymbol{B}^t\right) - 4\pi \boldsymbol{J}^{t+\Delta/2}$$

2. ϕに関するポアソン方程式を解く

$$\nabla^2 \phi = \nabla \cdot \boldsymbol{E}^* - 4\pi\rho_e$$

3. ϕを使って電場を補正し、$\boldsymbol{E}^{t+\Delta t}$とする

$$\boldsymbol{E}^{t+\Delta t} = \boldsymbol{E}^* - \nabla \phi$$

パラメタの決め方

Δtの決め方

電磁場は陰的解法で解いているので、光モードによるCFL条件はない。通常は、電子プラズマ振動を解ける程度に設定する。典型的には、

$$\omega_{pe} \Delta t < 0.1$$

Δxの決め方

通常はデバイ長程度に設定する。

$$\frac{\Delta x}{\lambda_D} \sim 1$$

pCANSの紹介

CANS
Coordinated Astronomical Numerical Software

- 磁気流体（MHD）シミュレーションコードパッケージ
- 太陽や星、星間空間などにおける 宇宙の流体現象を対象としたシミュレーションを簡単に実行可能
- 数値スキームの選択が可能
- 多くの物理課題が整備
- Fortran77
- IDLによる可視化

pCANS

- PICシミュレーションコードパッケージ
- CANSと同じようなディレクトリ構成
- CANS経験者であればすぐに使えるはず。。。
- １，２次元コード
- 物理課題の整備（weibel, mrx, shock, KH, etc.)
- Fortran90
- MPI並列化（PCからスパコンまでポータブル）
- IDLによる可視化

pCANSドキュメント

http://www.astro.phys.s.chiba-u.ac.jp/pcans

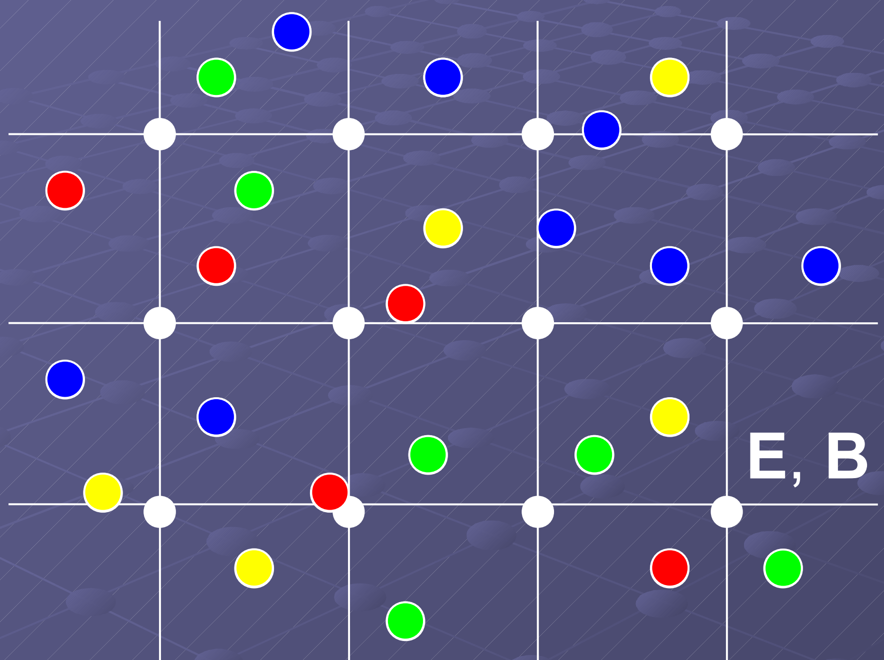
*padユーザーのためには、電子図書形式（epub）
も配布します（非公式）

開発メンバー

- 松本洋介（千葉大）- 統括、KH不安定、無衝突衝撃波
- 天野孝伸（東大） - 情報技術参与、無衝突衝撃波、二流体不安定
- 加藤恒彦（広島大） - Weibel不安定、無衝突衝撃波
- 銭谷誠司（NAOJ） - 磁気リコネクション
- 高橋博之（NAOJ） - 磁気リコネクション
- 三好由純（名大） - 電子温度異方性不安定
- 簑島敬（JAMSTEC）- 電子温度異方性不安定、IDL開発
- 坪内健（東大） - 無衝突衝撃波
- 星野真弘（東大）- アドバイザー
- 松元亮治（千葉大） - アドバイザー

