

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

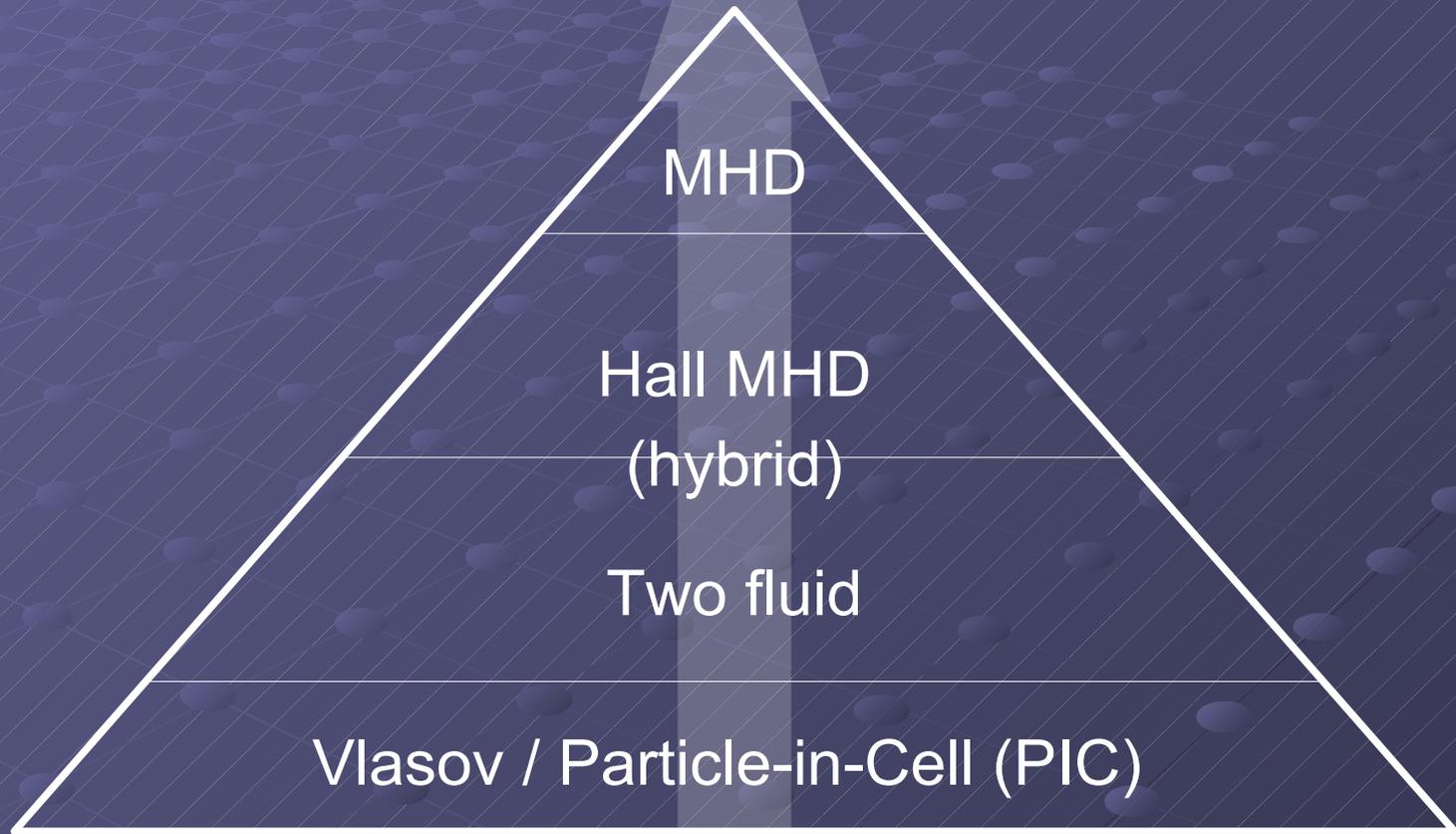
内容

- ▶ イン트로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

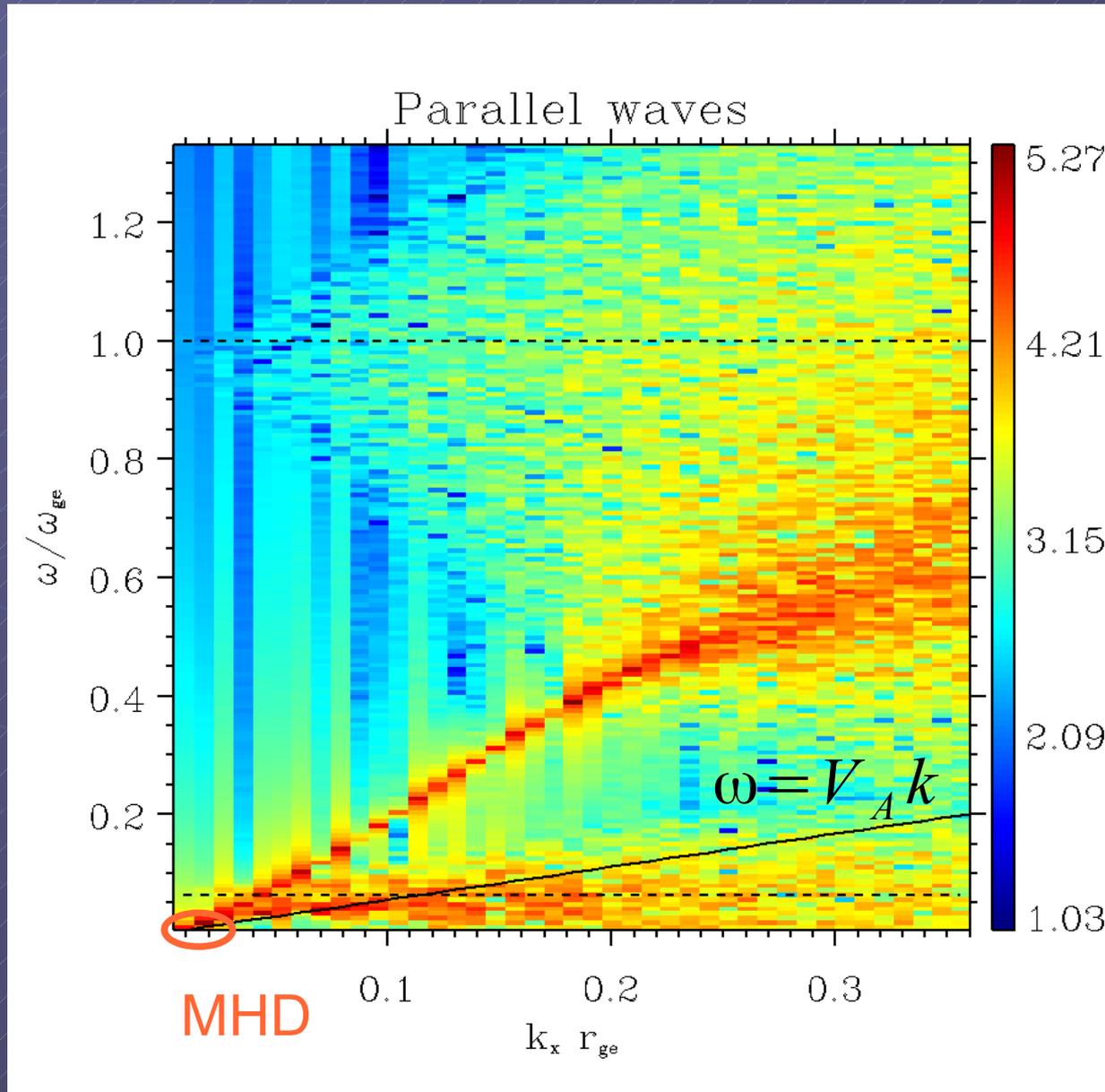
プラズマシミュレーション手法

近似レベル (≡計算量の逆数)



