J. Plasma Fusion Res. Vol.85, No.9 (2009) 589-592

小特集 連結階層モデルによって見えてきたプラズマシミュレーションの新たな局面

2．プラズマにおける連結階層シミュレーション

2.3 マルチスケール粒子シミュレーション手法の開発と宇宙機-宇宙プラズマ相互作用への応用

臼井英之[1,3]，沼波政倫[2,3]

[1]神戸大学大学院工学研究科，[2]核融合科学研究所シミュレーション科学研究部，[3]科学技術振興機構 CREST

（原稿受付：2009年6月1日）

本節では，我々が現在開発を進めているマルチスケール粒子シミュレーション手法の紹介を行うとともに，その手法を用いた宇宙機－宇宙プラズマ相互作用解析への展望について概説する．宇宙空間における自然プラズマ環境の解析では一様空間モデルの粒子シミュレーションが行われてきたが，宇宙機 - プラズマ相互作用の解析では，宇宙機そのものやそこからの局所的人工プラズマ噴射など，空間の非一様性およびプラズマ運動論効果を考慮した粒子シミュレーションが必要である．そこで我々は，適合格子細分化法（AMR: Adaptive Mesh Refinement）をオイラー場である電磁場に適応し，そこにラグランジュ的プラズマ粒子を従来の粒子法（PIC: Particle-In-Cell 法）を用いて導入することによるマルチスケール粒子シミュレーション手法の開発を行っている．本稿では，その手法における特徴的な点および並列化に向けた試みについて概説する．

Keywords:

spacecraft-plasma interactions, adaptive mesh refinement (AMR), particle-in-cell (PIC), fully threaded tree (FTT), Morton method, computer simulations

2.3.1 マルチスケール粒子シミュレーション

Particle-In-Cell（PIC）法によるプラズマ粒子シミュレーション[1]では空間格子サイズの上限がデバイ長程度に制限される．一方，衛星などの宇宙機環境では，衛星表面からの光電子放出や二次電子放出によるシース領域形成，スラスターや電気推進器からの高密度人工プラズマ噴射により強い空間非一様性を示す[2]．この宇宙機環境を従来の粒子シミュレーションで再現するためには，その系に存在する最小のデバイ長程度のサイズの空間格子で一様な格子システムを構成する必要があり，衛星から離れた比較的静穏な領域にも不必要に高い解像度を持つ空間格子を設定しなければならない．これは，限られた計算機資源を考えると非常に無駄であり，宇宙機環境を従来法による粒子シミュレーションで扱うことは非常に困難となる．そこで我々は，数値流体分野で用いられる適合格子細分化法（AMR: Adaptive Mesh Refinement 法）を PIC シミュレーションに取り入れ[3]，新たにマルチスケール対応の粒子シミュレーション手法を確立し，それを宇宙機 - プラズマ相互作用の定量解析に応用する発想に至った．AMR 法では，シミュレーション内に生起する現象の空間的特性長を各格子点においてモニタし，最適な空間分解能をもつ格子システムを局所階層的かつ動的に導入する．この手法をオイラー場である電磁場に適用し，ラグランジュ的プラズマ粒子を従来の PIC 法を用いて導入することで，マルチスケール粒子シミュレーションを実現する．本節では，我々が取り組んでいる AMR-PIC コードにおいて最も重要であるデータ構造と並列化における負荷バランス維持法について報告する．

2.3.2 データ構造

AMR 法を PIC 法に実装する上でまず挙げられる困難は格子の定義方法である．通常の PIC 法で行われている空間座標に基づく配列格子システムでは，格子の細分化や粗視化に応じて適切な配列を随時生成・削除することが非常に煩雑になる．そこで，本コードでは Fully Threaded Tree（FTT）構造[4]と呼ばれる階層構造を利用する．FTT 構造では，各格子（セル）に対して，細分化された際[1]に生成される子セル，自身の元となっていた親セル，隣り合う隣接セル等を指示する情報をポインタとして持たせることで階層構造を実現する（**図1**）．これにより，各セルが同階層および上下階層の隣接セルに対して自分の相対的な位置を保持することができるため，動的な格子細分化・粗視化に対して非常に柔軟に対応できる．本コードにおける特徴的な点は，プラズマ粒子の取り扱い，すなわち PIC 法に対して

1　細分化の分割数は本質的には任意であるが，通常は単純に1次元あたり2分割，即ち3次元の場合，8分割とすることが多い．我々の3次元コードも8分割を採用している．

2.3 Development of Multi-Scale Particle Simulation Method and Its Application to the Analysis of Spacecraft-Plasma Interactions

