

## 粒子-ブラソフ混成シミュレーションコードの開発

課題責任者

簗島 敬 海洋研究開発機構 付加価値情報創生部門 数理科学・先端技術研究開発センター

著者

簗島 敬\*<sup>1</sup>, 松本 洋介\*<sup>2</sup>

\*<sup>1</sup> 海洋研究開発機構 付加価値情報創生部門 数理科学・先端技術研究開発センター

\*<sup>2</sup> 千葉大学 大学院理学研究院

太陽地球環境で発生する高エネルギー現象を計算する第一原理シミュレーションに対し、軽い粒子はオイラー的に解き、重い粒子はラグランジュ的に解く混成手法を開発している。これにより、熱電子由来の計算ノイズを除去しつつ、高エネルギーイオンの軌道を追跡することが可能になる。本稿ではコードの概要と開発状況、ベンチマークテストとしての線形電磁波動伝播とイオン音波不安定、プロダクトランを旨とした無衝突衝撃波の計算について進捗を報告する。

**キーワード:** 太陽地球環境, Particle-In-Cell シミュレーション, ブラソフシミュレーション, 無衝突衝撃波

### 1. 初めに

太陽から惑星間空間を経て地球磁気圏へと至る宇宙空間は、太陽活動に起因してダイナミックに変動し、その影響は地球環境にまで及ぶ。例えば、太陽大気や惑星間空間で発生する衝撃波や、地球磁気圏における爆発的エネルギー解放現象である磁気嵐では、相対論的エネルギーを持った高エネルギー粒子が生成される。これらは人工衛星の故障や船外活動中の宇宙飛行士の被ばくを引き起こすほか、地球大気に振り込んで窒素酸化物を生成し、触媒反応を介して成層圏のオゾンを破壊するなど、地球気候へ影響を与える。さらに、2020年代には月軌道ゲートウェイの建設が予定され、人類は宇宙における活動領域を飛躍的に広げることになり、その影響はより顕著になる。このような、太陽活動と地球システム・人間活動の因果関係を明らかにするうえで、太陽地球環境で発生する高エネルギー現象を理解することが求められている。

太陽地球環境の巨視的な挙動を記述する磁気流体力学近似では高エネルギー粒子を記述できないため、第一原理方程式であるボルツマン方程式を解く必要がある。ボルツマン方程式は粒子速度分布の情報を保持するため、その数値計算は非常に多くの計算機資源を必要とする。数値計算手法として、ラグランジュ的手法であるParticle-In-Cell (PIC) シミュレーション[1]と、オイラー的手法であるブラソフシミュレーション[2, 3]が挙げられる。多数の粒子を少数の「超粒子」で代表するPICシミュレーションは、優れた計算コストからこれまで多くの実績を挙げている一方で、超粒子を用いたサンプリングに起因する数値ノイズが大きい。速度空間にメッシュを生成して粒子速度分布関数を保持するブラソフシミュレーションは、PICシミュレーション固有の数値ノイズが

発生せず、高精度の計算が期待される一方で、非常に多くの計算機資源を必要とするため、両者は一長一短である。そこで本研究では、両者の長所を生かした新しい第一原理シミュレーション手法である「粒子-ブラソフ混成シミュレーション」を開発し、太陽地球環境の高エネルギー現象である無衝突衝撃波に応用して、高エネルギー粒子加速現象の解明を目指す。

### 2. 計算モデル

解くべき方程式は粒子位相空間分布 $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ に対する無衝突ボルツマン方程式 (ブラソフ方程式) と、電磁場 $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t), \mathbf{B}(\mathbf{x}, t)$ に対するマクスウェル方程式である。ブラソフシミュレーションでは以下のブラソフ方程式を最大6次元になる位相空間上で直接解く。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + (q/m)(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = 0.$$

ここで、 $q, m$ はそれぞれ電荷素量と質量である。一方PICシミュレーションでは、ブラソフ方程式と等価な以下のニュートンの運動方程式を個々の超粒子に対して解く。

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}, \quad \frac{d\mathbf{v}}{dt} = (q/m)(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}).$$