取り扱える現象のスケール

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

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

s=ion, electron

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

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

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

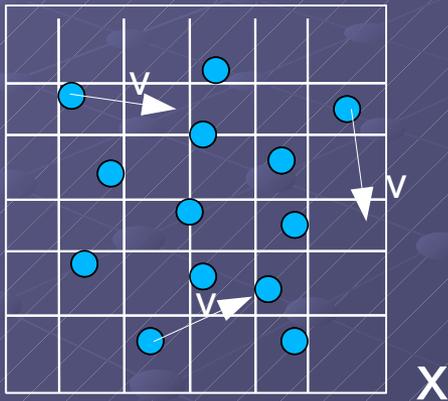
$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi \rho_e$$

Vlasov方程式の数値解法

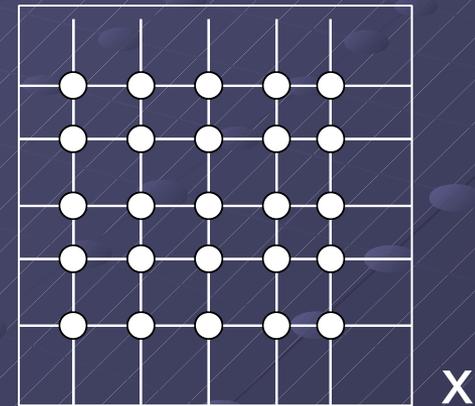
実空間の移流 (移動) $\frac{\partial f_s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_s + \frac{q_s}{m_s} \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right) \cdot \nabla_v f_s = 0$

速度空間の移流 (加速) $\frac{\partial f_s}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_s + \frac{q_s}{m_s} \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right) \cdot \nabla_v f_s = 0$

y 粒子法



v 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

- ▶ 位相空間をグリッドで定義して、 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

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

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

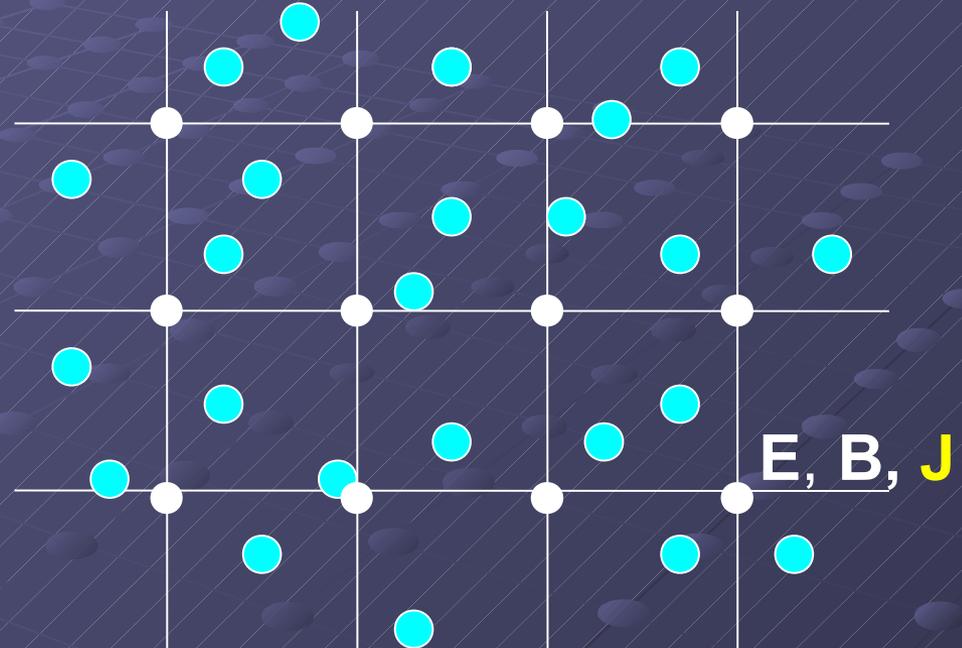
$$\mathbf{J} = \sum_p q_p \frac{\mathbf{u}_p}{\gamma_p}$$



Maxwell equation

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

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



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

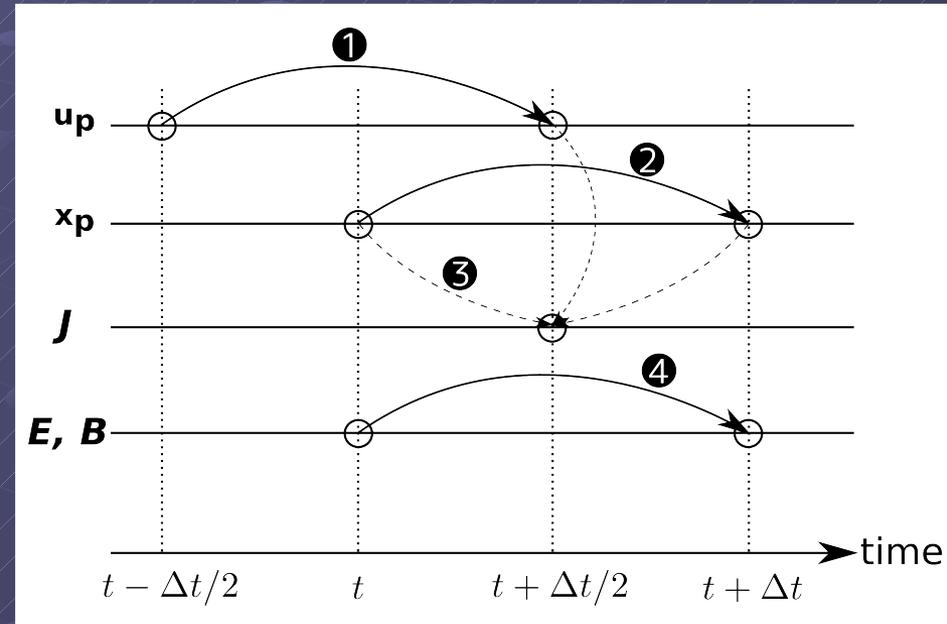
$$1. \quad \frac{\mathbf{u}_p^{t+\Delta t/2} - \mathbf{u}_p^{t-\Delta t/2}}{\Delta t} = \frac{q_p}{m_p} \left(\mathbf{E}^t + \frac{\mathbf{u}_p^t}{c \gamma_p^t} \times \mathbf{B}^t \right)$$