USUI Hideyuki and NUNAMI Masanori　　*authors' e-mail: h-ushi@port.kobe-u.ac.jp, nunami.masanori@nifs.ac.jp*

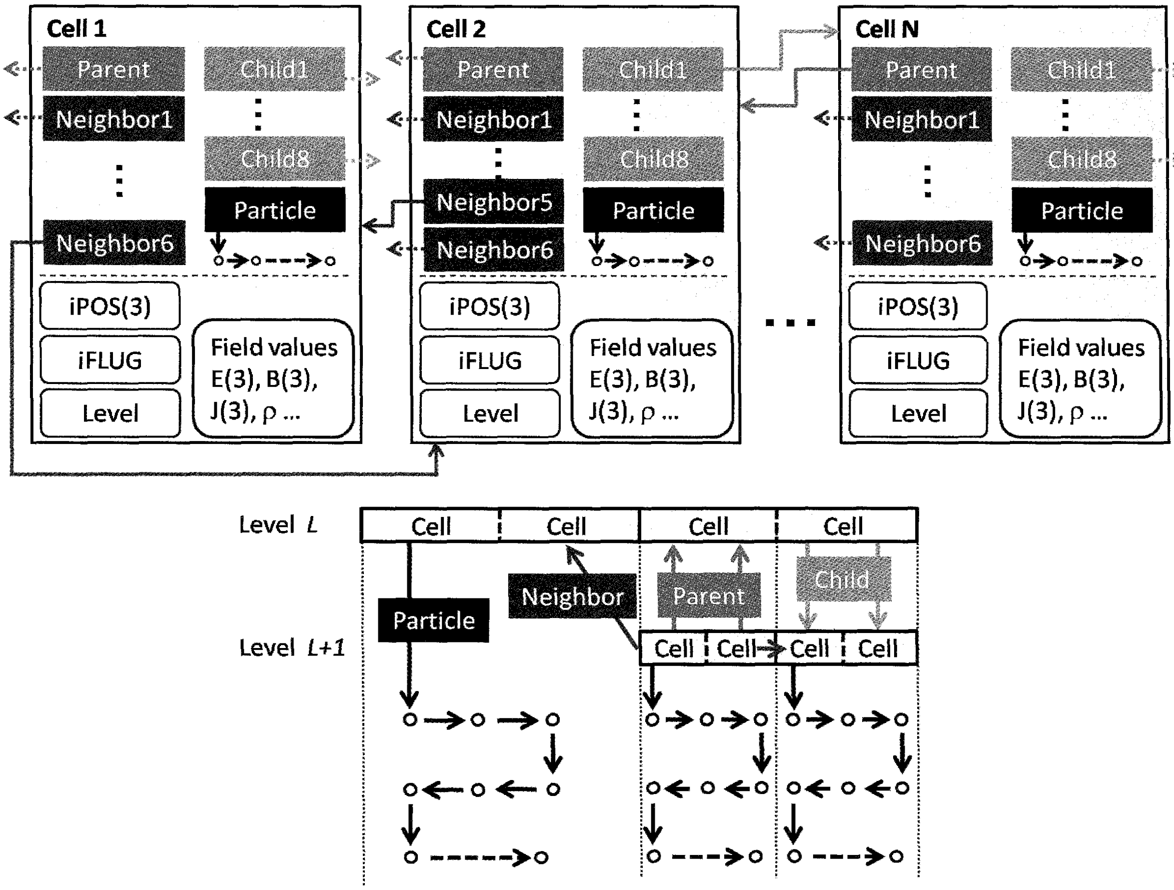

図1　FTT 階層構造における各格子の構造型変数の構成（上）と1次元的に示したポインタ関係（下）．矢印はポインタを表す．上図は，3次元で8分割細分化の場合の例であり，この場合，1格子あたりの隣接格子は6個，細分化格子は8個となる．粒子については，ポインタのリスト構造を用いて各格子に実装する．

もこのFTT法を適応したことである．具体的には，**図1**の下段に示したように，各格子領域に存在する粒子をポインタのリスト構造を用いて数珠つなぎ的に関連させる．格子自体は，これらの情報を各成分として持つ構造型変数で定義する．したがって，電磁場の発展や粒子運動の計算の際に必要な情報は，それぞれのポインタ変数を辿ることですべて揃うため，各格子で完全に閉じた形での実行が可能になる．