そして、計算セル内で足し合わせることで速度分布関数を構築する。現在の典型的なPICシミュレーションはセル当たりの粒子数が100個程度であり、 $O(100^{-0.5})$ の数値ノイズが生じる。これは特に、粒子の熱速度が平均速度より速い場合に顕著になる。一方ブラソフシミュレーションでは、速度空間分布を連続体として保持するので数値ノイズは発生しないが、速度空間を有限で打ち切るため、平均速度が熱速度に比べて非常に速い粒子分布を扱うためには速度空間を広く設定する必要があり、膨大な計算機資源を要する。一般に、質量の重い粒子ほど平均速度が速く、軽い粒子ほど熱速度が速い。そこで本研究では、宇宙空間プラズマの主構成要素である電子とイオンをそ

それぞれブラソフシミュレーションと PIC シミュレーションで解く新しい手法を開発する。これにより、電子の熱運動に起因する数値ノイズを除去しつつ、速度の速いイオンの軌道を追跡することが出来る。この手法は例えば、無衝突衝撃波におけるイオン加速といった現象に対して有用な手法になると期待できる。ラグランジュ的手法とオイラー的手法の混合手法は重力多体系シミュレーションで実績があるが[4]、プラズマに対しては初めての試みである。

数値計算手法については以下のとおりである。ブラソフシミュレーションについては、方程式を実空間移流パートと速度空間移流パートに分離し、高精度保存型セミラグランジュ法[5]を用いる。PIC シミュレーションについては、電磁プラズマ粒子シミュレーションコード pCANS[6]に準拠した手法を用いる。並列化については、MPI 関数を用いて実空間のみを並列化する領域分割法を用いる。ブラソフシミュレーションはC++言語、PICシミュレーションの一部は Fortran 言語で開発されているため、ES ユーザーサポートで配布されている「SX-Aurora TSUBASA C/C++コンパイラ ユーザーズガイド」を参考に多言語プログラミングを行った。

### 3. 数値計算結果

シミュレーションコードの性能検証のため、まずは線形電磁波動伝播のテストを行った。図 1 は磁場に平行に伝播する波動の分散関係を示している。左から、PICシミュレーション、ブラソフシミュレーション、及び本研究で開発した PIC-ブラソフ混成シミュレーションで得られた結果である。上段では、Rモード、Lモード、ホイッスラーモードが見られ、線形理論(破線)とよく一致していることが分かる。PICシミュレーションでは、ホイッスラーモードの高波数側に電子の熱運動由来の数値ノイズが広く分布しているが、ブラソフシミュレーションおよび混成シミュレーションではこれらが除去されていることがわかる。下段は、低波数・低周波数帯の拡大図である。PICシミュレーションおよび混成シミュレーションでは、イオンサイクロトロンモード(下の破線)の高波数側にイオンの熱運動由来の数値ノイズが分布している。