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

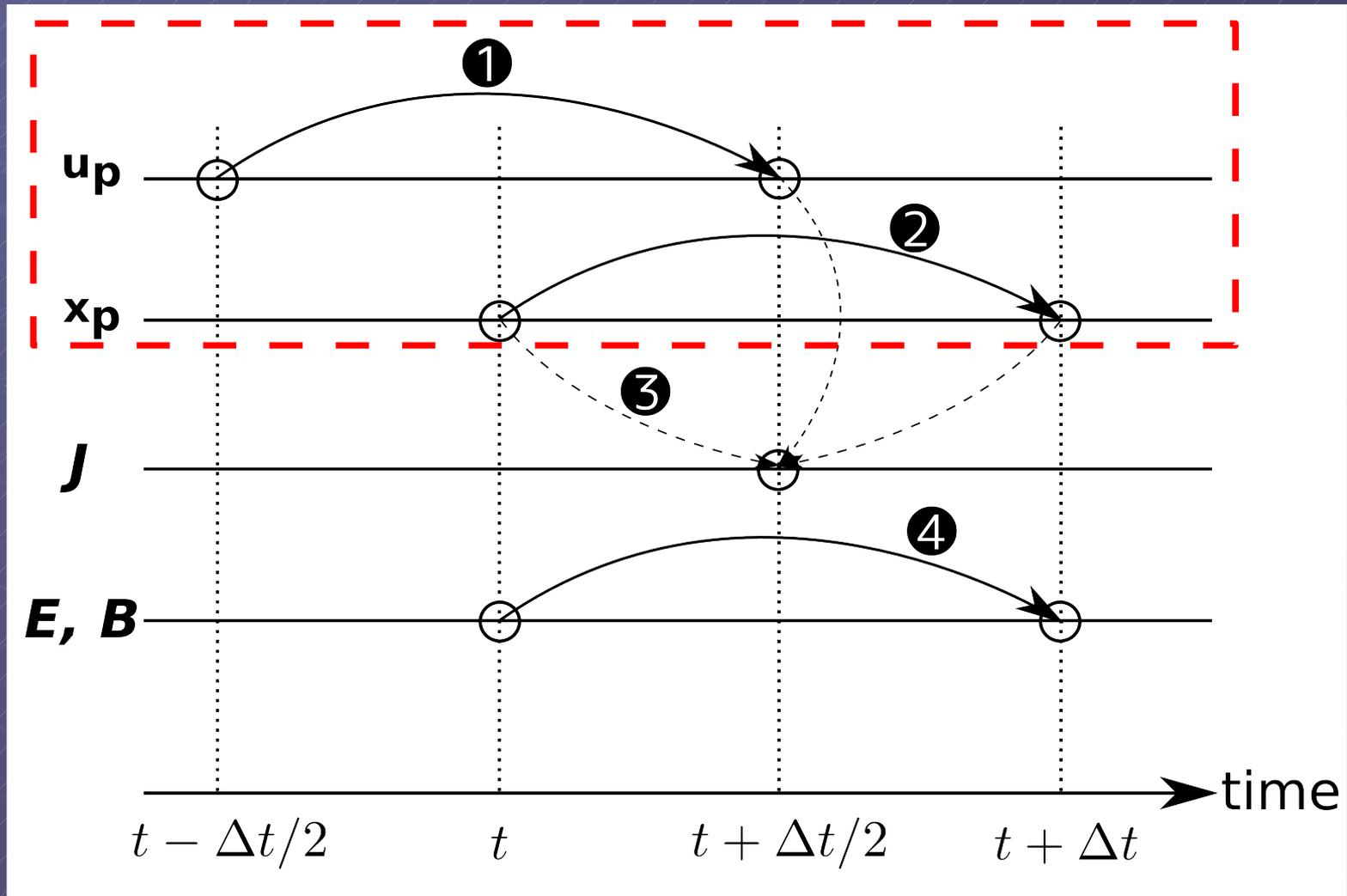
$$3. \quad \mathbf{J}^{t+\Delta t/2} = \sum_p^N q_p \frac{\mathbf{u}_p^{t+\Delta t/2}}{\gamma_p^{t+\Delta t/2}}$$

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

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



粒子の加速・移動



Buneman-Boris 法

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

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

ここで、

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

を導入して、上式に代入。

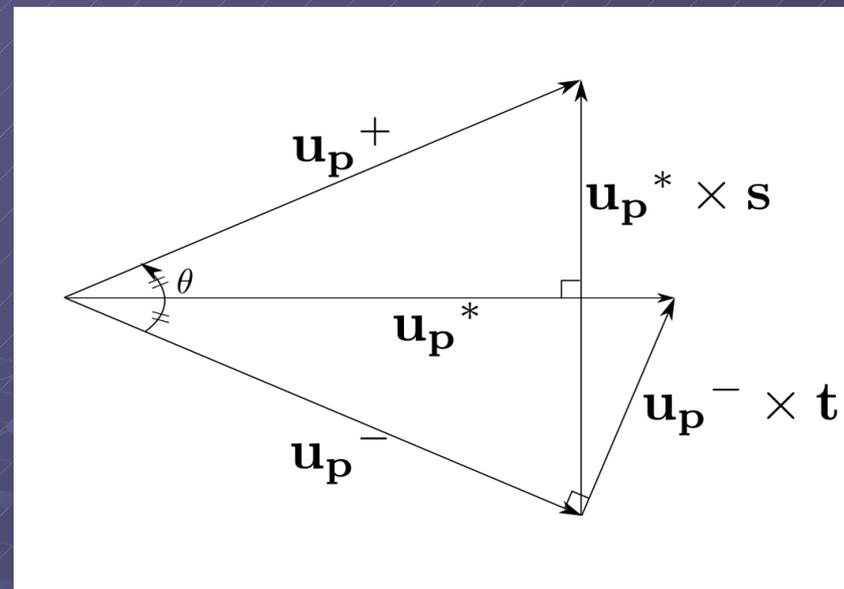
$$\frac{\mathbf{u}_p^+ - \mathbf{u}_p^-}{\Delta t} = \frac{q_p}{2 \gamma_p m_p c} (\mathbf{u}_p^+ - \mathbf{u}_p^-) \times \mathbf{B}^t$$

