

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 24 年 5 月 21 日現在

機関番号：10101

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2009～2011

課題番号：21560061

研究課題名（和文） 時間積分を行わない多体問題の高速汎用解析コードの開発

研究課題名（英文） Development of a code to analyze multi-body problems without time integration scheme

研究代表者

及川 俊一（OIKAWA Shun-ichi）

北海道大学・大学院工学研究院・准教授

研究者番号：40152029

研究成果の概要（和文）：

高温プラズマ中の荷電粒子など、低密度・高温の粒子系の多体問題の新しい近似解析手法（二体相互作用近似法: Binary Interaction Approximation scheme）を提案した。この二体相互作用近似法コードでは、多体問題を通常の CPU 上での逐次処理および、GPU（Graphics Processing Unit）を用いた並列処理を選択できるようになっている。

研究成果の概要（英文）：

A simulation code for multi-body problems for low-density and high-temperature gases such as fusion plasmas based on the Binary Interaction Approximation has been developed, in which the user can choose whether the code runs entirely on the CPU or mainly on the Graphics Processing Unit (GPU).

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2009 年度	500,000	150,000	650,000
2010 年度	500,000	150,000	650,000
2011 年度	800,000	240,000	1,040,000
2012 年度	0	0	0
2013 年度	0	0	0
総計	1,800,000	540,000	2,340,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎

キーワード：多体問題、時間積分法、汎用コード、二体相互作用近似法(Binary Interaction Approximation: BIA)、GPGPU

1. 研究開始当初の背景

高温プラズマ中の荷電粒子など、低密度・高温の粒子系では、個々の粒子の起動はほとんど直線的（慣性運動）で、比較的弱い粒子間相互作用により起動が曲がる（加速度を受ける）。このような場合でも、強く相互作用する（平均粒子間距離に比べ非常に短い距離

まで接近する）粒子の組が稀に発生する。その頻度は、系の追跡時間が長くなるとともにどうかする。そのような場合、従来の多体問題の解析手法では、数値計算精度を保つために、時間ステップを細かくすることで対応せざるを得ないため、計算時間（CPU 時間）が増加する。粒子数が多くなるとそのような異常近接粒子が増加してゆくことになる。

これまででは、このような問題を解決するために、ある粒子からみて遠くにある粒子群を一個の粒子として取り扱うことで計算量を減らしたり、最も計算時間のかかる他の粒子からの力の計算を専用のハードウェアを用意したりして計算時間の短縮を図っている。

2. 研究の目的

背景で述べたように、粒子数が多くなると多体問題は現実的な計算時間で解析することが事実上困難となってゆく。そこで本研究では、解析的に解けない多体問題を、厳密解の解っている二体問題の重ね合わせとして近似している。本研究ではこの近似による汎用解析コードを開発し、その妥当性を検証することを目的とする。

3. 研究の方法

クーロン力あるいは重力相互作用における二体問題の厳密な粒子軌道は、一般に円錐曲線・双曲線・放物線・楕円)となる。具体的には、当該二粒子の相対系における全エネルギー E の符号により双曲線、放物線、および楕円に分かれる。本近似法の妥当性を検証するため、以下の手順で倍精度 (すべての変数は 8 バイト、すなわち 64 ビット長) 解析コードを開発する。

- (1) 二体の全エネルギー (正・零・負) に対応する厳密解の二次元軌道 (双曲線・放物線・楕円) を二次元極座標系 (r, θ) で用意する。さらにそれぞれの場合の時間と方位角との間の関係 $t = t(\theta)$ を導出する。
- (2) それぞれの厳密解が正しくコーディングされていることを確認するため、二体クーロン問題での運動の恒量である線運動量・角運動量・エネルギーが倍精度計算の限界である有効数字 15 桁で保存されることを確認する。
- (3) 上記の単体試験にパスしたのち、全体コードに組み込み精度の確認を行う。この際に、計算時間の粒子数依存性も合わせて確認する。この段階で、多体問題に対する通常の CPU 上での逐次処理解析コード (言語は Fortran を選択した) が完成する。
- (4) 次にこれらのコードを GPU 上で並列動作させるために NVIDIA 社の CUDA 言語を利用するため、上記 CPU コードをこの言語と親和性の高い C 言語に移植し、動作および精度確認を行う。
- (5) 最後にこれらのコードを(3)の CPU コードからコールされるサブルーチンの形で組み込むことで、GPU による並列解析コードを完成させる。

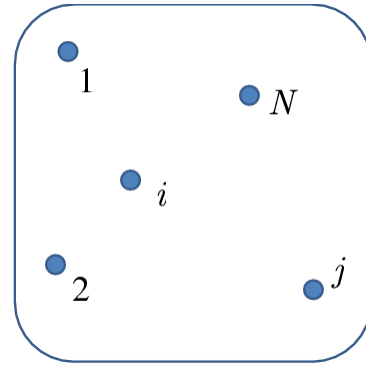


Fig.1 An N -body system.