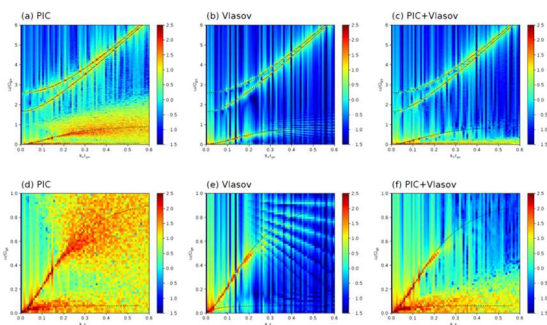


図 1: 線形電磁波動の分散関係。横軸は波数、縦軸は周波数、カラーはフーリエ強度を示す。

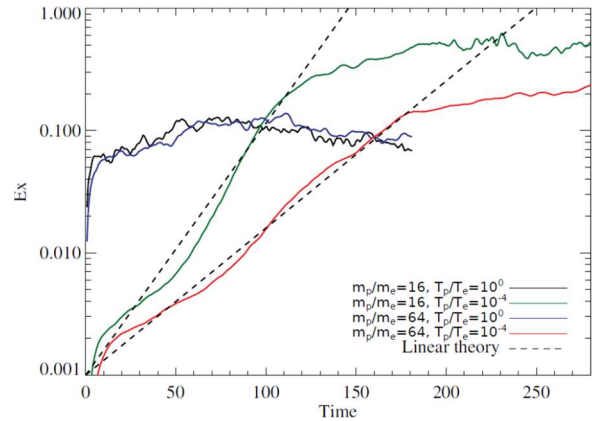


図 2: イオン音波不安定性における電場強度の時間発展。

次に非線形問題として、イオン音波不安定性のテストを行った。これは、電子とイオンが相対速度を持ち、イオン温度が電子温度に対して十分冷たい場合に成長する不安定性である。熱速度が遅いイオンを扱うので、従来のブラソフシミュレーションでは取り扱いが難しい。図 2 はイオンと電子の質量比が 16 と 64、温度比が 1 と  $10^{-4}$  の場合について、電場強度の時間発展を示している。温度比が  $10^{-4}$  の場合(緑、赤)は電場が成長し、その成長率は線形理論(破線)とよく一致している。図 3 は飽和時における電子及びイオンの位相空間分布を示している。上段の破線はイオン音波の位相速度である。電子がイオン音波と共鳴し、ホール構造を形成している様子が見て取れる。下段では、イオン分布が成長した電場によって速度方向に大きく振動している。この図から明らかなように、イオンの最大速度( $\sim 0.0008$ )は熱速度( $< \sim 0.0001$ )より遙かに速いため、オイラー的手法で取り扱うことは非常に難

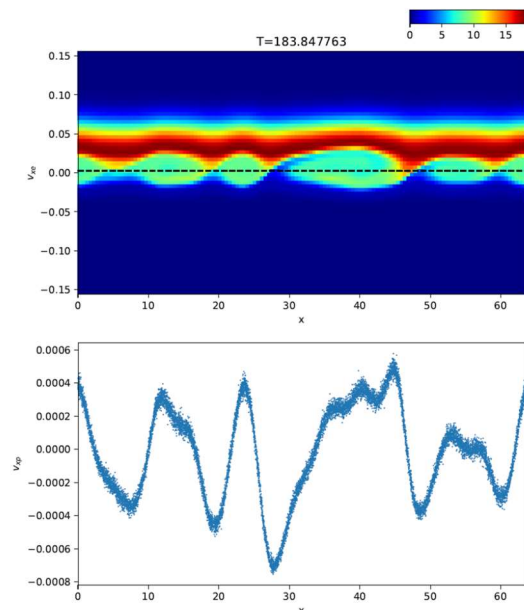


図 3: イオン音波不安定性における位相空間分布。横軸は空間、縦軸は速度。上段が電子、下段がイオンである。

しい。

以上の結果を経て、シミュレーションコードの応用として、太陽地球環境における高エネルギー粒子加速現場と考えられている無衝突衝撃波を模擬した 1 次元衝撃波計算のセットアップを行った。この問題では、一方の境界から粒子を注入し続け（注入境界条件）、他方の境界で反射することで衝撃波を生成する。実験したところ、長時間計算すると注入境界で静電場が非物理的に成長してしまう不具合が発生した。注入境界の取り扱いがブラソフシミュレーションと PIC シミュレーションでは異なるため、本来一致すべき注入粒子数が一致しないことが原因と考えられた。そこで、ブラソフシミュレーションで扱う電子の注入量を PIC シミュレーションで扱うイオンの注入量と出来るだけ等しくするための処方（境界値の修正、精度を 1 次に落とす）を施したところ、改善が見られた。

無衝突衝撃波では衝撃波面と背景磁場の成す角およびマッハ数が重要なパラメータである。本稿では、衝撃波面法線ベクトルと磁場が平行な衝撃波について実験を行った。図 4 に粒子分布及び静電場のスナップショットを示す。粒子は右側境界 ( $x = 49152$ ) より注入され、左側境界 ( $x = 0$ ) で反射される。分布関数の形状から、 $x = 10000$  付近が衝撃波面と推定される。平行衝撃波では、衝撃波面に突入した粒子の一部は下流に流されて熱化することなく、上流に反射される。その結果、衝撃波上流（フォアショック領域）にも複雑な構造が見られる。衝撃波面で反射された粒子は  $x = 20000$  付近で元々の注入粒子と相互作用し、弱い衝撃波を形成している。イオンの一部はさらに上流 ( $x = 20000 - 30000$ ) にまで到達し、この成分が不安定を介して静電場を励起している。このようなフォアショック領域は地球磁気圏前面に形成され