$$|\mathbf{u}_p^+| = |\mathbf{u}_p^-|$$

$$\mathbf{u}_p^* = \mathbf{u}_p^- + \mathbf{u}_p^- \times \mathbf{t}$$

$$\mathbf{u}_p^+ = \mathbf{u}_p^- + \mathbf{u}_p^* \times \mathbf{s}$$

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



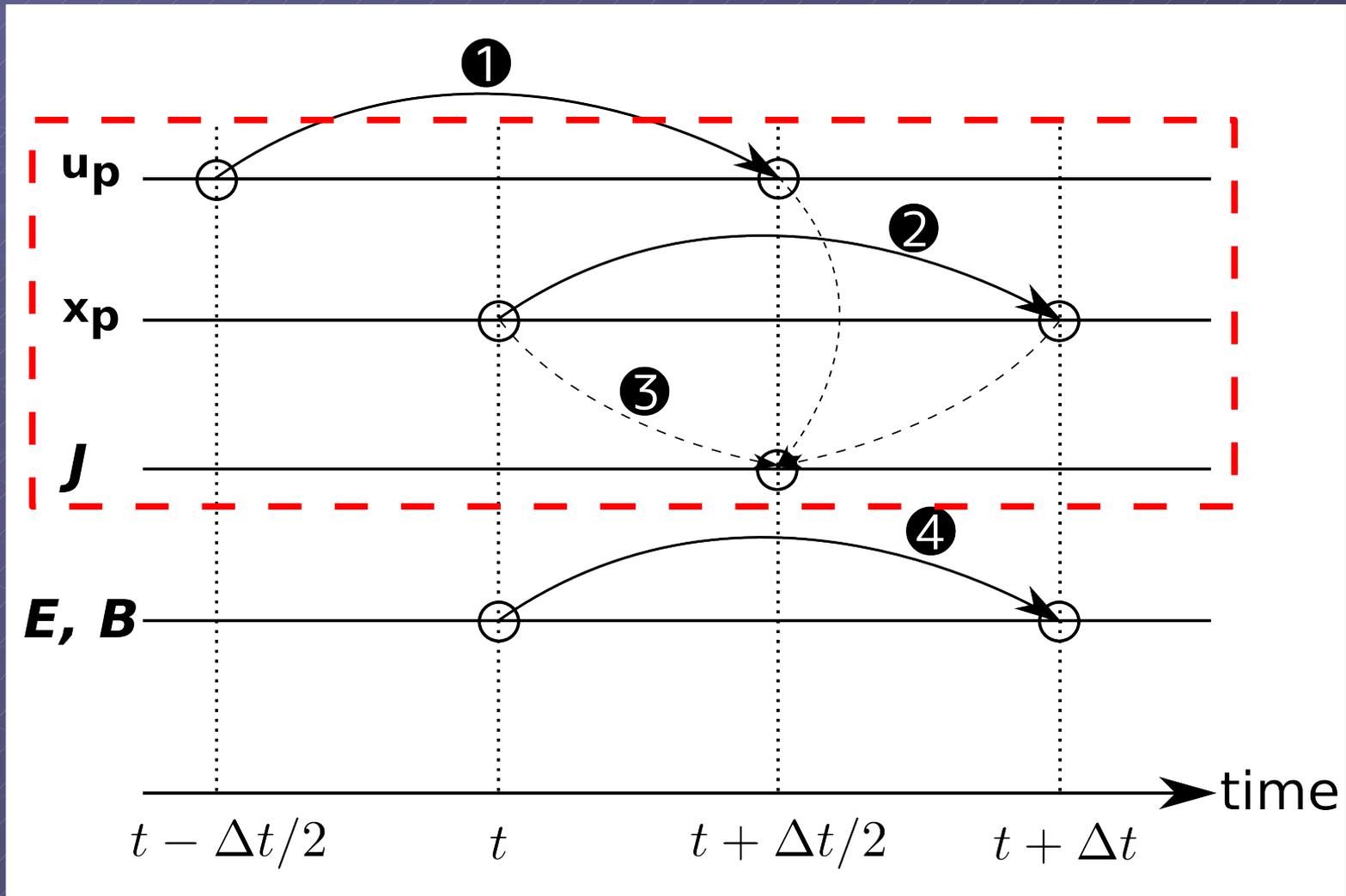
まとめると、、、



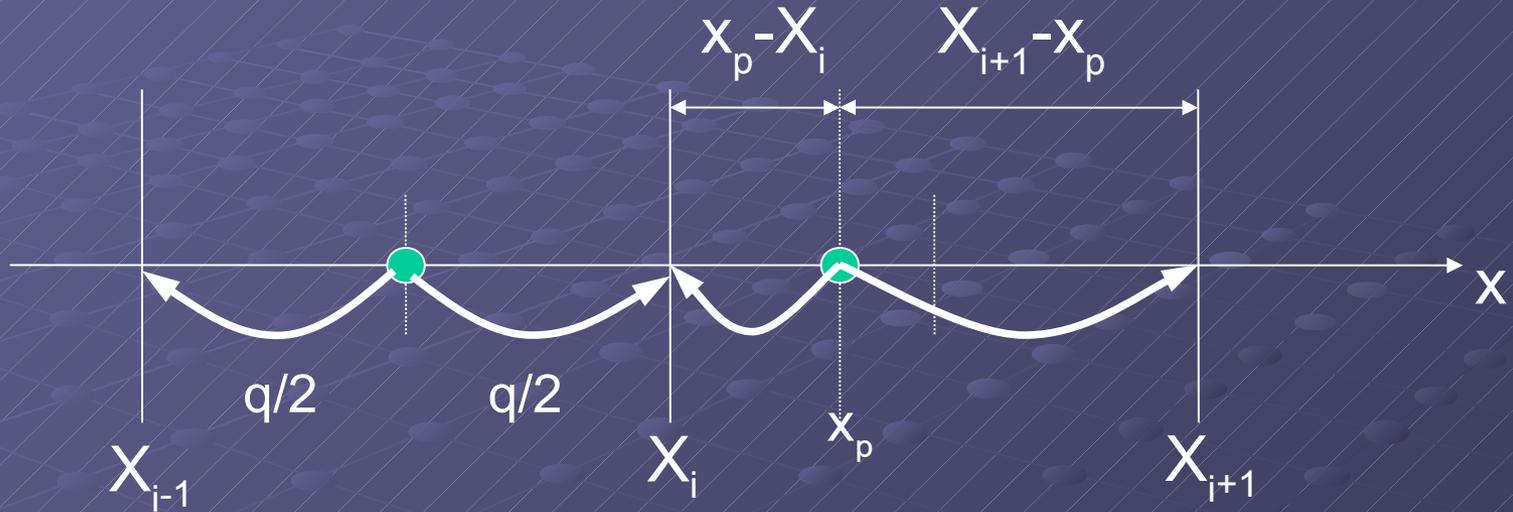
位置の更新

$$\mathbf{x}_p^{t+\Delta t} = \mathbf{x}_p^t + \frac{\mathbf{u}_p^{t+\Delta t/2}}{\gamma^{t+\Delta t/2}} \Delta t$$

