

VPP800 における大規模プラズマ粒子シミュレーション

宇宙科学研究所
 宇宙科学企画情報解析センター
 篠原 育
 iku@stp.isas.ac.jp

1. はじめに

宇宙空間プラズマの研究では、最近の人工衛星による高精度なプラズマ速度分布関数データ等からプラズマ粒子の運動論的效果の重要性が明らかになってきました。宇宙空間の大規模な構造(例えば、惑星間空間衝撃波や惑星磁気圏、等)を研究するには磁気流体力学(MHD)を使うことが多いのですが、MHDでは記述のできない現象が見えてきたのです。宇宙空間のプラズマは非常に希薄であるために、粒子間の衝突が無視できる無衝突プラズマです。無衝突プラズマ中の散逸過程では、電磁場を介したプラズマ不安定によって生じる等価的な衝突・輸送(粘性、抵抗、熱伝導)が重要な役割を演じます。こうした、無衝突プラズマの散逸過程を理解するには、計算機によるプラズマの粒子シミュレーションが非常に有効なツールになります。しかし、電子・イオンの両方を粒子として取り扱う粒子シミュレーションは計算機に膨大なリソースを要求します。電子・イオン両方の粒子の運動を解く場合、1つの大きな困難は電子とイオンの質量比が非常に大きいことに因っています(陽子と電子では約1836倍)。イオンと電子ではそれぞれ特徴的な時間や空間のスケール(図1、例えば、サイクロトロン周波数やラーマー半径)があり、それらは大きくかけ離れているので、時間的にも空間的にもイオンスケールの計算を粒子ですべてを計算するのは大変なことです。しかし、大きく異なっているからといって、これらのスケールをまったく独立に扱えるわけではなく、「プラズマの大規模運動のダイナミクスは圧倒的に大きなエネルギーを持つイオンが支えているのだけれども、その散逸過程は構造のスケールから見ればずっと小さな電子スケールでのダイナミクスにも依存している。」ので、無衝突プラズマの物理を研究する上でイオンスケールかつ電子を含め

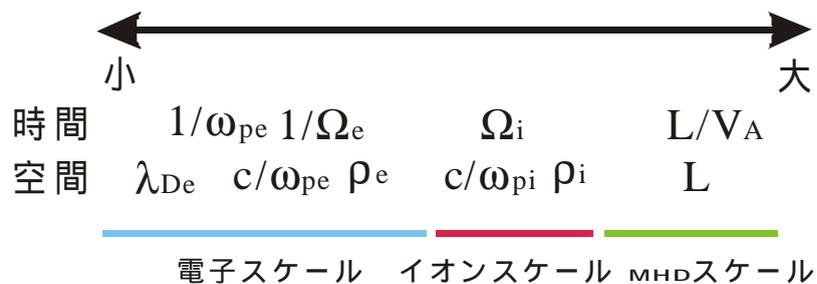


図1: プラズマ中に現れるさまざまなスケール

た粒子計算は是非とも必要なことです。これまでは、電子とイオンの質量比を実際からはずっと小さな値を用いて、イオンスケールの計算を粒子シミュレーションで実行することで研究を進めてきました。しかし、小さい質量比では電子とイオンのスケール分離が不十分なために、電子とイオンのダイナミクスがカップリングを起してしまい、実質量の世界では起りえない不安定などによって現象の理解が妨げられるなど、イオンスケールと電子スケールを結ぶ中間スケールの物理の理解はなかなか進みませんでした。宇宙科学研究所の1世代前のスーパーコンピュータVPP500/7では質量比はせいぜい数10の計算をするのがやっとでしたが、平成11年の3月にVPP800/12が導入されるに至って(残念ながら空間2次元でしかありませんが)、質量比が数100の計算を実行できるようになりました。質量比が数100までとれるようになると、数10の時のような電子とイオンのカップリングは小さくなり、実質量の場合と同じような現象の時間・空間スケールの分離が再現できるようになりました。これによって初めて、実世界における電子スケールとイオンスケールとの中間スケールの物理を粒子シミュレーションで取り扱えるようになったといえるかも知れません。ここでは、宇宙プラズマで重要な磁気リコネクションと呼ばれる現象を例にしながら、粒子シミュレーションの方法の説明、VPP800の性能評価を交えながら、大きな質量比の計算で見えてきた新しい結果を簡単に紹介したいと思います。