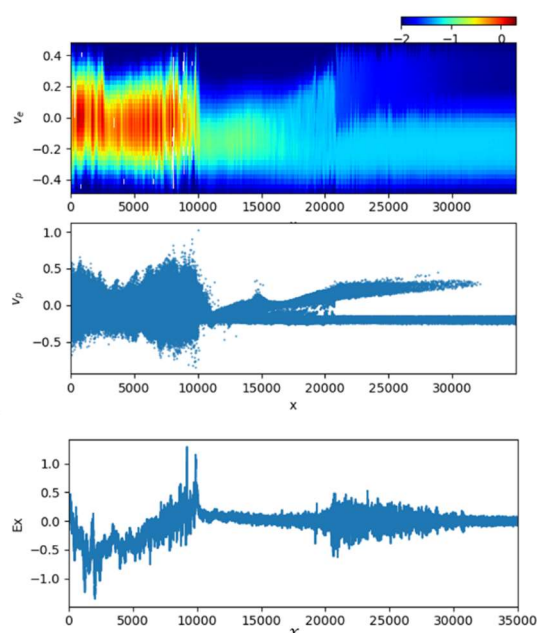


図 4: 平行衝撃波の空間分布。上から、電子位相空間分布、イオン位相空間分布、及び静電場を示す。

る定在衝撃波に付随していることが知られている。

#### 4. まとめと今後

太陽地球環境で発生する高エネルギー現象は、人工衛星の故障、宇宙飛行士の被ばく、地球大気変動などをもたらす、人類社会にも影響を及ぼしうる。本研究では、熱い粒子である電子はオイラー的手法で、冷たい粒子であるイオンはラグランジュ手法で解く新しい第一原理シミュレーションを開発している。2021 年度は 1 次元コードの開発を行った。コードの並列化及び多言語プログラミングについては首尾よく進んだが、衝撃波の注入境界条件における不具合は完全には解決しなかった。完全解決に向けて、様々なパラメータで実験を行い、発生しやすい条件を特定する必要がある。

線形電磁波動伝播やイオン音波不安定のベンチマークテストを用いて、新しい手法の性能を検証し、良好な結果を得た。期待通り、PIC シミュレーションと比較して、電子由来の数値ノイズを除去することが出来た。ブラソフシミュレーションと比較すると、イオン起源の数値ノイズは残ったままだが、新しい手法はブラソフシミュレーションでは取り扱いが難しい冷たく速いイオンを扱うことが出来るので、用途に応じて使い分けることになるだろう。

新しい手法を無衝突衝撃波に応用し、平行衝撃波のフォアショック領域における複雑な構造を紹介した。本年度はプロダクトランに十分な時間を割けなかったので、衝撃波のパラメータ調査は来年度以降に取り組むつもりである。

ブラソフシミュレーションは最大 6 次元の位相空間を扱うため、プログラミング中に多重ループが発生し、各ループ長が短くなる傾向がある。現在用いているコードの最内ループ長は 32 程度のため、ベクトルエンジンの性能を十分活かすことが出来なかった。対応策として、ES ユーザーサポートで配布されている「高度なチューニング手法」の loop pushing を検討しているが、コードの大幅な書き換えが必要になるため、来年度以降の課題である。

#### 謝辞

本研究は、JSPS 科研費 JP20K04056 の助成を受けて実施されました。本研究で用いているシミュレーションコードの一部は pCANS（千葉大学）で開発されました。

#### 文献

- [1] C. K. Birdsall and A. B. Langdon, “Plasma Physics via Computer Simulation” (Inst. of Phys. Publishing, Bristol/Philadelphia, 1991).
- [2] C. Z. Cheng and G. Knorr, “The integration of the Vlasov equation in configuration space”, *Journal of Computational Physics* 22, 330-351 (1976).
- [3] T. Minoshima, Y. Matsumoto, and T. Amano, “A finite volume formulation of the multi-moment advection scheme for Vlasov simulations of

magnetized plasma”, *Computer Physics Communications* 187, 137–151 (2015).