2.3.3　並列化

粒子シミュレーションの並列化手法には粒子分割法と領域分割法がある．粒子分割法では，全シミュレーション領域の空間格子およびそこで定義された場の情報をノードごとに共通データとして持つため，メモリ利用の点で冗長であり，計算機資源節約のためにAMR法を導入するという考え方と合わない．そのため，ここでは領域分割法を用いた並列化を考える．よく用いられるのは，局所電荷保存[5,6]を考慮した均一的な空間領域分割法であるが，AMR法で生成された局所階層構造では，各分割領域に存在する格子数のばらつきが大きいため，ノード間の負荷バランスは大きく崩れる可能性がある．そこで本コードでは，数値流体分野で近年よく利用されているMorton順序（再帰的N字型順序）[6]に基づく格子の整列法を採用する．Morton順序とは，例えば簡単のため，$2^p\times 2^p$ の2次元配列を考えると，配列要素(i,j)が，i，jの2進数表現をそれぞれ$i_1i_2\cdots i_p$，$j_1j_2\cdot j_p$（i_n，j_n は0または1）とした場合[2]，新たに定義される2進数

$$l=j_1i_1j_2i_2\cdots j_pi_p$$

を用いて順に並べられる順序のことを言う．この順序則に従うと，**図2**に示した2次元格子の各要素が(i,j)で表されていても，左下の隅から順に領域を隈なく覆い尽くすような順番で各格子はラベル付けすることができる．これを並列プロセッサ数N_{CPU}で分割することにより，近接する格子群をそれぞれグループ化しかつグループ内での格子数をほぼ均等化することができる[3]．言い換えると，生成・消滅を繰り返す階層格子の格子インデックスを随時Morton順序により1次元的なビット列に並び換えて格子ラベルリストを作り，そのリストを元に領域分割を施すことにより各領域間での格子数の均等化を図ることができる（**図2**）．

しかし，実は粒子シミュレーションではこの格子数均等化のみではノード間の負荷バランスを保証することはでき

2　細分化格子用インデックスを確保しておくため，要素インデックスの間隔は，最大細分化レベルが$L_{\max}$，対象とする格子の細分化レベルLの場合，$2^{L_{\max}-L+1}$にしておく必要がある．

3　任意の整数p，q，rに対して$p\times q\times r$の3次元配列の場合でも同様にできる．

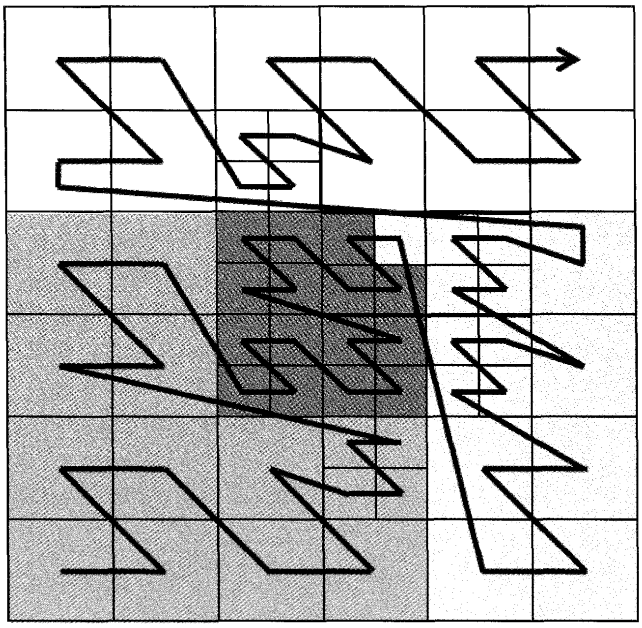

図2　2次元空間での Morton 順序則による領域分割例．細分化格子を持つ階層格子システムにおいて，各格子は Morton 順序に従って折線矢印のように1次元的に並び換えられ，プロセッサ数に応じて格子数が均等になるように領域分割される．図は，プロセッサ数が4の場合の領域分割例を色分けして表している．

