

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

2.4 粗視化投影法による多スケールプラズマシミュレーション

¹⁾核融合科学研究所シミュレーション科学研究部,²⁾総合研究大学院大学物理科学研究科核融合科学専攻 (原稿受付:2009年7月20日)

多スケールプラズマシミュレーションの新しい手法である粗視化投影法について概説する.この方法は、ミ クロモデルのシミュレーションコードを用いて、数値的アルゴリズムによりマクロな時空間スケールのシミュ レーションを行おうとするものである.最近提案された、primal Equation Free Projective Integration (p-EFPI) 法によるプラズマシミュレーションを紹介する.非線形イオン音波の伝播についてミクロシミュレーションと比 較を行った結果、比較的単純な粗視化法を採用したにもかかわらず、有効性を確認できる結果を得た.

Keywords:

multi-scale simulation, equation-free projective integration, plasma simulation, particle-in-cell plasma simulation.

2.4.1 はじめに

近年、大きな時空間スケールにわたって自己無撞着なシ ミュレーションを可能とする試みが様々な分野で行われて きている.スーパーコンピュータの飛躍的進歩により,流 体モデルに代表される系を粗視化して連続体として扱うモ デルによって、地球全体の大気の振る舞いを解明すると いったことも可能となってきた. プラズマ・核融合の分野 においてもトーラスプラズマ全体の時間発展の電磁流体モ デルシミュレーションは既に現実となっている. その際, 輸送係数といったミクロな物理プロセスが関与する物理量 は物理モデルあるいは物理モデルによる係数が現実と異な る場合は「異常」輸送係数を経験的に与えるといった方法 がとられてきた.しかしながら,このような方法をとった 場合既にある実験結果を説明する,あるいは複数の実験結 果から異なる実験条件での結果を内挿することは可能であ るが、全く新しい実験パラメータ領域での系の振る舞いを 定量的に予測するのはきわめて難しい. この限界を乗り越 えようとする試みとして、本小特集の主題である「連結階 層モデル」が登場した[1,2]. このモデルでは、ミクロモデ ルとマクロモデルの間での情報交換を行いつつ時間発展を 解いていくことになる.この方法では通常マクロ領域を十 分に記述できるマクロモデルが必要となる.しかしなが ら、いわゆる"closure"問題のため、一般的な意味で妥当性 を議論することは困難となる.本節で解説する「粗視化投 影法」は適切なマクロモデルが存在しない場合にも適用可 能な方法として Yanis Kevrekidis らによって"Equation Free Projective Integration Method"として提案された[3]. ここで、"Equation Free (E-Free)"というのはマクロの方程 式系を必要としないということを意味しており、原子レベ ルなどの粒子的描像の運動法則のみを適用し,系統的な数 値的手法のみによりマクロ現象を解明するものである.

「粗視化投影法」をプラズマシミュレーションに応用す る試みは最初にメリーランド大学を中心とするグループで 開始された.核融合科学研究所ではメリーランド大学のグ ループと協力してこの研究をスタートさせ,独自の方法の 開発を試みてきた.本節ではその概要について述べる.

2.4.2 "Equation-Free"粗視化投影法

いわゆる"Equation-Free"粗視化投影法(Equation-Free Coarse Grained Projective Integration Methods) という新 しい計算手法が近年提案され、工学などの様々な分野に応 用されている.この方法では、ミクロモデルに基づいた短 い時間のシミュレーションを巧みな数値アルゴリズムによ り長時間スケールの現象に適用している.この方法の特徴 の一つとして、シミュレーションコードとしてミクロモデ ルのコードのみを用いることを挙げられる.マクロ世界と ミクロ世界との遷移がこのアルゴリズムの重要な要素とな る. つまり、ミクロ量からマクロ量を求める"restrict"とい う手続き、逆にマクロ量からミクロ量を求める"lift"という 手続きが重要な要素となる.特に、"lift"においては系の自 由度を増すことになるので、その際の仮定が対象に対して 適切であるかどうかが重要なポイントとなる.一連の手順 を図解したものが図1である.初期条件としてマクロ量を 決めて、その量をもとに"lift"してミクロ量を決定する.こ のミクロ量を初期値として、ミクロモデルに基づいた計算 コードで、ミクロ時間ステップ、ミクロ空間解像度でシ ミュレーションを必要な時間ステップ数進める.その際, その時間ステップごとに"restrict"により、マクロ量を求め

2.4 Equation-Free Coarse Grained Projective Integration Method for Multi-Scale Plasma Simulation ISHIGURO Seiji and SKORIC, Milos M. corre

corresponding author's e-mail: ishiguro.seiji@nifs.ac.jp

Journal of Plasma and Fusion Research Vol.85, No.9 September 2009



図1 粗視化投影法 (Equation-Free Projective Integration Method)の概念.

ておく.このマクロ量を使って、マクロ時間ステップでマ クロ量の時間軸方向の外挿を行う.外挿された量から再 び"lift"によりミクロ量を求め、ミクロ時間ステップのシ ミュレーションを行う.この一連の手続きによりマクロ量 の時間発展を記述する.