- (6) 開発したコードをプラズマ物理および天体物理の典型的な問題に適用する。

4. 研究成果

通常のクーロン多体問題の運動方程式は次式で与えられる。

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{Z_i e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j \neq i}^N Z_j \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3} \quad (1)$$

これに対して、二体相互作用近似法では、粒子ペア (i, j) に対して、次式を解く。

$$\mu_{ij} \frac{d\mathbf{g}_{ij}}{dt} = \frac{Z_i Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{r_{ij}^3} \quad (2)$$

ここで $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, $\mathbf{g}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ であり、 μ_{ij} は当該粒子ペアの換算質量を表わす。

二体問題の解析 (厳密) 解は既知であるため、初期時刻から Δt 後の解 $\mathbf{r}_{ij}(\Delta t)$ および $\mathbf{g}_{ij}(\Delta t)$ もまた既知である。二体相互作用近似法ではそれらの既知量から以下の式で解の近似値を求める。

$$m_i \Delta \mathbf{r}_i = m_i \mathbf{v}_i \Delta t + \sum_{j \neq i}^N \mu_{ij} (\Delta \mathbf{r}_{ij} - \mathbf{g}_{ij} \Delta t) \quad (3)$$

$$m_i \Delta \mathbf{v}_i = \sum_{j \neq i}^N \mu_{ij} \Delta \mathbf{g}_{ij} \quad (4)$$

二体相互作用近似法の適用例として図 1 のような多電子体系を考える。ただし、原点を中心に質量無限大のバックグラウンドの正イオンが静止しており、全体として電気的に中性であるとする。この場合のイオンが作る電場および静電ポテンシャル、電子に対する運動方程式は次式となる。

$$\mathbf{E}(r) = \frac{n_0 e r}{3\epsilon_0}, \quad \phi(r) = -\frac{n_0 e r^2}{6\epsilon_0}, \quad (5)$$

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\frac{n_0 e^2}{3\epsilon_0} \mathbf{r}_i + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j \neq i}^N \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3}. \quad (6)$$

この場合、式(3)および式(4)は以下のように変

更される。

$$m_i \Delta \mathbf{r}_i = m_i \Delta \mathbf{r}_{i0} + \sum_{j=1, j \neq i}^N \mu_{ij} (\Delta \mathbf{r}_{ij} - \mathbf{g}_{ij} \Delta t) \quad (8)$$

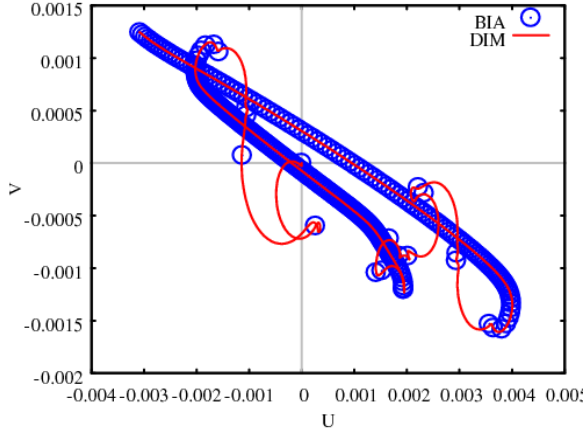


Fig. 2 Two-dimensional electron trajectory in the velocity space for a 122-body system. A red line represents that by using the direct integration method: DIM. Blue circles indicate the trajectory obtained by using the BIA scheme.

$$m_i \Delta \mathbf{v}_i = m_i \Delta \mathbf{g}_{i0} + \sum_{j=1, j \neq i}^N \mu_{ij} \Delta \mathbf{g}_{ij} \quad (9)$$