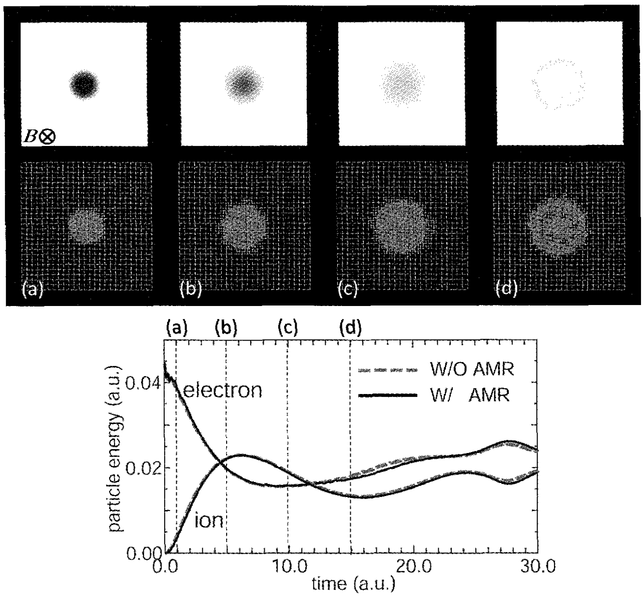

図3　AMR-PIC による細分化レベルが2階層までの適合細分化格子生成を伴った粒子計算例．一様磁場中の球状プラズマ雲の膨張に従って電子密度が変化する中（上段），その変化に応じて細分化格子が生成・消滅を繰り返し（中段），粒子計算が実行されていく．下段は，粒子の運動エネルギーの時間発展についての結果と，AMR を用いない通常の PIC 計算との比較．

ない．一般に，粒子シミュレーションでは粒子運動計算に大半の計算時間を割かれる．AMR 法によって生成される階層格子系では，細分化の際，時間刻み幅も同時に $\Delta t \rightarrow \Delta t/N$ と細分化されるため[4]，細分化の度にその領域における粒子計算コストは N 倍に増大していく．したがって，真に負荷バランスがとれた領域分割を行うには，粒子数と階層レベルから決まる粒子計算ループ数を考慮する必要がある．例えば，1次元あたり2分割の細分化の場合，Morton 順に整列された格子に対して，各 CPU への担当粒子ループ数を

$$\frac{\sum_{\mathrm{cell}} 2^{L} \times N_{\mathrm{particle}}}{N_{\mathrm{CPU}}}$$

に近づくように分割することにより，粒子計算も考慮した並列負荷分散を実現することができる．ここで L は各々の格子の細分化レベル，N_{particle} は各格子に含まれる粒子数である．この方法を我々は「修正 Morton 順序法」と呼んでいる．

2.3.4 計算例

我々が開発しているコードの適用例を簡単に紹介する．**図3**に一様な外部磁場中での球状プラズマの膨張現象に対する AMR 法による3次元粒子シミュレーション例を示す．上段のパネルには，シミュレーション空間の中央断面での粒子密度の時間変化を示している．本シミュレーションでは，適時，各格子点での粒子密度をモニタし，ある閾値以上になると格子の細分化を動的に行う．また密度が閾値以下になると，細分化された格子層を消滅させる．パネル(a)は初期状態を示し，粒子密度が高い中央付近では細分化格子層が形成されていることが中段のパネルよりわかる．時間経過とともにプラズマが膨張すると，粒子密度の高い領域が磁場に垂直方向には放射状に広がるため，パネル(b)，(c)に示したように，細分化格子層の形成領域が拡大する．ある程度膨張すると今度は内部密度が下がり始めるため，パネル(d)に示したように閾値よりも密度が低い領域では細分化格子が一部消滅していることがわかる．このように，閾値以上の密度領域では動的に格子が細分化され，非常に高い解像度を維持しながら粒子計算が実行されていることがわかる．下段のパネルには各粒子種の運動エネルギーの時間変化を示すが，AMR を使わない従来法の結果とほぼ一致しており，定量的にも本開発コードの妥当性が示された．使用格子数においても，例えば**図3**-(c)では，従来法により全空間を細分化格子で構成した場合に対して約 6.8% まで低減することができている．このように AMR 法を用いることにより，局所的な空間解像度を下げることなく，かつ計算機資源の大幅な節約を実現しつつマルチスケール現象の定量解析が可能となる．

2.3.5 問題点と課題

今回採用した AMR-PIC 法では粒子法のみを利用するため，他の連結階層的な手法［e.g. 8, 9］に比べ，他の方程式系（流体系など）との連結を考える必要がないという利点がある．ただし，異なる階層が共存するシミュレーション空間を扱う場合に必ず問題になるのが階層境界の取り扱いである．本コードの階層境界では異なるサイズの格子や時間刻み幅が常に隣り合うため，時間積分の順序や情報のやり