この E-Free 法のプラズマシミュレーションへの応用の 試みは,最初に Shay らによって行われた[4].イオンを粒 子,電子を断熱近似した流体とするハイブリッドシミュ レーションをミクロシミュレータとし,イオンの密度,運 動量,圧力をマクロ量として定義してイオン音波の伝播に ついて解析した.しかしながら,非線形性による音波の 突っ立ちが起こった際,本来のミクロシミュレーションと E-Freeの結果に大きな違いが生じた.これを改善するため に,イオンの分布関数情報を wavelet 展開して,その展開 係数の低次項をとってそれをマクロ量とするといった試み [5],さらに,位相空間に対して累積分布関数を求め,これ をマクロ量として用いる試みなどが行われている.

2.4.3 "primal Equation Free Projective Integration" 静電粒子プラズマシミュレーション

ここでは、このE-Free法のプラズマ物理への適用例とし て "primal Equation Free Projective Integration Method (p-EFPI)" を紹介する[6]. この "primal" という言葉は「原 始的」という意味で用いており、初期的な試みという位置 づけである.ここでは、テスト問題として、イオン音波の 伝播を取り上げ、ミクロシミュレーションモデルとしては



図 2 primal Equation Free Projective Integration (p-EFPI) 多ス ケールプラズマシミュレーション法の手順.

電子,イオンともに粒子として取り扱う標準的な静電 particle-in-cell (PIC) コード[7,8]を採用している.

粗視化した物理量として, 全空間での電子の速度分布関 数、プラズマ振動周期で平均した静電ポテンシャルを用い る.図2に全体の手順を示す.最初に、初期パラメータに 従って通常のPICの初期設定の手法に従って個々の電子お よびイオンの速度および座標を求める. ここから、やはり 通常の PIC 法の手順に従い,通常の時間ステップ幅で必要 なステップ数進める.その際、ステップごとに全空間での 速度分布関数を求めておく.これは"restrict"に対応する. 静電ポテンシャル分布は同様に通常のPICの手続きに従っ て求め、プラズマ振動周期で平均し、これをマクロ量とす る. 適当な回数のミクロステップを進行させた後、そこま での時系列データを利用して大きな時間ステップで外挿す る. その際、イオンは単に大きな時間ステップでジャンプ する. その新しい時刻で、イオン密度、時間平均静電ポテ ンシャルからポアッソン方程式に従って電子密度を,外挿 した電子速度分布関数および得られた電子密度分布から "lift"して電子の速度および座標を求める. そこから再びミ クロステップのシミュレーションを行う.

大振幅のイオン音波の伝播について通常の PIC シミュ レーションと"p-EFPI"法の比較をする.時間ステップ幅 は,電子プラズマ振動数を ω_{pe} とすると $\omega_{pe}\Delta t = 0.51$,マク ロ時間ステップ幅 $\omega_{pe}\Delta t_{p}$ はその100倍にとっている.イオ ンと電子の質量比は1800にとっており,このマクロ時間ス テップ幅はイオンプラズマ振動数 ω_{pi} に対しては



図 3 PIC 法 (赤) と p-EFPI 法 (黒) の結果の比較. t = 0.46 での (a) 電子密度分布, (b) イオン密度分布, (c) 電位分布, (d) 静電場, (e) 電子の速度分布, (f) イオンの速度分布 (g) イオンの位相空間分布 (PIC), (h) イオンの位相空間分布 (p-EFPI) (参考文献[6]).

Special Topic Article 2.4 Equation-Free Coarse Grained Projective Integration Method for Multi-Scale Plasma Simulation S. Ishiguro and M.M. Skoric

 $\omega_{\rm ni}\Delta t_{\rm p} = 1.2$ と大きいが、イオン音波の振動数に対しては ωΔtp~0.1以下になっておりイオン音波は十分に再現でき る時間ステップ幅となっている.図3にPICとp-EFPI法に よる結果を示す.t=0.46(時間はイオンプラズマ振動周期 で規格化)の時刻における(a)電子密度,(b)イオン密度, (c)静電ポテンシャル, (d)電場, (e)電子および(f)イオン の分布関数、(g)PIC でのイオンの位相空間分布、(h)p-EFPI でのイオンの位相空間分布を示している. 静電ポテ ンシャルおよび電場に関しては、PICとp-EFPIの分布に食 い違いがみられる.これは PIC データに平均操作を施して いないこと, p-EFPIにおいて電子の速度の再設定を粗視化 された速度分布を利用して長時間ステップごとに行うこと に原因があると考えられる.一方,この時刻においては, イオンおよび電子の密度分布、全域で積分した電子および イオンの分布関数,イオンの位相空間分布に関しては PIC とp-EFPIの結果はほぼ一致している.図4に示した t=0.98においては、イオン密度においてもずれがやや顕 著になっている.図5は、エネルギーの時間発展を示して いる.電子の運動エネルギー,電子およびイオンのドリフ トエネルギーは PIC と p-EFPI でほぼ一致しているのに対 して、イオンの運動エネルギー変化には位相のずれが見ら れる. この例ではマクロ時間ステップの大きさをミクロ時 間ステップの約100倍にとっているが、これを20倍程度に した場合はこのイオン運動エネルギーのずれは小さくなる という結果が得られている.本節で紹介した p-EFPI は電 子の速度分布関数の空間依存性を考慮しないなどの単純化 を行っているにもかかわらず、大振幅イオン音波の伝播に 関して PIC の結果を比較的よく再現しており、粗視化投影 法が有望であることを示しているといえる. p-EFPI法で は、粗視化に際して非常に簡便な方法を用いているが、よ り洗練された方法として、粒子の速度分布の粗視化に際し て空間依存性は保持したまま,累積分布関数を用いると いった方法も試みられている[9,10].また、p-EFPIでは粗 視化の際に空間格子幅に関しては変更を行っていない、し かしながらここで示した例ではマクロ時間ステップあたり のイオン音波伝播距離はミクロモデルの空間グリッド幅を 上回っており, 結果的に数値安定条件 (Courant条件) をお かすことになってしまっている.これを避けるためには, マクロモデルを明示的に用いないE-Free法においても,マ クロ時間ステップに際しては大きな空間グリッド幅を用い る必要があると考えられる.