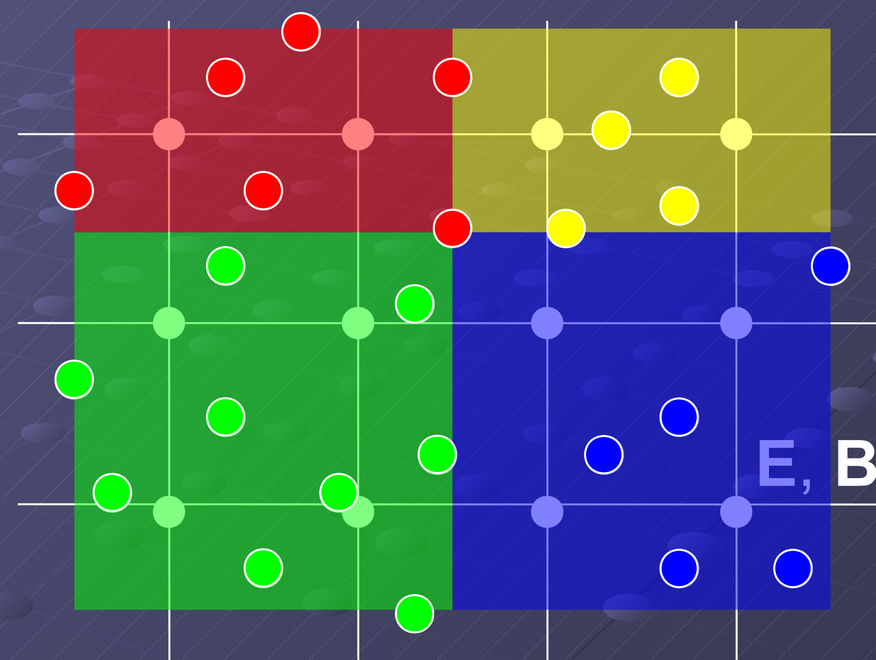
領域分割によるMPI並列化

粒子分割法



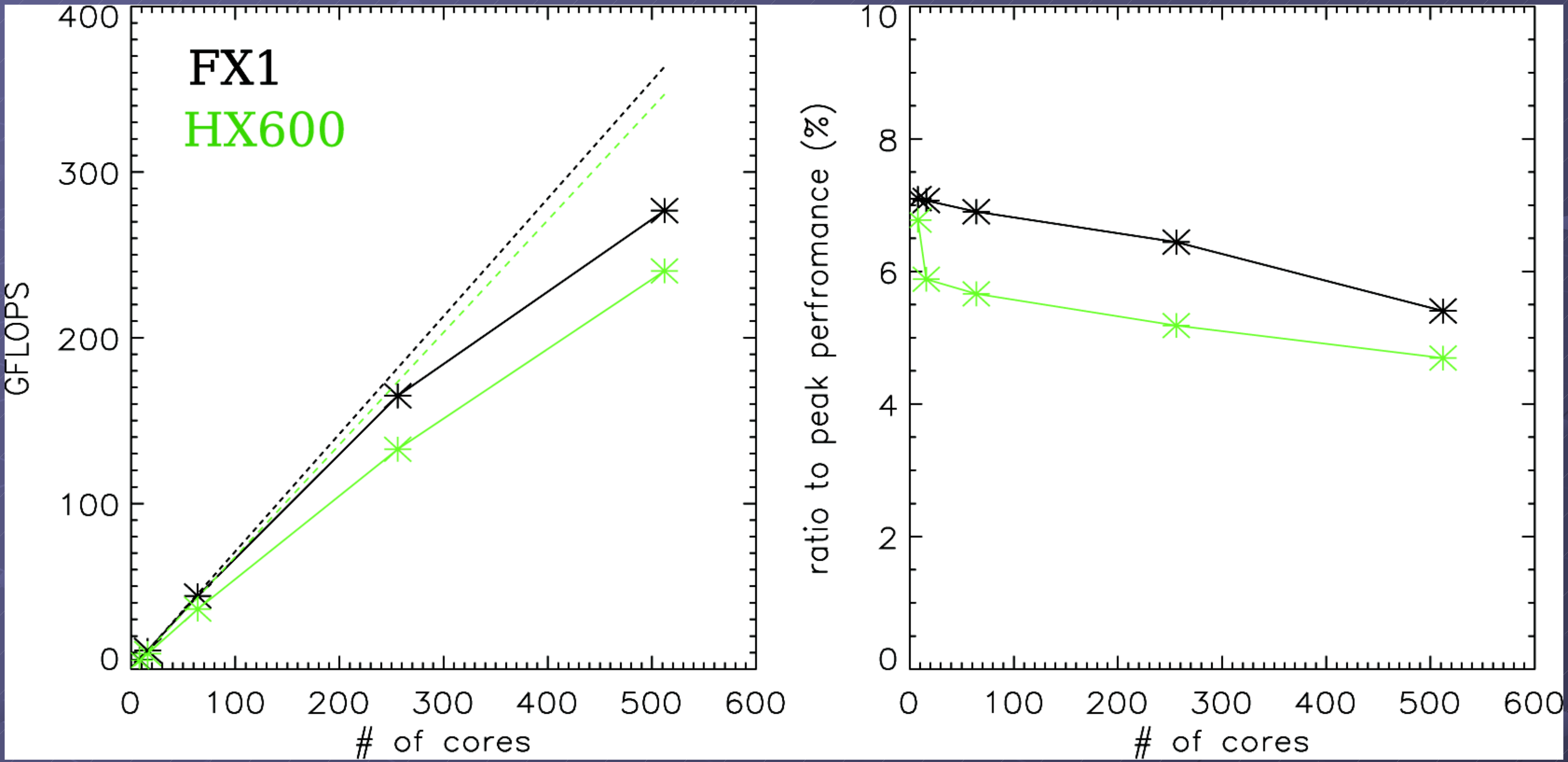
- 実装が容易
- 通信はreductionのみ
- キャッシュに乗りにくい
- 電磁場は各プロセスで共有
- 超並列（>100）計算では、並列化効率が悪い

領域分割法



- 超並列（>100）計算でもスケーリングが良い
- キャッシュに乗りやすい
- コーディングが面倒（領域間の粒子の受け渡し）
- 負荷バランスの崩れに注意

２次元コードの並列化効率
(weak scaling)