ここで、式(8)および式(9)の右辺第一項は、いわゆるプラズマ振動による速度変化および位置変化であり、プラズマ振動の角周波数を $\Pi \equiv \sqrt{n_0 e^2 / 3 \epsilon_0 m_e}$ (通常の係数とは若干異なることに注意) として、以下のように表わされる。

$$\Delta \mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i (\cos \Pi \Delta t - 1) + \mathbf{v}_i \frac{\sin \Pi \Delta t}{\Pi},$$

$$\Delta \mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i (\cos \Pi \Delta t - 1) - \mathbf{r}_i \Pi \sin \Pi \Delta t,$$

このような条件で、典型的な核融合プラズマ (温度 $T = 10$ keV、密度 $n = 10^{20}$ #/m³) の電子を時間間隔 $\Delta t = \Delta \ell / g_{th}^{ee}$ 追跡した。ここで、 $\Delta \ell = n_0^{-1/3}$ は平均粒子間距離であり、 $g_{th}^{ee} = \sqrt{2T / \mu_{ee}} = \sqrt{2} v_{th}^e$ は電子間の相対熱速度である。

図2は、ある電子の速度空間における軌道を表わしている。図中の赤線は、この問題を精度保証付きルンゲ・クッタ法である Runge-Kutta-Fehlberg (RKF: 図2の中では、DIM: Direct Integration Method と表記してある) 法を用いた解析結果であり、青丸は、本近似を用いて解析した結果である。なお、RKF

法では、一帯許容誤差を 10^{-16} に設定しており、解析では長さ $\Delta \ell$ と速度 g_{th}^{ee} を用いて無次元化している。図2のように、本近似を用いた解析結果はほぼ16桁近い有効数字を与えるRKFの解析結果の図によく重なっており、十分な解析精度があることが分かる。

この解析でのCPU時間はRKF法で127 sec程度であったのに対し本近似(BIA)法では1.5 sec以下であった。この理由は、RKFでは、所定の精度を保証するために最終時刻までに要したタイムステップが110万タイムステップ以上であったのに対し、BIA法では、僅か256タイムステップで済んでいることが原因である。

ちなみに、BIA法での数値解析結果をフーリエ解析すると、無次元化した時間で560.0に特有のピークが現れたが、これは、プラズマ振動の(無次元)周期

$$T = 2\pi / \Pi = 560.5 \quad (10)$$

であることを確認している。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計12件)

- ① **S. Oikawa**, Kamei, and M. Goto: "Application of the Binary Interaction Approximation to Plasma Oscillation," *to be appeared in Plasma Fusion Res.* **7** (2012). 査読有
- ② **S. Oikawa**, M. Goto, and Kamei: "Accuracy Assurance in Binary Interaction Approximation for N-body Problems," *to be appeared in Plasma Fusion Res.* **7** (2012). 査読有
- ③ **S. Oikawa**, and E. Okubo, P. K. Chan: "Numerical Analysis of Schrödinger Equation for a Magnetized Particle in the Presence of a Field Particle," *to be appeared in Plasma Fusion Res.* **7**, (2012). 査読有
- ④ P. K. Chan, **S. Oikawa**, and E. Okubo: "Numerical Analysis of Quantum-Mechanical Grad-B Drift II," *Plasma Fusion Res.* **7**, 2401034 (2012). 査読有
- ⑤ **S. Oikawa**, T. Oiwa, and T. Shimazaki: "Preliminary Study on Uncertainty-Driven Plasma Diffusion," *Plasma Fusion Res.* **5**, S1050 (2010). 査読有
- ⑥ **S. Oikawa**, T. Shimazaki, and E. Okubo: "Numerical Analysis of Quantum-Mechanical Grad-B Drift," *Plasma Fusion Res.* **6**, 2401058 (2011). 査読有
- ⑦ R. Ueda, Y. Matsumoto, M. Itagaki, and **S. Oikawa**: "Effectiveness of GPGPU for

Magnetohydrodynamics Code using CIP-MOCCT Method,” Plasma Fusion Res. **6**, 2401092 (2011). 査読有