2.4.4 まとめ

新しい多スケールシミュレーション手法として"Equation Free Projective Integration Method"の基本的考え方お よびそのプラズマシミュレーションへの応用例を紹介し た.読者にとっては、E-Free 法によるシミュレーション が、プラズマで一般的に用いられている流体モデルや、ハ イブリッドモデルに比べてどのような利点があるかという ことは興味深い点であろう.p-EFPIは初期的な試みという



図4 PIC法(赤)とp-EFPI法(黒)の結果の比較. t=0.98 での(a)電子密度分布、(b)イオン密度分布、(c)電位分布、(d)静電場、(e)電子の速度分布、(f)イオンの速度分布 (g)イオンの位相空間分布 (PIC)、(h)イオンの位相空間分布 (p-EFPI) (参考文献[6]).



図5 PIC法(赤)と p-EFPI法(黒)の結果の比較.電場のエネルギー、粒子のエネルギー、全エネルギーの時間発展(参考文献[6]).

位置づけであり,電子の速度分布関数の空間依存性を考慮 しないといった簡便な方法を採用しているため,電子を流 体として取り扱うハイブリッドモデルに対して大きな利点 は見られないかもしれない.しかしながら,より洗練され た粗視化法を導入する[9,10]ことにより,適切な解像度で 速度分布関数情報を取り入れることが可能となりうる.そ ういった手続きを原理的には時間,空間の粗視化レベルを 指定することによって一貫して行える可能性がある.ま た,本節で紹介した例では系全域で,同じ扱いをしている が,将来,領域によって,時空間スケールの解像度を変え るといった拡張も容易に行うことが可能と考えられ,異種 物質と接するなどの境界を有する問題への適用、局所的に 運動論効果が重要な役割を果たす場合への適用など応用面 での広がりが期待される.

謝辞

本節をまとめるにあたり、米国メリーランド大学 Stanchev博士,セルビアNis大学のMaluckov博士,中国 の北京応用物理計算科学研究所の李百文博士の協力,プリ ンストン大学I.G.Kevrekidis教授,Delware大学Shay博士 との有益な議論に感謝いたします.本研究を支援いただい た核融合科学研究所の堀内利得教授に感謝いたします.本 研究は自然科学研究機構「分野間連携による学際的研究拠 点プロジェクト」および核融合科学研究所一般共同研究の 一環として行われました.

参考文献

- [1] 佐藤哲也:日本物理学会誌 58,79 (2003).
- [2] T. Hayashi, R. Horiuchi, K. Watanabe and T. Sato, J. Plasma Fusion Res. **79**, 464 (2003).
- [3] I.G. Kevrekidis, C.W. Gear, J.M. Hyman, P.G. Kevrekidis, O. Runborg and C. Theodoropoulos, Commu. Math. Sci. 1, 718 (2003).
- [4] M. Shay, J. Drake and W. Dorland, J. Comp. Phys. **226**, 571 (2007).
- [5] G. Stanchev, A. Maluckov, M. Shay, J. Drake, W.B. Dorland, S. Ishiguro and M.M. Skoric, 33rd EPS Conference on Plasma Physics, Rome (2006) (http://epsppd.epfl.ch/Roma/pdf/P5 sub size 6 down 10 068.pdf).
- [6] M.M. Skoric, A. Maluckov and S. Ishiguro, Plasma Fusion Res. 3, 021 (2008).
- [7] C.K. Birdsall and A.B. Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation* (Adam Higer, New York 1991)
- [8] S. Ishiguro, J. Plasma Fusion Res. 74, 591 (1998).
- [9] A. Maluckov, M.M. Skoric and S. Ishiguro, Comm. Comp. Phys. 4, 556 (2008).
- [10] Y. Zou, I.G. Kevrekidis and R.G. Ghanem, Ind. Eng. Chem. Res. 45, 1002 (2006).