2. 磁気リコネクション

微視的な電子スケールの物理から巨視的なMHD的なスケールまでを包括的に取り扱わなければならない現象としては、磁気リコネクションが最もよい例の1つです。磁気リコネクションは、地球磁気圏のサブストーム(オーロラはサブストームの1つの特徴的な現象です。)や太陽コロナでのフレア現象(図2)で重要な役割を果たしていることが知られています。さらに、最近では広く一般の天体現象でも重要な



図2: 太陽フレア(ようこう衛星の観測)

役割を果たしているのではないかと考えられるようになってきました。磁気リコネクションはプラズマ中の反平行な磁場構造に関連した不安定です。反平行な磁場を支えるようにプラズマ中には電流が流れています。同方向に流れる電流には引き合う力が働くので、なんらかの原因でこの電流中に電気抵抗が発生すると、電流はフィラメント化しもともと存在していた反平行磁場が融合し始めます。(図3)こうしてプラズマ中の反平行の磁場構造が磁力線のつなぎ変えで構造変化を起す不安定を磁気リコネクションと呼んでいます。反平行磁場が持っている磁場エネルギーは磁気リコネクションを通してプラズマの運動エネルギー+熱エネルギーへ移動するので、磁気リコネクションは磁場エネルギーをプラズマのエネルギーへ変換するプロセスと考えることができます。こうして、地球磁気圏尾部のように大きな磁場エ

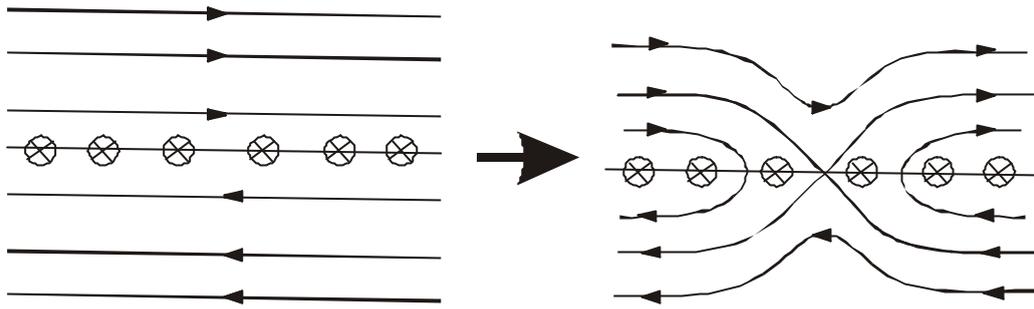


図 3： 磁力線の繋ぎ変え（磁気リコネクション）

エネルギーが蓄積されている場所では、一旦、磁気リコネクションが発生すると高エネルギーのプラズマが生成されることとなります。磁気リコネクションで加速されたプラズマの速度はアルフベン速度に達することが理論的に知られていますが、磁気圏尾部の場合にはプラズマの速度は約 1,000 km/s にも達することになり、実際に人工衛星の観測によりこのような高速のプラズマの流れが観測されています。さて、先に「なんらかの原因でこの電流中に電気抵抗が発生すると...」と述べましたが、電気抵抗はどのように発生するのでしょうか？実はこの電気抵抗の発生機構はまだよくわかっていないプラズマ物理学の大問題です。プラズマは通常「磁力線凍結の原理」にしたがって運動するので、抵抗が発生しない限り磁気リコネクションを発生させることはできません。最初に述べたように無衝突プラズマ中での電気抵抗はプラズマ中の不安定によって励起された波動とプラズマ粒子の相互作用（等価的なイオンと電子の衝突：波動粒子相互作用を通して本来の粒子間衝突による抵抗よりも大きな抵抗になるものを異常抵抗と呼ぶ。）によって生ずると考えられています。磁気リコネクション自体は MHD 的なスケールの現象なのですが、その発生は電子スケールの不安定による波動・粒子相互作用と密接な関係があるわけです。こうして、最終的には電子スケールと MHD 的なスケールを同時に取り扱えなければ磁気リコネクションを完全に理解することはできないので、粒子シミュレーションは非常に重要・有効な道具となるのです。