Particle-in-Cell法



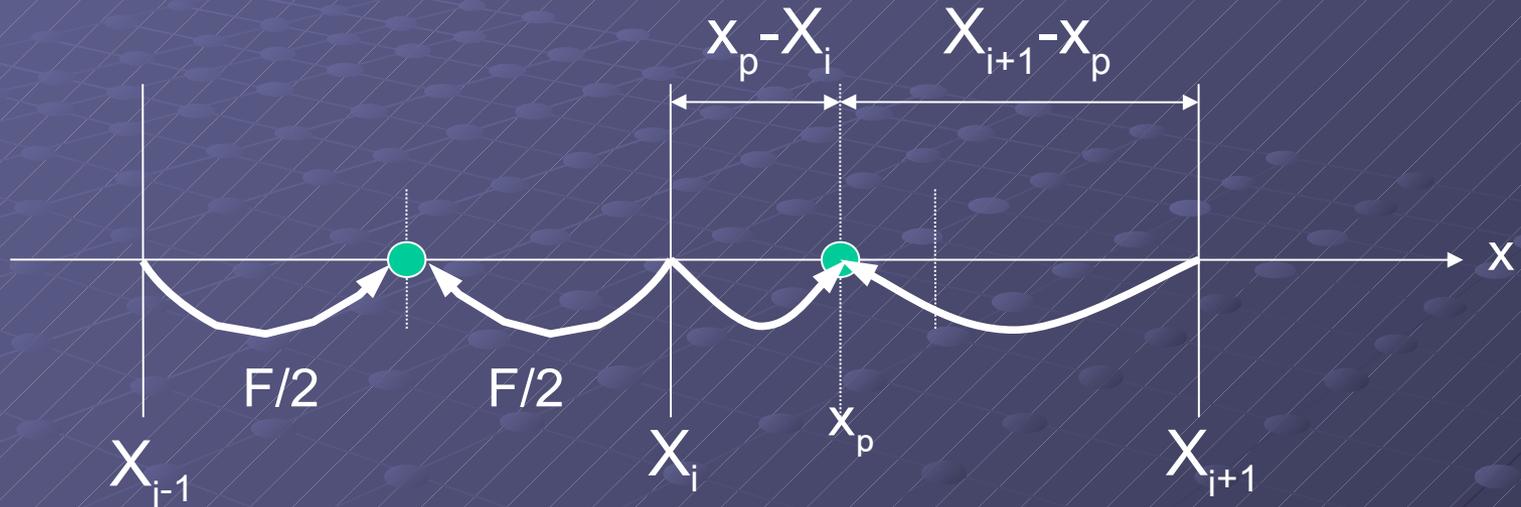
グリッド点に対する粒子の影響度合い



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

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

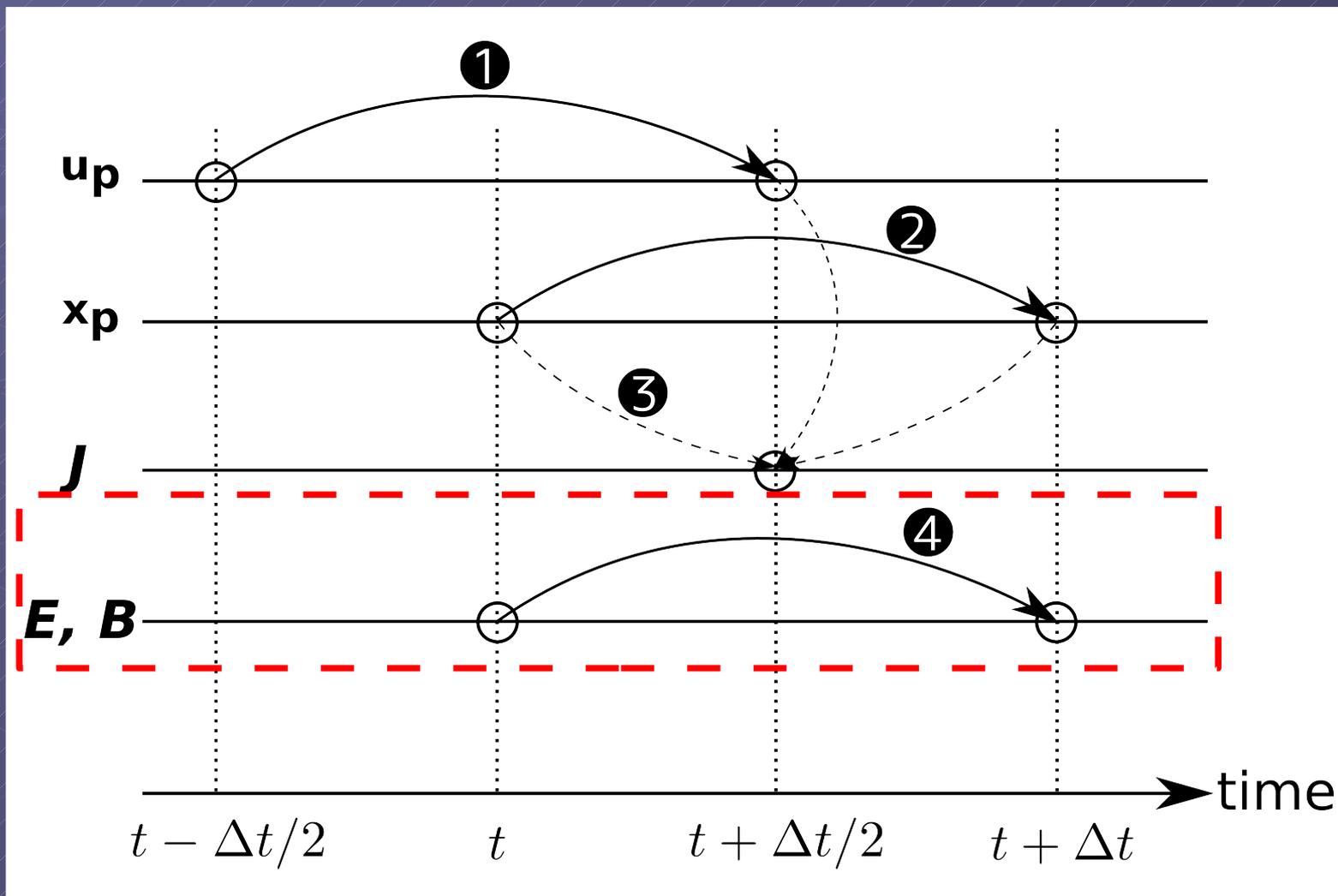
逆もまた然り



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

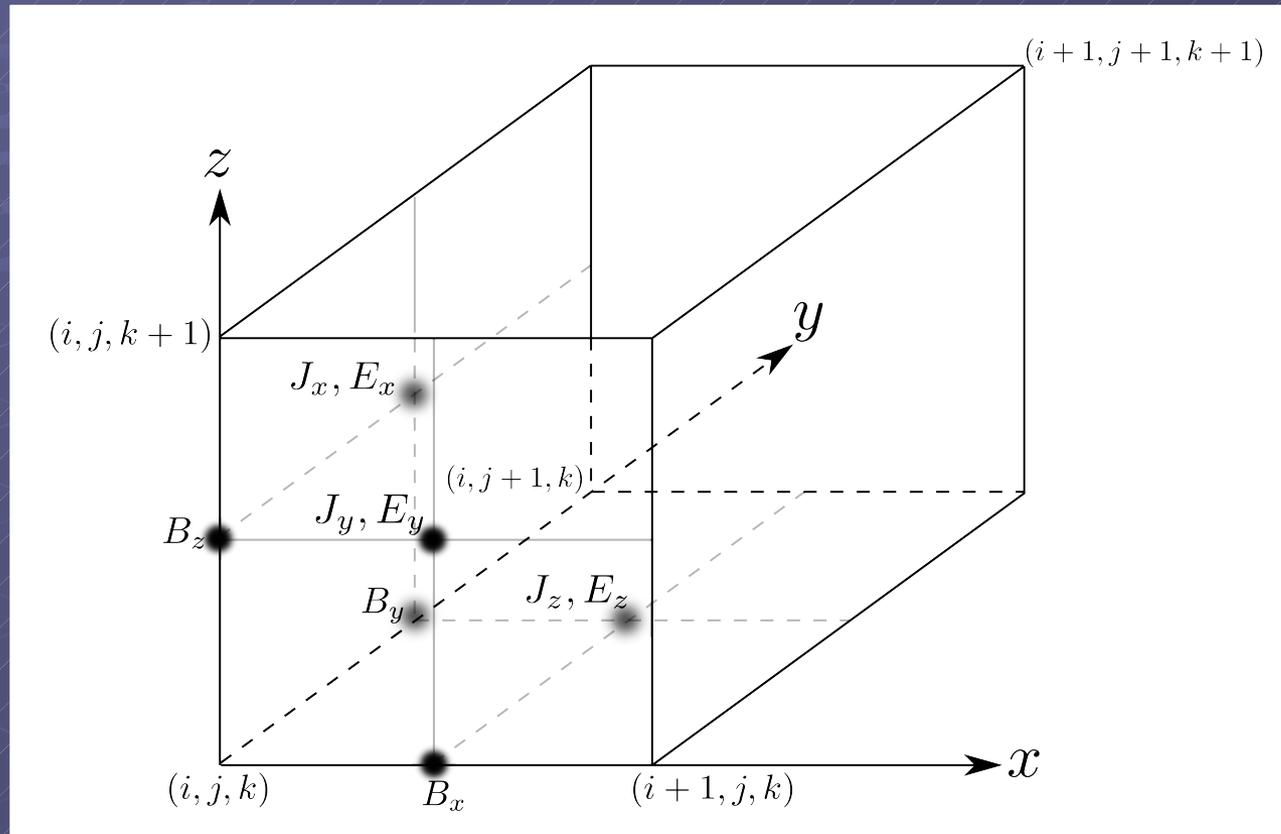
電流計算の時と同じ形状関数

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 ($\text{div}B=0$) を満たす

電磁場の陰的解法

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

$$\frac{E^{t+\Delta t} - E^t}{\Delta t} = c \nabla \times (\theta B^{t+\Delta t} + (1-\theta) B^t) - 4\pi J^{t+\Delta/2}$$

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)
- ▶ $\theta=0.5$ のとき、クランク・ニコルソン法。 $\theta=1.0$ 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

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

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

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

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

既知量



$$A x = b$$

Conjugate gradient method
(共役勾配法)

束縛条件

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

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

$$\underline{\nabla \cdot \mathbf{B} = 0}$$

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

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

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

差分化した $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$

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

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、

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

時間ステップ前後で、差分化したdivBは維持される

電荷保存法

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

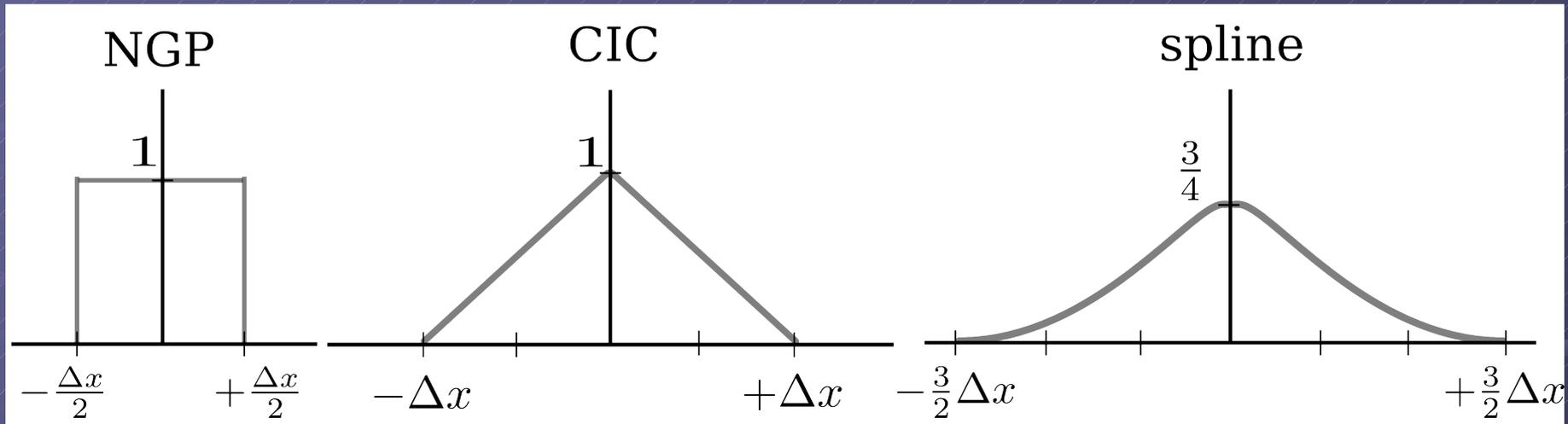
ρ_e と \mathbf{J} を独立にPIC法で計算すると、必ずしも電荷保存則を満たさないため、（静）電場に誤差が生じる。