4　1次元あたり N 分割の場合．

取りを慎重に扱わねばならない．特に，粒子の形状因子が階層毎に異なるため，局所電荷保存に基づく領域分割並列化の際，階層境界での取り扱いには工夫が必要である．さらに，実際の動的細分化を行う際の閾値としては，局所的なプラズマ密度（もしくはデバイ長）だけでなく，注目すべき物理によって，電磁場の勾配長など他の空間的特性長を考慮する必要がある．この場合，細分化（粗視化）格子内の粒子数がきわめて少なく（多く）なる可能性があるため，統計性や効率性を確保するために粒子の分割（統合）を考慮する必要が出てくる[5]．この粒子の分割・統合処理の前後で，運動量やエネルギー，分布関数は保存されるべきであるが，特に粒子統合の場合，運動量とエネルギーを同時に保存することは原理的に不可能である．したがって，分布関数からランダムに粒子を再発生させたり，空間的な分割点を僅かにずらすといった工夫も考えられているが，今後の課題である[6]．

2.3.6 まとめ

宇宙航空研究開発機構（JAXA）の情報・計算工学センター（JEDI）においても宇宙機プラズマ環境に関するプラズマ粒子シミュレーション開発および解析が進められており，将来の宇宙ミッションに先立ち，宇宙機とプラズマの相互作用，それによる衛星環境擾乱やプラズマ干渉などの定量データ取得をめざしている．今後，宇宙機の大電力化・高電圧化など，宇宙システムの大型化が進むにつれ，数値シミュレーションによる宇宙機環境解析およびプラズマ干渉評価は益々重要となる．このような背景の中，プラズマ粒子性を損なわずマルチスケールな現象を扱うことができるAMR-PICシミュレーション手法の実用化は待ち望まれている．これを応用することにより，衛星近傍のミクロスケールから太陽風や衛星からの噴射プラズマなどメソ・マクロ的なスケールの現象までを取り込んだ統一的なシミュレーション解析が可能となる．例えば，宇宙機サイズと同程度の1m幅空間格子を一様に用いて100km立方の宇宙空間をモデリングする場合，通常のPIC法で必要とされるメモリ容量は約5～10EB（1EB＝1000PB）に達する．この量は近未来で実現し得るスーパーコンピュータの計算機資源をはるかに超えており，このモデルを用いたPICシミュレーションは実際上，実行不可能である．しかし，本開発コードを用いて，格子サイズが2桁に跨る細分化処理[7]を1次元あたり10%の領域で施されるような系を考える場合，1m幅程度の宇宙機近傍の空間解像度を維持したままで，一様間隔格子システムの場合に比べて概算で約0.1～0.2%のメモリ容量で済むことになり，実容量として10PB程度で計算が可能となる．これは次世代京速機を含めた今後の大規模超並列計算機の範疇に収まる量である．前述した効率的な並列化や階層境界での対処などに加え，衛星モデリングの導入など解決すべき課題は多々残されているが，これらを一つ一つ解決しマルチスケール粒子シミュレーション手法を確立することにより，宇宙プラズマ物理や宇宙工学への貢献が大いに期待できる．

参考文献

[1] J.M. Dawson, Rev. Modern Physics **55**: 403. doi:10.1103/RevModPhys.55.403 (1983).

[2] D. Hastings and H. Garrett, *Spacecraft-Environment Interactions Cambridge* (University Press, Cambridge, U.K., 1996).

[3] K. Fujimoto and S. Machida, J. Comput. Phys **214**, 550 (2006).

[4] A.M. Khokhlov, J. Comput. Phys. **143**, 519 (1998).

[5] J. Villasenor and O. Buneman, Comput. Phys. Commun. **69**, 306 (1992)

[6] T.Zh. Esirkepov, Comput. Phys. Commum. **135**, 144 (2001).

[7] J.E. Barnes and P. Hut, Astrophys. J. Supp. Ser. **70**, 389 (1989); M. S. Warren and J. K. Salmon, in Supercomputing '93.

[8] T. Sugiyama and K. Kusano, J. Comput. Phys **227**, 1340 (2007).

[9] S. Usami, H. Ohtani, R. Horiuchi and M. Den, Commun. Comput. Phys. **4**, 537 (2008).

5 1個の粒子を複数個に分割，もしくは複数個の粒子を少数個に統合することを言っており，2.3.3節で述べた並列化における粒子分割法とは区別する．

6 前節で示した計算例では，粒子分割・統合処理は行っていない．

7 1方向2分割（3次元空間で8分割）の場合，細分化処理7回で2桁に跨る（格子サイズが1/128の）細分化格子を生成できる．