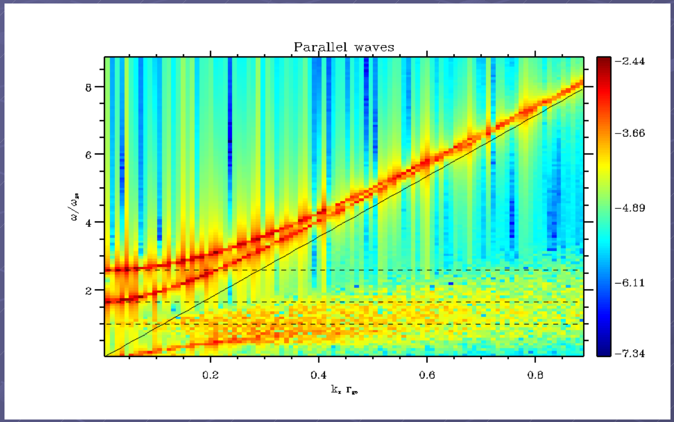


- 512並列まで、「そこそこ」スケール
- PCからスパコンまでポータブル
- 実行効率は5-7%程度

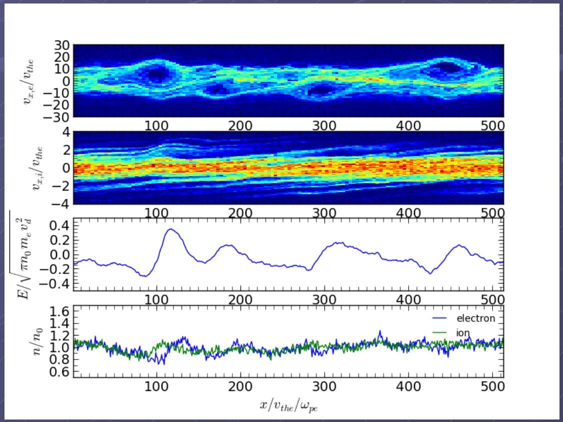
pCANS計算例

- 1次元課題

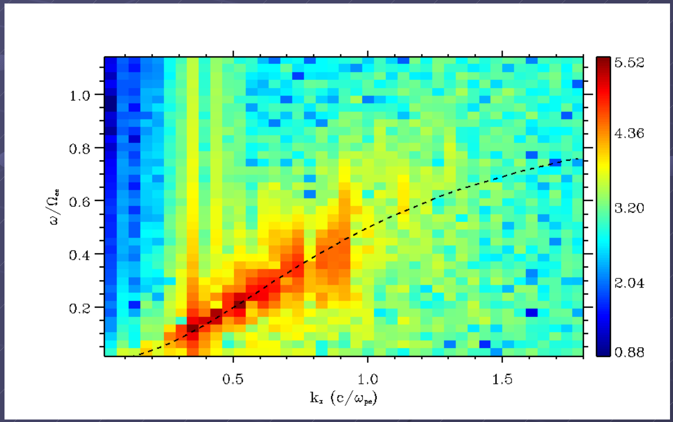