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

粒子の位置（形状関数）の時間変化からセル境界における電荷流束（ qv ）を求める。

- ▶ Density Decomposition法（Esirkepov, CPC, 2001）の採用
- ▶ 同じアルゴリズムで任意の次数の形状関数に適用可能
- ▶ 分岐処理（if文）がない
- ▶ 精度が良い

様々な形状関数



- ▶ 計算コストが一番低いのはNGP (0次) だが、コストと精度のバランスがとれたCIC (1次) 法が広く使われる。
- ▶ 2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。
- ▶ Density decomposition法を採用したことにより、0 - 2次まで拡張が可能に

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 宇宙の流体现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

世界におけるPICコード

	公開／非公開	フリー／商用	並列化	開発元
TRISTAN-MP	公開	フリー	○	Princeton/USA
OSIRIS	非公開	フリー	○	UCLA/USA
VSim	非公開	商用	○	Tech-X corp./USA
KEMPO	非公開	フリー	○	京都大学
CELESTE3D	公開	フリー	○	LANL/USA
pCANS	公開	フリー	○	千葉大学

pCANSドキュメント

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

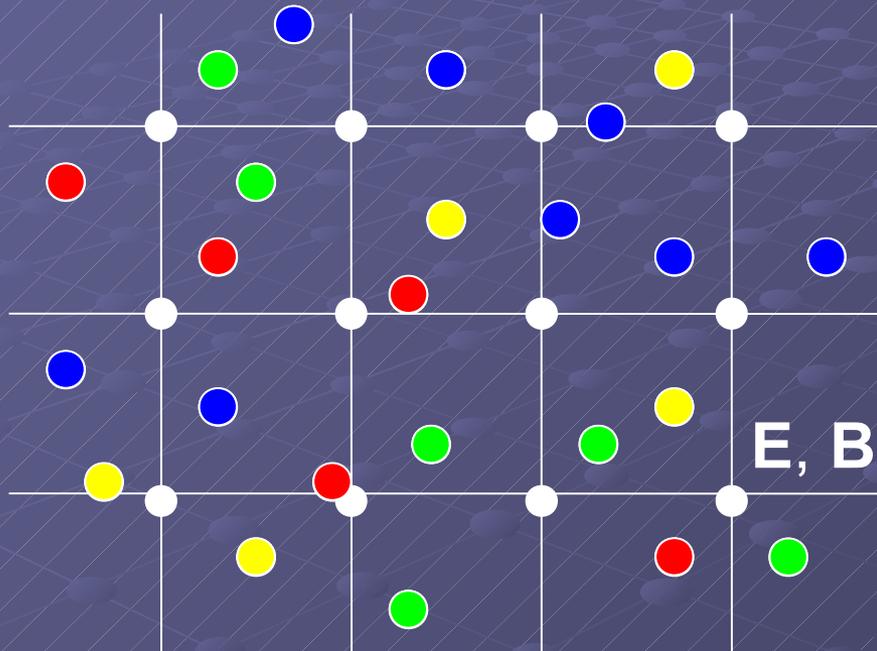
*padユーザーのためには、電子図書形式 (epub)
も配布します (非公式)

開発メンバー

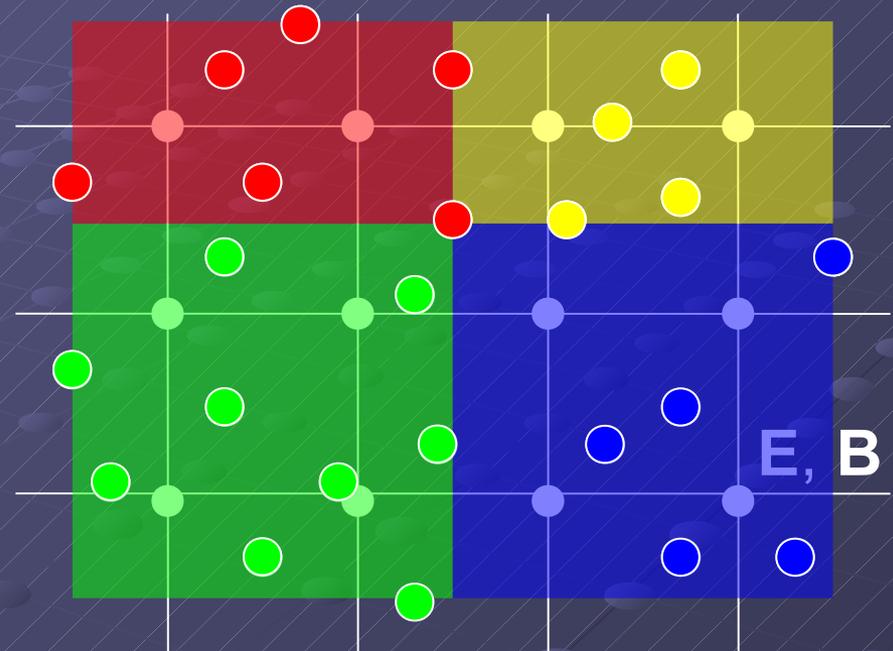
- ▶ 松本洋介（千葉大） - 統括、KH不安定、無衝突衝撃波
- ▶ 天野孝伸（東大） - 情報技術参与、無衝突衝撃波、二流体不安定
- ▶ 加藤恒彦（広島大） - Weibel不安定、無衝突衝撃波
- ▶ 銭谷誠司（NAOJ） - 磁気リコネクション
- ▶ 高橋博之（NAOJ） - 磁気リコネクション
- ▶ 三好由純（名大） - 電子温度異方性不安定
- ▶ 簗島敬（JAMSTEC） - 電子温度異方性不安定、IDL
- ▶ 星野真弘（東大） - アドバイザー
- ▶ 松元亮治（千葉大） - アドバイザー