3. プラズマ粒子シミュレーション

計算結果を紹介する前に、ここで簡単にプラズマ粒子シミュレーションの方法を説明しておきたいと思います。粒子シミュレーションでは実際の粒子数を計算するのはとても無理なので、現実の電子・イオンの 1 個 1 個を扱うのではなく電子またはイオンが多数個集まった超粒子を 1 つの粒子として扱います。粒子の運動方程式を見ればわかるように、超粒子はその（電荷量） / （質量）の値が元の電子・イオンと同じである限りその運動を代表していると考えることができます。超粒子は空間的に広がりを持っており、ちょうど 1 つの粒子は電荷の雲と見ることができます。電磁場などの場の量は空間的に格子を張りその上に定義します。超粒子は電磁場から力を受けて運動をするわけですが、力は離散化された場の量から超粒子の形状に応じた内挿法で求めます。逆に、電磁場の時間・空間発展は Maxwell の方程式を解くことによって計算するのですが、空間上の電荷密度・電流の分布は超粒子の分布から

格子上の各点へ電荷を割り振ることによって求めることになります。このような方法を PIC (particle in cell) 法と呼びます。解くべき方程式は、電子・イオンの運動方程式と Maxwell 方程式だけです。

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\vec{x}_s}{dt} = \vec{v}_s, s = i, e \\ \frac{d\vec{v}_s}{dt} = \frac{q_s}{m_s} \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}_s \times \vec{B}}{c} \right), s = i, e \\ \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -c \nabla \times \vec{E} \\ \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = c \nabla \times \vec{B} - 4\pi \vec{j} \end{array} \right.$$

(Maxwell 方程式の内、 $\nabla \cdot \vec{B} = 0$, $\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi \rho$ の 2 式は初期値として与えれば時間発展中も保存されます。(正確には特に $\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi \rho$ は数値誤差が無視できなくなるので補正が必要となります。))

これらの手順をまとめると次のようになります。 運動方程式を用いて粒子位置を進める。

新しい粒子位置に基づいて電荷密度・電流を空間の各格子点に振り分ける。 Maxwell 方程式によって、電場・磁場を時間発展させる。 計算された電磁場から粒子に働く力を求める。 運動方程式から粒子の速度を更新する。 更新された速度を用いて に戻る。

実際にはスキームの組み方にはいくつかのバリエーションが考えられますが、基本的な考え方は同じです。実際の計算機に載せる場合、もっとも計算時間がかかるのは の粒子の電荷密度・電流の計算です。いろいろな場合によって異なりますが、粒子数が増加すればするほど の比重は大きくなります。今回紹介する計算の場合ではこの部分が全体の約 70% の計算時間を占めます。電磁場に関する計算量は粒子の数に比べれば圧倒的に少ないのでほとんど時間を占めないこととなります。ベクトル型のスーパーコンピュータで の部分を計算する場合は作業配列を用いてベクトル化する方法が確立されており、逐次プロセスで走らせる分には粒子シミュレーションのチューニングは十分になされていると言えるでしょう。さて、私たちは粒子シミュレーションコードを 1 世代前の VPP500/7 の時代から並列化することに取り組んでいます。粒子計算は 1 つ 1 つの粒子の計算自体はまったく独立なので、一見、並列計算に非常に向いているように思えます。実際、後で示すように計算に使用する PE の数と計算時間は非常によい線型性を示します。しかし、分散メモリの計算機環境では電磁場の計算を並列化する場合には大きな問題が生じます。今、MHD 的なスケールまでを取り扱った計算がしたいので電磁場の空間格子数も多くなります。このとき、電磁場の計算時間の増加も無視できなくなるので、電磁場の計算も並列化したくなるわけです。粒子の力を計算する際には、電磁場の値をすべての粒子が参照する必要がありますが、電磁場の値を各メモリに分散させてしまうと電磁場の分割数が多くなればなるほど非常に多くの PE 間通信が発生してしまい計算時間は非常に遅くなってしまいます。現在の私たちのコードではこれを回避するために、重複ローカル配列を用意して、粒子に働く力を計算する直前に各ローカル配列に分散している電磁場の値を SPREAD MOVE で重複ローカル配列に一括転送した上で