- ⑧ **S. Oikawa** and H. Funasaka: “Binary Interaction Approximation to N-Body Problems,” Plasma Fusion Res. **5**, S1051 (2010). 査読有
- ⑨ **S. Oikawa**, T. Oiwa, and T. Shimazaki: “Quantum Mechanical Plasma Scattering,” Plasma Fusion Res. **5**, S2024 (2010). 査読有
- ⑩ **S. Oikawa**, T. Shimazaki, and T. Oiwa: “Preliminary Study on Uncertainty Driven Plasma Diffusion II,” Plasma Fusion Res. **5**, S2025 (2010). 査読有
- ⑪ **S. Oikawa**, K. Higashi, and Y. Matsumoto: “Application of Algebraic Approximation to Three Dimensional Multibody Coulomb Problem: Implementation of GPGPU,” Plasma Fusion Res. **5**, S2026 (2010). 査読有
- ⑫ **S. Oikawa**, K. Higashi, and H. Funasaka: “Algebraic Analysis Approach for Multibody Problems II,” Plasma Fusion Res. **5**, S1048 (2010). 査読有

[学会発表] (計 13 件)

- ① R. Ueda, Y. Matsumoto, M. Itagaki, and **S. Oikawa**, “Effect of resistivity on mode structure of interchange instability in heliotron plasma,” 21st Int. Toki Conf. (ITC21), Toki, Nov. 28-Dec. 1, P1-81 (2011)
- ② W. Takado, Y. Matsumoto, M. Itagaki, and **S. Oikawa**, “Development of an MHD Code Based on the CIP Method to Consider the Advection with Alfvén Velocity,” 21st Int. Toki Conf. (ITC21), Toki, Nov.28-Dec.1, P1-82 (2011)
- ③ T. Kamei, **S. Oikawa**, and M. Goto, “Application of the Binary Interaction Approximation to Plasma Oscillation,” 21st Int. Toki Conf. (ITC21), Toki, Nov.28-Dec.1, P1-105 (2011).
- ④ M. Goto, **S. Oikawa**, and T. Kamei, “Accuracy Assurance in Binary Interaction Approximation for N-body Problems,” 21st Int. Toki Conf. (ITC21), Toki, Nov.28-Dec.1, P1-106 (2011)
- ⑤ P. K. Chan, **S. Oikawa**, and E. Okubo, “Numerical Analysis of Quantum-Mechanical Drift II,” 21st Int. Toki Conf. (ITC21), Toki, Nov.28-Dec.1, P1-94 (2011)
- ⑥ E. Okubo, **S. Oikawa** and P. K. Chan, “Quantum Mechanical Plasma Scattering II,” 21st Int. Toki Conf. (ITC21), Toki, Nov.28-Dec.1, P1-95 (2011)
- ⑦ **S. Oikawa**, E. Okubo and P. K. Chan, “Exact trajectory of a charged particle in

several non-uniform magnetic fields,” 21st Int. Toki Conf. (ITC21), Toki, Nov.28-Dec.1, P1-104 (2011)

- ⑧ R. Ueda, Y. Matsumoto, M. Itagaki, and **S. Oikawa**, “Effectiveness of GPGPU for Magnetohydrodynamics Code using CIP-MOCCT method,” ITC-20, Toki, Dec. 7-10, P1-8 (2010).
- ⑨ E. Okubo, **S. Oikawa**, and T. Shimazaki, “Numerical Analysis of Quantum-Mechanical Drift,” 20th Int. Toki Conf., Dec. 7-10 (2010) P1-92
- ⑩ T. Shimazaki, **S. Oikawa**, and E. Okubo, “Numerical Analysis of Quantum-Mechanical Drift,” 20th Int. Toki Conf., Dec. 7-10 (2010) P1-93
- ⑪ **S. Oikawa**, T. Oiwa, and T. Shimazaki, “Quantum Mechanical Plasma Scattering,” Proc. ITC-19, Toki, Dec. 8-11, P1-4 (2009).
- ⑫ **S. Oikawa**, K. Higashi, Y. Suto, and Y. Matsumoto, “Application of Algebraic Approximation to Three Dimensional Multibody Coulomb Problems,” Proc. ITC-19, Toki, Dec. 8-11, P1-96 (2009)
- ⑬ **S. Oikawa**, T. Shimazaki, and T. Oiwa, “Preliminary Study on Uncertainty-Driven Plasma Diffusion II,” Proc. ITC-19, Toki, Dec. 8-11, P1-8 (2009).

[図書] (計 0 件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

[その他]

ホームページ等

<http://fusion.qe.eng.hokudai.ac.jp/>

6. 研究組織

(1)研究代表者

及川 俊一 (OIKAWA Shun-ichi)

北海道大学・大学院工学研究院・准教授

研究者番号：40152029

(2)研究分担者

なし

(3)連携研究者

なし

(4)研究協力者

大学院生 7 名