[4] K. Yoshikawa, S. Tanaka, N. Yoshida, and S. Saito, “Cosmological Vlasov-Poisson Simulations of Structure Formation with Relic Neutrinos: Nonlinear Clustering and the Neutrino Mass”, *Astrophysical Journal* 904, 159 (2020).

[5] S. Tanaka, K. Yoshikawa, T. Minoshima, and N. Yoshida, “Multidimensional Vlasov-Poisson Simulations with High-order Monotonicity- and Positivity-preserving Schemes”, *Astrophysical Journal* 849, 76 (2017).

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

# Development of Hybridized PIC-Vlasov Simulation Code

Project Representative

Takashi Minoshima Center for Mathematical Science and Advanced Technology,  
Research Institute for Value-Added-Information Generation, Japan Agency for Marine-Earth  
Science and Technology

Authors

Takashi Minoshima\*<sup>1</sup>, Yosuke Matsumoto\*<sup>2</sup>

\*<sup>1</sup>Center for Mathematical Science and Advanced Technology, Research Institute for Value-Added-Information Generation,  
Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology,

\*<sup>2</sup>Department of Physics, Chiba University

To study high energy phenomena (e.g., particle acceleration at collisionless shocks) occurring in the solar-terrestrial environment, we develop a new first-principles simulation code, which is a hybridization of the Lagrangian and the Eulerian simulation methods. This paper reports brief description of the code and some benchmark tests to measure its performance.

**Keywords : Solar-terrestrial environment, PIC simulation, Vlasov simulation, collisionless shock**

## 1. Introduction

The solar-terrestrial environment is rich in energetic phenomena such as solar flares, coronal mass ejections and associated shocks, magnetic storms in the Earth magnetosphere. High energy particles are frequently generated associated with these phenomena, and they could cause the failure of artificial satellites, the exposure of astronauts, and the change of the Earth climate. To study high energy phenomena occurring in the solar terrestrial environment, we develop a new first-principles simulation code. The code is a hybridization of the Particle-In-Cell (PIC) simulation method [1], which is a well-developed Lagrangian method for kinetic plasmas, and the Eulerian Vlasov simulation method [2,3], to enjoy their advantages. The goal of this study is to complete this code and apply it to collisionless shocks to understand the particle acceleration mechanism at the shock.

## 2. Model

The governing equations are the collisionless Boltzmann (Vlasov) equation for the phase space distribution function of particles  $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ , and the Maxwell equations for the electromagnetic fields  $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$ ,  $\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)$ . The Vlasov simulation directly discretizes the following Vlasov equation on grid points in phase space,

$$\partial f / \partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + (q/m)(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{v}} f = 0,$$

where  $q, m$  are the elementary charge and the mass. The PIC simulation solves the following Newton equations for individual “super-particles”,

$$dx/dt = v, dv/dt = (q/m)(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}).$$

The velocity distribution function is reconstructed by summing up the particles in a computational cell. Currently, typical PIC simulations use  $\sim 100$  particles per one cell, causing  $O(100^{-0.5})$

statistical noise on simulation results, and the amplitude of the noise increases with increasing the thermal velocity. Although the Vlasov simulation does not cause the statistical noise inherent to the PIC simulation, it is numerically expensive to treat cold and fast particles because the domain of the velocity space is limited to be finite. These pros and cons evoke us to solve light particles (with relatively fast thermal velocity and slow bulk velocity) with the Vlasov simulation and heavy particles (with slow thermal velocity and fast bulk velocity) with the PIC simulation. The hybridized particle-Vlasov simulation method has been implemented to self-gravitating systems [4], but is a first attempt to collisionless plasma.