線形波動



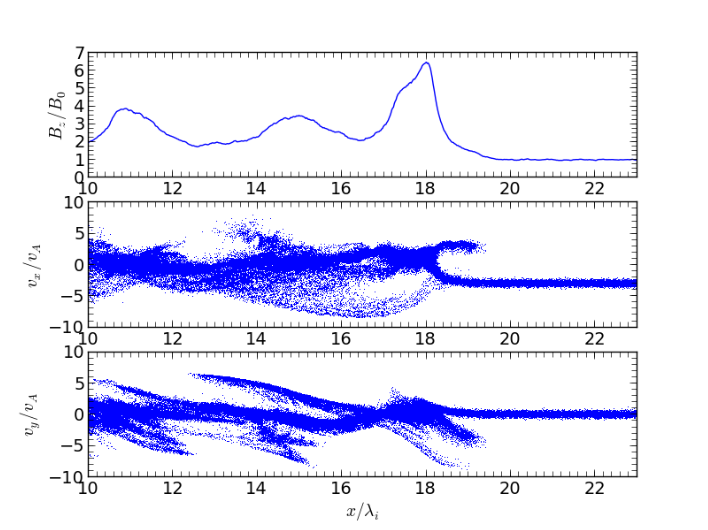
2流体不安定



温度異方性不安定

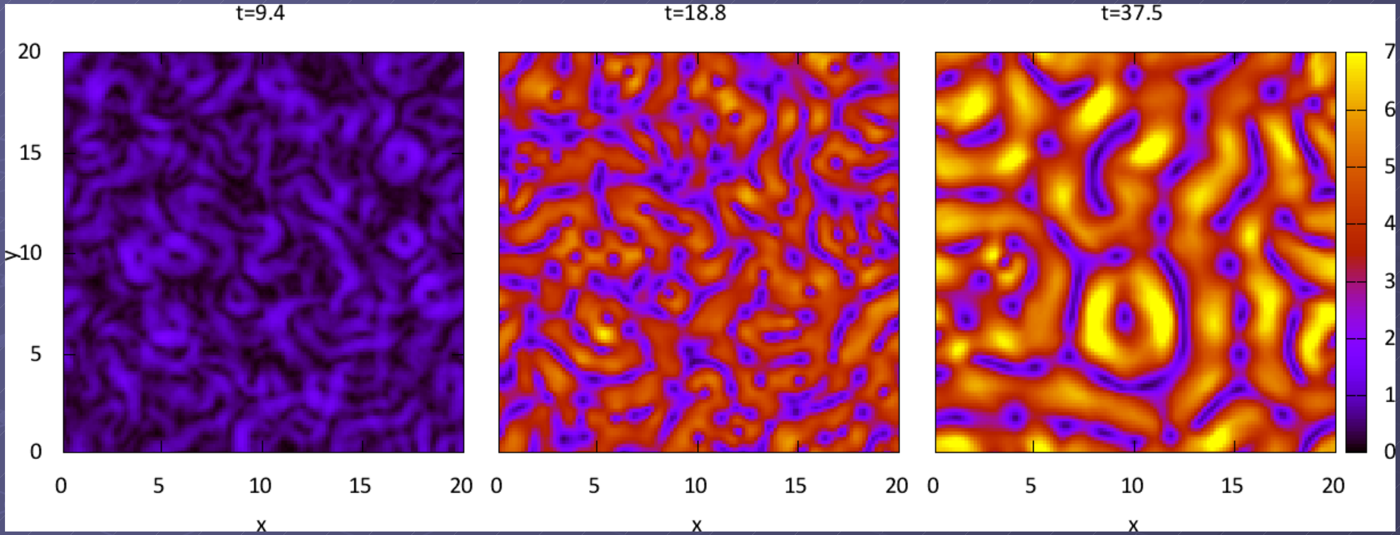


無衝突衝撃波

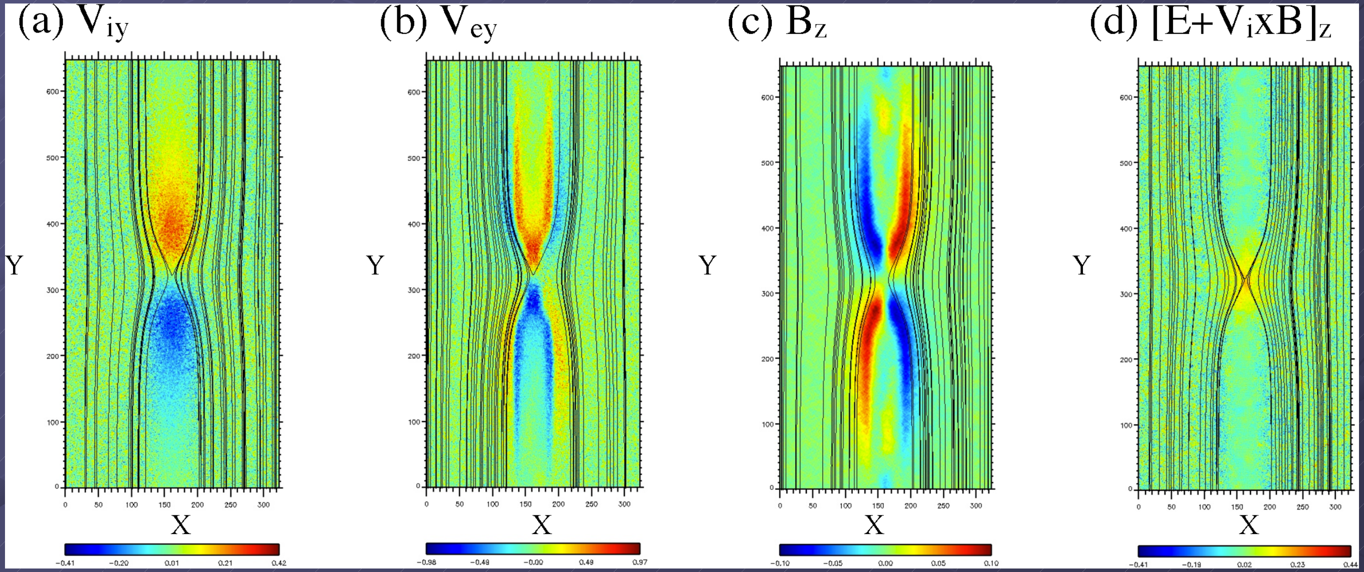


2次元課題