領域分割によるMPI並列化

粒子分割法



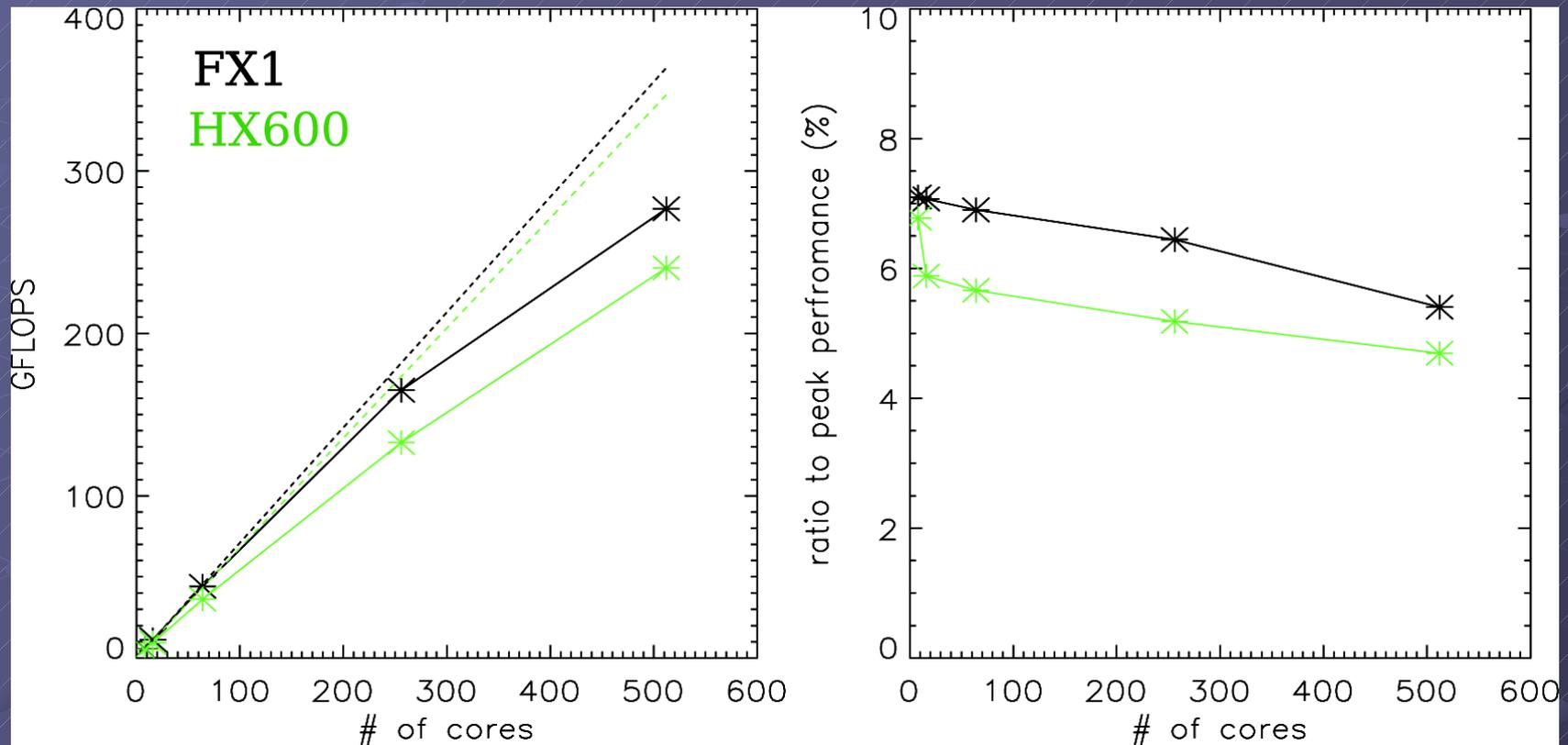
領域分割法



- ▶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

- ▶超並列 (>100) 計算でもスケールアップが良い
- ▶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³⁶

2次元コードの並列化効率 (weak scaling)