The simulation methods adopted here are as follows: For the Vlasov simulation, we split the equation into two advection parts in the configuration and velocity spaces, and then solve them by a conservative semi-Lagrangian method [5]. For the PIC simulation, we utilize the open-source package for the electromagnetic PIC simulation code, pCANS [6]. Since the Vlasov simulation code is written in the C++ language while a part of the PIC simulation code is in the Fortran language, we conducted multilingual programming with a help of "SX-Aurora TSUBASA C/C++ compiler Users Guide" (obtained from ES User Support page).

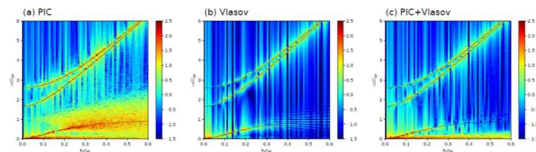


Figure 1: Dispersion relation for linear waves propagating parallel to the magnetic field.



### 3. Results

Some benchmark simulations are conducted to measure the performance of the new hybridized PIC-Vlasov simulation code. Figure 1 shows the dispersion relation for linear waves propagating parallel to the magnetic field obtained with (left) the PIC simulation, (center) the Vlasov simulation, and (right) the hybridized simulation. The R-mode, L-mode and whistler-mode waves are observed, and are in good agreement with the linear theory (dashed lines). The noise originating from thermal electrons around the whistler branch is evident in the PIC simulation, but is eliminated in the Vlasov and hybridized simulations.

Figure 2 shows the time evolution of the electric field in the ion acoustic instability, which is induced by the interaction of hot electrons and cold ions when they have a relative velocity. The electric field grows exponentially when the ion to electron temperature ratio is  $10^{-4}$  (green and red lines), and is in good agreement with the linear theory (dashed lines). Figure 3 shows the phase space distributions of electrons (top) and ions (bottom) at the saturated stage. Electrons resonate with the ion acoustic wave (the phase velocity is indicated by the dashed line), and forms hole structures. Ions have fast bulk velocity ( $\sim 0.0008$ ) and slow thermal velocity ( $\sim < 0.0001$ ), and thus they are hard to be resolved with Eulerian methods.

Figure 4 shows the snapshot of the phase space distributions of electrons (top) and ions (center) and the electric field (bottom) in the collisionless shock. Particles are injected from the right boundary ( $x = 49152$ ) and is reflected at the left boundary ( $x = 0$ ) to form the shock. The background magnetic field is aligned in the  $x$  direction (called the “parallel shock” because the magnetic field is parallel to the shock normal). The shock front is located around  $x = 10000$ . A part of particles is reflected at the shock and can escape to the upstream region. They interact with incident particles around  $x = 20000$  and form the weak shock. A part of ions is further escape to  $x = 30000$ , and induces the electric field via an electrostatic instability. Complicated structures seen in the parallel shock are known as the foreshock,

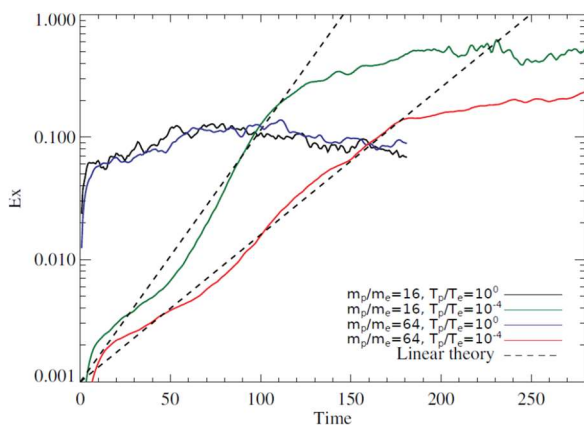


Figure 2: Time evolution of the electric field in the ion acoustic instability.