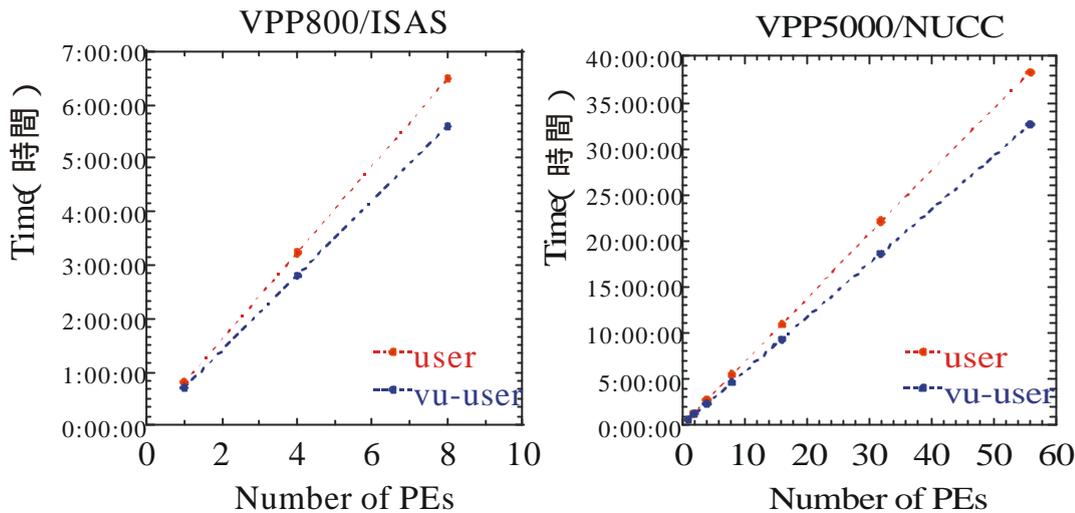


図 4：粒子シミュレーションの実行時間と PE 数の関係 (左) VPP800/12 (右) VPP5000/56

粒子に働く力を計算しています。実は、この方法でも SPREAD MOVE によるデータの転送時間によって電磁場を並列化して得られた高速化の効果がほとんど相殺されて、計算時間という点ではメリットの無い結果となってしまいました。(電磁場に関する変数のほとんどをローカル配列に分割することによって、メモリーを節約できるメリットだけは残りますが...) したがって、この問題は特に 1 PE 当たりのメモリーが少ない計算機環境では非常に苦しい足枷となってしまいます。この点では分散メモリーよりも共有メモリーの方が向いているといえます。

4. VPP800 性能比較

残念ながら 1 世代前の VPP500/7 のベンチマークテストデータが存在しないので、ここでは宇宙研の VPP800/12 及び名古屋大学大型計算機センターの VPP5000/56 の計算結果しか紹介できません。名古屋大学での計算は名古屋大学太陽地球環境研究所の計算機共同利用の課題でベンチマークを取得させていただきました。図 4 に、1 PE 当たりの最大メモリー (7.5 GB) をほぼ全部使えるだけ粒子を詰め込んで計算時間を計測したものを示します。空間 2 次元の計算でグリッド数は 128×5152 個、粒子は各グリッドにイオン・電子それぞれについて平均 65 個を 1 PE あたりに詰め込んでいます。すなわち、全粒子数は $42,864,640 \times (\text{PE 数}) \times 2$ となります。ベンチマークテストはこのグリッド数、粒子数、ファイルへ