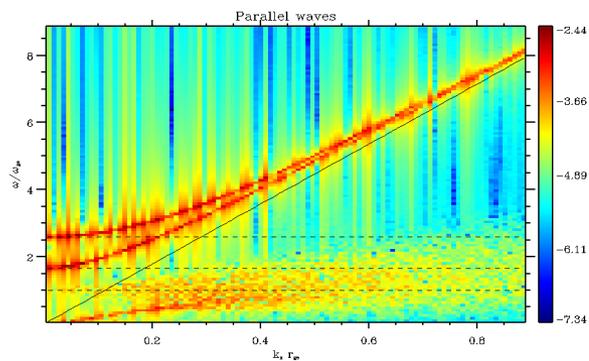


- ▶ 512並列まで、「そこそこ」スケール
- ▶ PCからスパコンまでポータブル
- ▶ 実行効率は5-7%程度

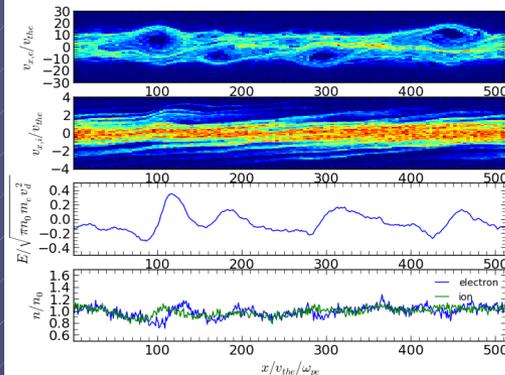
pCANS物理課題

▶ 1 次元課題

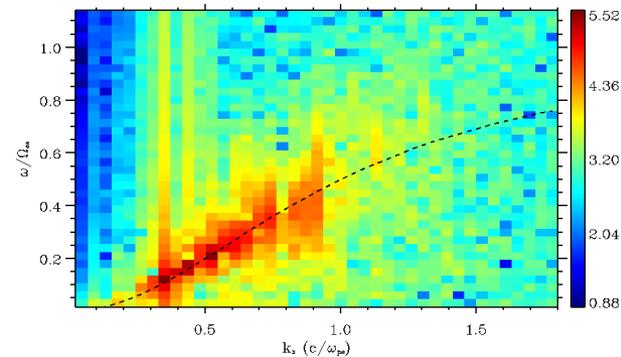
線形波動



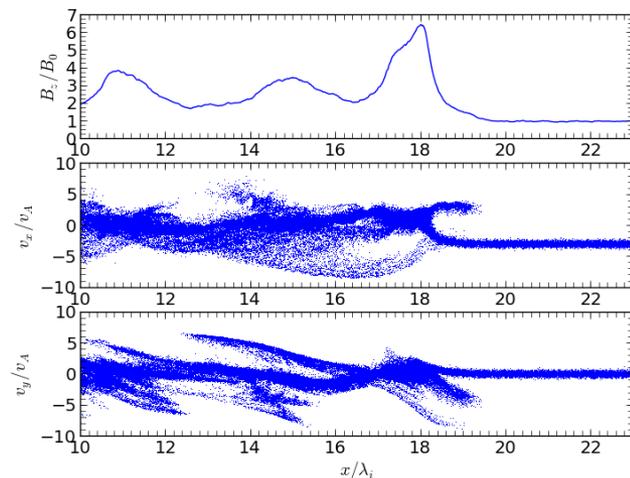
2 流体不安定



温度異方性不安定

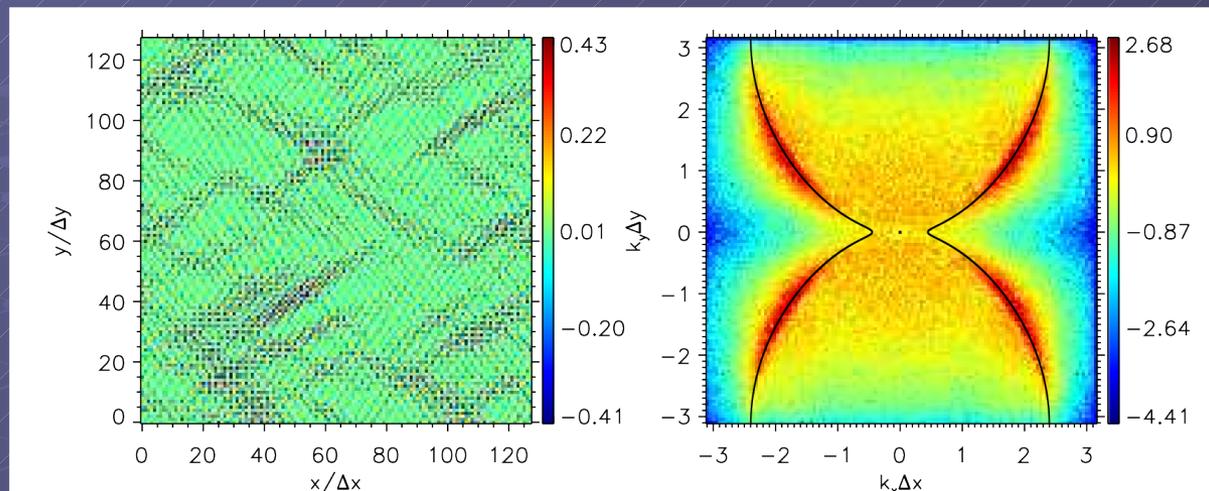


無衝突衝擊波

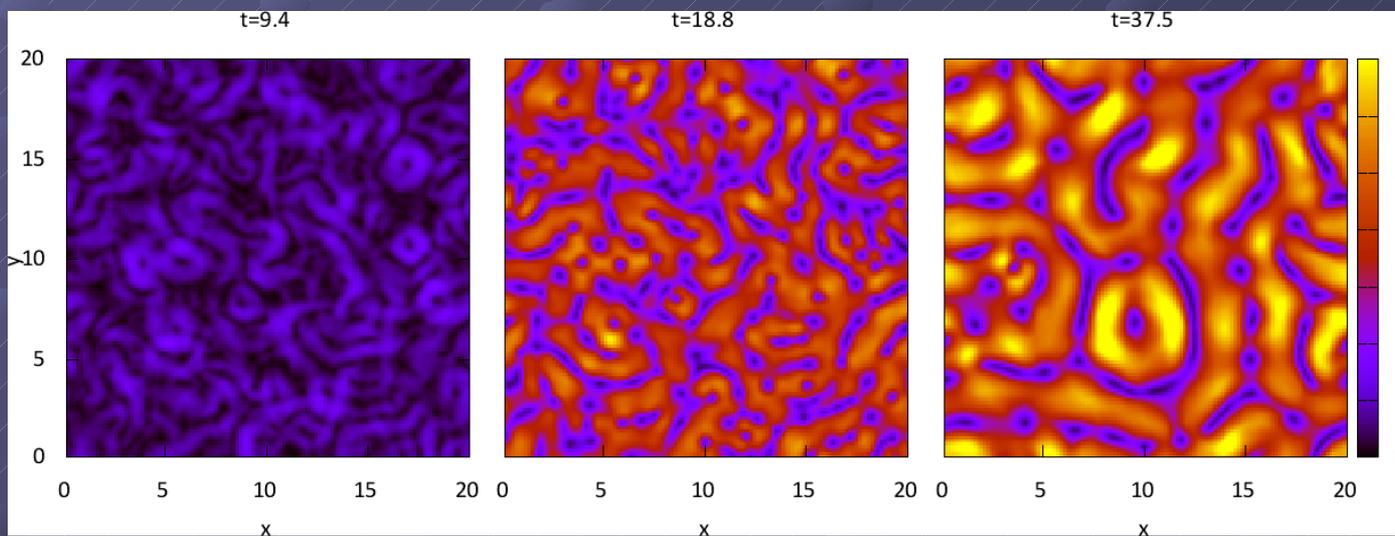


2次元課題

数値チェレンコフ不安定

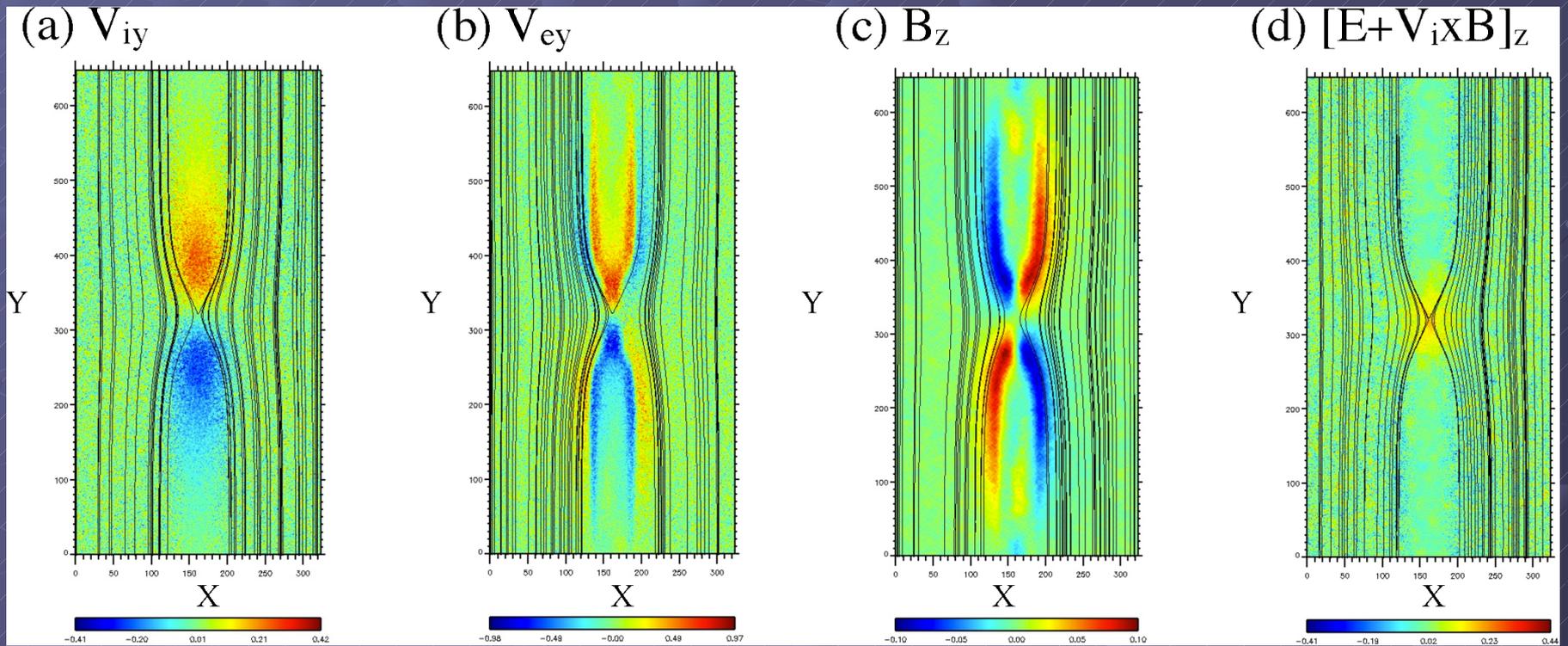


Weibel不安定



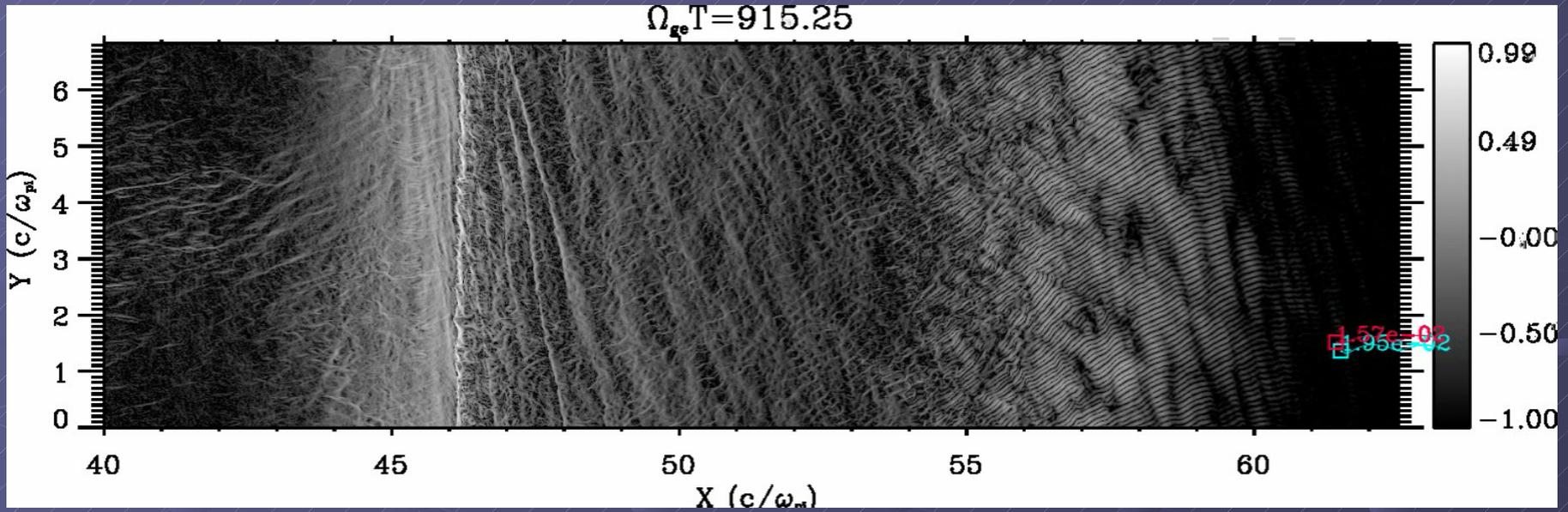
2次元課題

磁気リコネクション



▶ 2次元課題

無衝突衝擊波



KH不安定