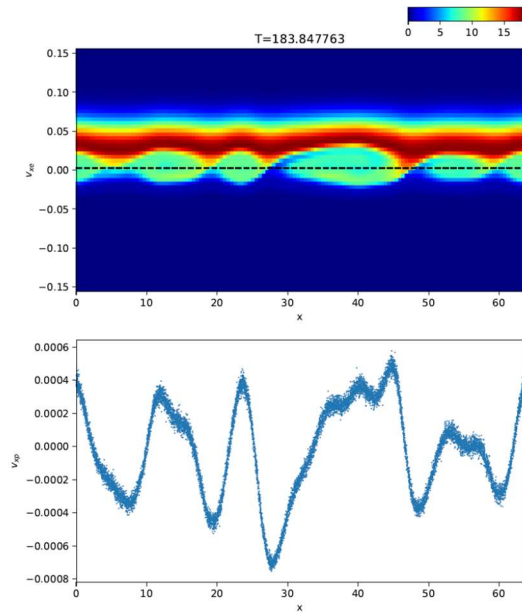


Figure 3: Phase space distribution of electrons and ions in the ion acoustic instability.

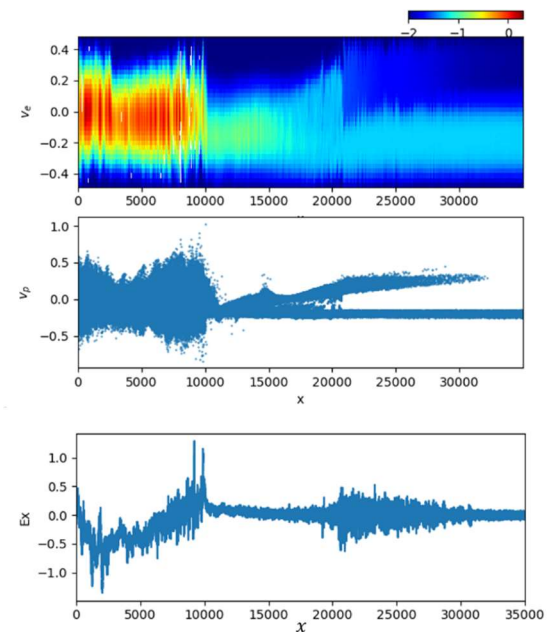


Figure 4: Phase space distribution of electron and ions, and the electric field distribution in the parallel shock.

and is formed ahead of the Earth’s bow shock.

### 4. Summary and Perspective

To study high energy phenomena (e.g., particle acceleration at collisionless shocks) occurring in the solar-terrestrial environment, we develop a new first-principles simulation code, which is a hybridization of the Lagrangian PIC simulation method and the Eulerian Vlasov simulation method. The

performance of the code is measured through the benchmark tests of the linear wave propagation and the ion acoustic instability. Toward the product run, we perform the simulation of the collisionless shock, and show its complicated structure due to reflected particles. In future works, we will perform simulations with various shock parameters to measure the efficiency of particle acceleration and discuss its mechanism.

### Acknowledgement

This work is supported by JSPS KAKENHI JP20K04056. The software used in this work was in part developed in pCANS at Chiba University.

### References

- [1] C. K. Birdsall and A. B. Langdon, “Plasma Physics via Computer Simulation” (Inst. of Phys. Publishing, Bristol/Philadelphia, 1991).
- [2] C. Z. Cheng and G. Knorr, “The integration of the Vlasov equation in configuration space”, *Journal of Computational Physics* 22, 330–351 (1976).
- [3] T. Minoshima, Y. Matsumoto, and T. Amano, “A finite volume formulation of the multi-moment advection scheme for Vlasov simulations of magnetized plasma”, *Computer Physics Communications* 187, 137-151 (2015).
- [4] K. Yoshikawa, S. Tanaka, N. Yoshida, and S. Saito, “Cosmological Vlasov-Poisson Simulations of Structure Formation with Relic Neutrinos: Nonlinear Clustering and the Neutrino Mass”, *Astrophysical Journal* 904, 159 (2020).
- [5] S. Tanaka, K. Yoshikawa, T. Minoshima, and N. Yoshida, “Multidimensional Vlasov-Poisson Simulations with High-order Monotonicity- and Positivity-preserving Schemes”, *Astrophysical Journal* 849, 76 (2017).
- [6] <http://www.astro.phys.s.chiba-u.ac.jp/pcans/>