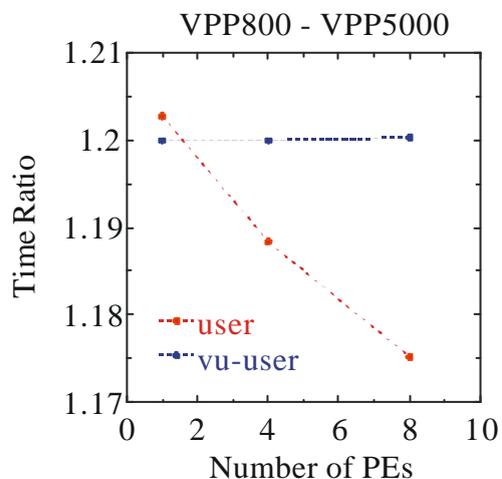


図 5：VPP800 と VPP5000 の実行時間比較

の入出力は無い、条件下で時間を 150 ステップ計算したときにかかった時間を time コマンドで計測しました。宇宙科学研究所の VPP800/12 での計測はジョブクラスの設定から 1, 4, 8 PE の計算結果を、名古屋大学の VPP5000/56 では名古屋大学大型計算機センターのご協力のお陰で、1, 2, 4, 8, 16, 32, 56 PE の計測を行っています。図 4 中の赤線は user 時間を、青線は vu-user 時間を示しています。この計測では空間グリッド数を変化させないで、全粒子数を PE 数に比例させて増加させているので図 4 から明らかなように非常によい線型性を示しています。これは、テストが並列性の高い粒子数のみを増加させたことによっていると思われませんが、ほぼ期待通りの値を出しているといつてよいでしょう。PE 数に応じて空間グリッドの分割数も増えているのですが、結果の線型性がよいところから見て、電磁場データの重複ローカル配列への転送時間は必要以上に大きな負荷にはなっていないようです。図 5 に示すように VPP800 と VPP5000 の計算時間差はほぼ 1.2 倍となり両者の clock 比がそのままです。これらの結果は 1 世代前の VPP500 と使用メモリーの量などの関係で直接比較できませんが、経験的に約 3~4 倍程度の計算時間差があるといえそうです。

5. 計算結果の紹介

最後に最近の私たちの研究成果を簡単に少しだけ紹介させていただきます。先に磁気リコネクションの発生には何らかの（異常）抵抗の発生が必要であり、抵抗はプラズマの不安定を通して励起された波動とプラズマ粒子との波動 - 粒子相互作用によって生じる、と述べました。私たちはこうした磁気リコネクションの発生に必要な異常抵抗の発生プロセスを研究するために粒子シミュレーションを行っています。異常抵抗の原因となる不安定は反平行磁場配位を支える磁力線垂直方向に流れる電流の強度がある程度以上強くなると不安定になると考えられています。太陽フレアや磁気圏尾部を例にとると、観測される反平行磁場構造を支える電流層の厚さはイオンのスケール程度か、より大きな MHD 的なスケールの