Weibel不安定

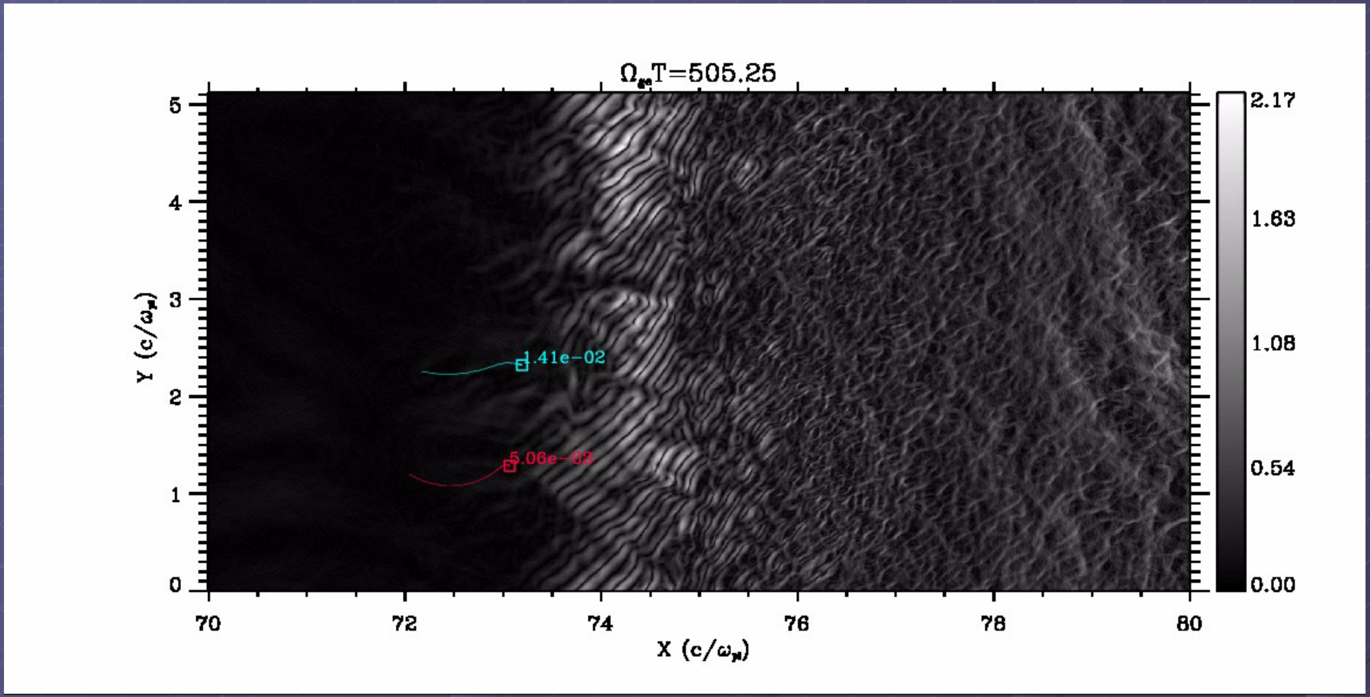


磁気リコネクション

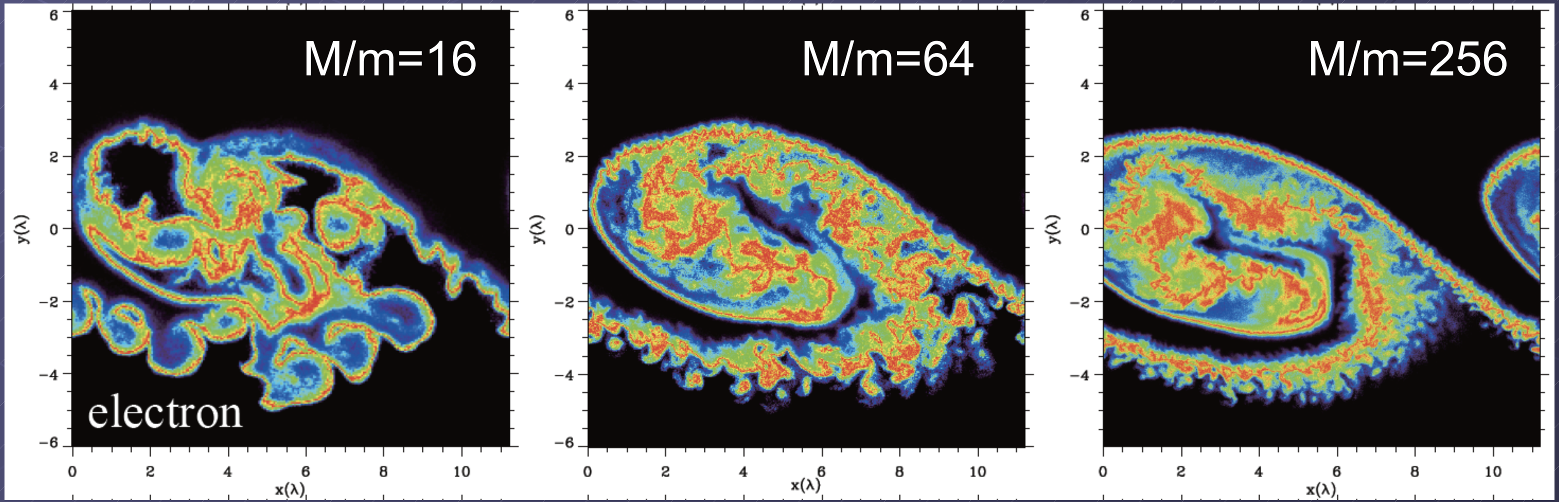


2次元課題

無衝突衝撃波

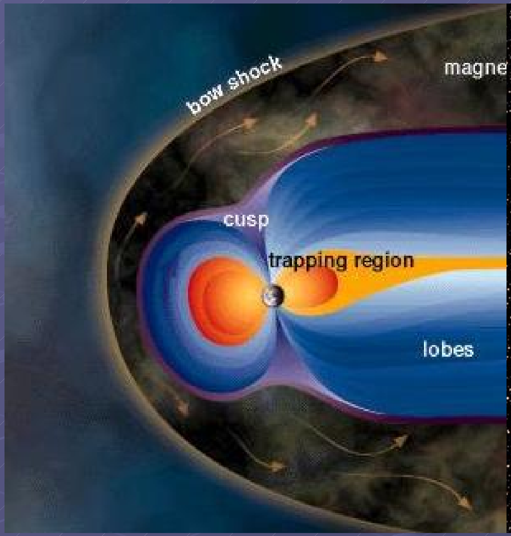


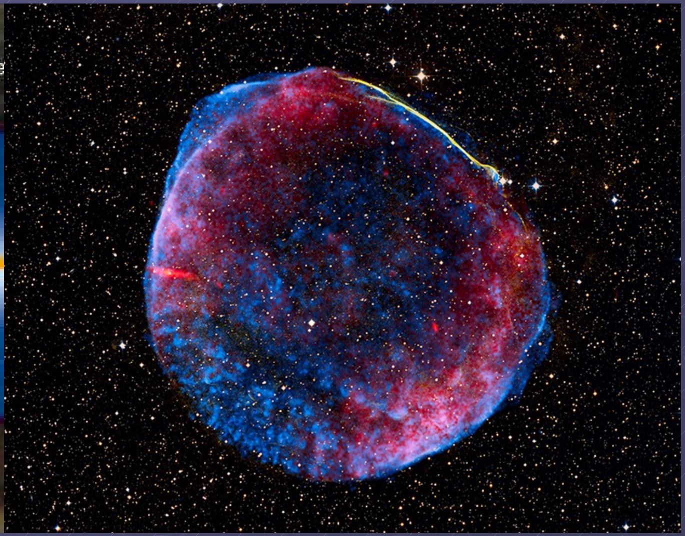
KH不安定

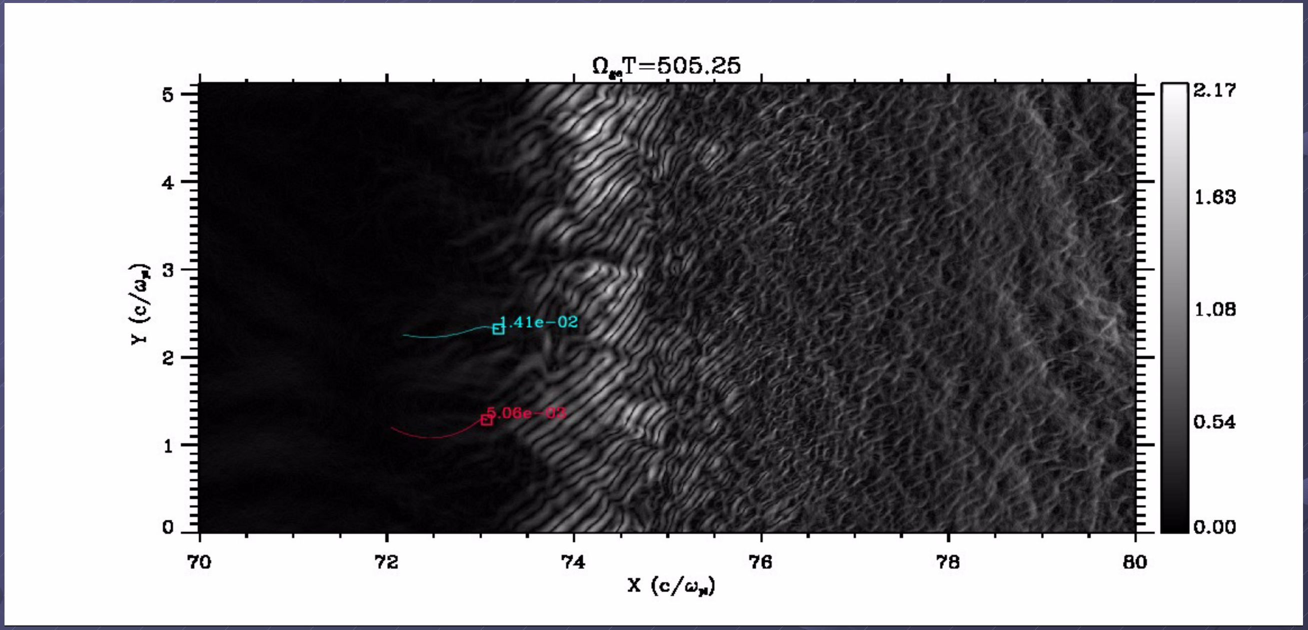


課題説明
（２次元）

２次元無衝突衝撃波

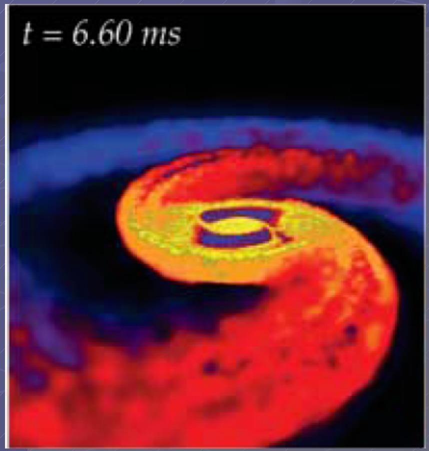

bow shock
cusp
trapping region
lobes



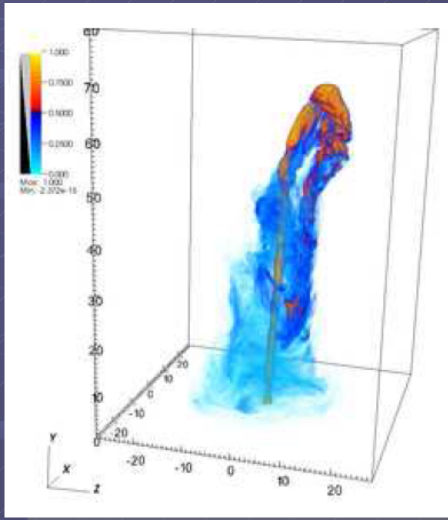

T=505.25
Y (c/ωpi)
X (c/ωpi)
0
1
2
3
4
5
70
72
74
76
78
80
1.41e-02
5.06e-02
2.17
1.63
1.08
0.54
0.00

ケルビン－ヘルムホルツ不安定

中性子星合体



宇宙ジェット



太陽風-惑星相互作用