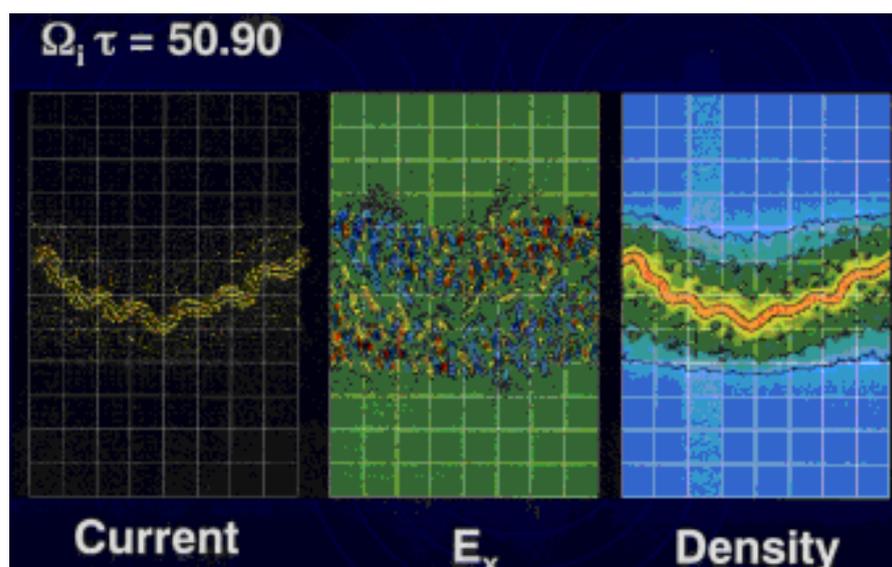


図 7：粒子シミュレーションのスナップショット。左から電流ベクトル、電場、密度

厚さであることがわかっています。このようなスケールの電流層ではサブストームやフレアを説明できるような速さで成長するのに十分な抵抗を供給する不安定は、これまで理論的には見つかっていませんでした。細かい話は専門的すぎるので省略しますが、私たちの計算結果からは、「MHD 的なスケールの不安定と電子スケールの不安定がカップリングすることによって従来考えられていたよりも強い抵抗が電流層中に発生し磁場を大きく拡散する。」ことが発見されました。今回の私たちの計算では電子とイオンの質量比として 400 という大きな値をとっており、そのお陰で電子スケールの不安定と MHD スケールの不安定をはっきりと分離することが可能になりました。その結果、従来確認することのできなかつたような異なるスケール間の不安定の非線型カップリングプロセスを見ることができるようになったのです。(図 7) MHD スケールの不安定が成長し電子スケールとのカップリングが始まると共に系全体の磁場エネルギーが大きく減少していることが図 8 から確認できます。今回は磁気リコネクションが起る面に垂直な面内での 2 次元のシミュレーションを行いました。将来、もっと大きな計算が可能になった時には、今回の計算で発見された磁場散逸過程が実際に磁気リコネクションの種になり得るかどうかが 3 次元の計算で確かめる必要が残っています。

6. おわりに

私たちは 2 次元の大規模プラズマ粒子シミュレーションを大きなイオン - 電子質量比で行い、異なるスケールの不安定の非線型カップリングによる新しい磁場拡散過程を発見しました。今回の発見は VPP500 の時代ではできなかった高質量比の計算が VPP800 や VPP5000 の大きな能力によって初めて実行可能になったことによって得られたものです。大規模粒子シミュレーションは膨大な計算機リソースを要求するのですが、VPP800 や VPP5000 の登場によって、少なくとも 2 次元の計算の範囲内であれば、十分に大きなイオン - 電子質量比で空間的に MHD スケールの

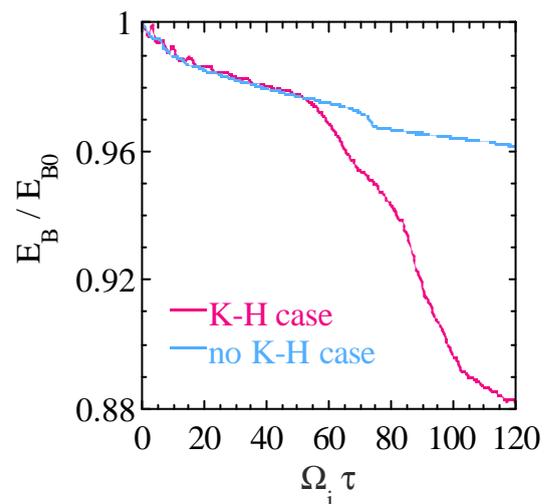


図 8：系全体の磁場エネルギーの時間変化

計算を実行することが可能になりました。これによって、これまでほとんど手がつけられていなかった電子スケールとイオンスケールの中間的なスケールの物理が粒子シミュレーションを通して私たちの研究対象になってきたのです。この点において、ここ 1 年間のスーパーコンピュータの世代交代はプラズマ物理学の粒子シミュレーションにとっては非常に大きな意味を持つことだと思われま。次のターゲットは 3 次元粒子シミュレーションです。これには現在の宇宙研の VPP800/12 の約数 10 ~ 100 倍程度の計算能力が必要だと予想していますが、この能力が次期スーパーコンピュータで到達されることに期待したいと思ひます。