

JAERI-Data/Code
2000-025



JP0050385



PARASOLコードの開発

2000年5月

細川哲成*・滝塚知典

日本原子力研究所
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。

入手の問合せは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越しください。なお、このほかに財團法人原子力弘済会資料センター（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, 319-1195, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 2000

編集兼発行 日本原子力研究所

PARASOLコードの開発

日本原子力研究所那珂研究所炉心プラズマ研究部

細川 哲成*・滝塚 知典

(2000年4月12日受理)

ITERなどのトカマク型核融合炉において、ダイバータは熱除去や排気、不純物の遮蔽について重要な役割を果たす。ダイバータの性質は流体モデルによる包括的なシミュレーションコードによって研究されている。スクレイプオフ層 (SOL) プラズマとダイバータプラズマに関する流体モデルには様々な物理モデルが導入されており、それら物理モデルの妥当性を調べるために運動論的な手法が必要である。運動論的モデルのうち、もっとも有力なもの一つが粒子シミュレーションである。そこで粒子コードPARASOLを開発し、SOLとダイバータプラズマのシミュレーション研究を行っている。PARASOLコードでは、ダイバータ板にはさまれた領域において、イオンと電子の運動を静電的PIC法に基づき追跡する。クーロン衝突効果はモンテカルロ法二体衝突モデルで模擬する。中性粒子の運動も荷電粒子と同時に追跡する。本報告書は、PARASOLの物理モデル、数値計算法、プログラム構造、入力パラメータ、出力形式、シミュレーション結果例、並列計算法、および超並列計算機Paragon XP/S15-256を用いたときの並列計算効率についてまとめたものである。

Development of PARASOL Code

Masanari HOSOKAWA* and Tomonori TAKIZUKA

Department of Fusion Research
Naka Fusion Research Establishment
Japan Atomic Energy Research Institute
Naka-machi, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received April 12, 2000)

The divertor is expected to play key roles in tokamak reactors, such as ITER, for the heat removal, ash exhaust, and impurity shielding. Its performance is being predicted by using comprehensive simulation codes with the fluid model. In the fluid model for scrape-off layer (SOL) and divertor plasmas, various physics models are introduced. Kinetic approach is required to examine the validity of such physics models. One of the most powerful kinetic models is the particle simulation. Therefore a particle code PARASOL has been developed, and is being used for the simulation study of SOL and divertor plasmas. The PARASOL code treats the plasma bounded by two divertor plates, in which motions of ions and electrons are traced by using a electrostatic PIC method. Effects of Coulomb collisions are simulated by using a Monte-Carlo=method binary collision model. Motions of neutral particles are traced simultaneously with charged particles. In this report, we describe the physics model of PARASOL, the numerical methods, the configuration of the program, input parameters, output formats, samples of simulation results, the parallel computing method. The efficiency of the parallel computing with Paragon XP/S15-256 is demonstrated.

Keywords: Particle Simulation, Divertor, SOL Plasma, PIC Method, Binary Collision Model, Parallel Computing

* Research Organization for Information Science & Technology

目 次

1.	はじめに	1
2.	シミュレーションの物理モデル	2
2.1	空間構成, 磁場	3
2.2	荷電粒子運動方程式	3
2.2.1	電子の運動	4
2.2.2	イオンの運動	4
2.2.3	速度の座標変換	4
2.3	磁力線垂直方向拡散	5
2.4	ポアッソン方程式と電場	5
2.5	二体衝突モデル	6
2.5.1	衝突相手のランダム選択	6
2.5.2	速度変化	7
2.6	粒子と熱の消失と発生	10
2.6.1	ダイバータ板における消失	10
2.6.2	粒子の発生	10
2.6.3	熱供給と冷却	12
2.6.4	マクスウェル速度分布	12
2.7	中性粒子の運動と中性粒子関連の衝突	13
3.	数値解法	14
3.1	方程式の規格化	14
3.2	空間メッシュ	15
3.3	運動方程式のleap-frog法（時間差分）	15
3.4	密度, 電場計算のPIC法	17
3.4.1	密度計算	17
3.4.2	電場計算	17
3.5	ポアッソン方程式の数値解法	17
3.6	数値的乱数	18
3.6.1	一様乱数	18
3.6.2	正規乱数	19
4.	PARASOLの概要	19
4.1	プログラムフロー	20
4.2	モジュール一覧	21
4.3	プログラムツリー	23
4.4	入力パラメータ	25
4.5	計算結果出力	30
4.6	配列数制限	47

4.7 並列化	47
4.7.1 領域分割法	47
4.7.2 SPMDモデルによる並列化	48
4.7.3 MPIライブラリの利用	49
5. 並列計算効率	49
謝辞	55
参考文献	55

Contents

1.	Introduction	1
2.	Physics Model of Simulation	2
	2.1 Spatial Configuration and Magnetic Field	3
	2.2 Equations of Motion for Charged Particles	3
	2.2.1 Motion of Electrons	4
	2.2.2 Motion of Ions	4
	2.2.3 Transformation of Coordinates in Velocities	4
	2.3 Diffusion across Magnetic Field Line	5
	2.4 Poisson's Equation and Electric Field	5
	2.5 Binary Collision Model	6
	2.5.1 Random Selection of Partcles	6
	2.5.2 Change of Velocity	7
	2.6 Loss and Generation of Particles and Heat	10
	2.6.1 Loss at Divertor Plate	10
	2.6.2 Generation of Particles	10
	2.6.3 Heat Source and Sink	12
	2.6.4 Maxwell Distribution of Velocities	12
	2.7 Motion for Neutral Particles and Collisions Related with Neutrals	13
3.	Numerical Method	14
	3.1 Normalization of Equations	14
	3.2 Spatial Mesh	15
	3.3 Leap-frog Method for Equation of Motions (Difference in Time)	15
	3.4 PIC Method for Density and Electric-Field Calculations	17
	3.4.1 Density Calculation	17
	3.4.2 Electric-Field Calculation	17
	3.5 Numerical Method for Poisson's Equation	17
	3.6 Numerical Random Numbers	18
	3.6.1 Uniform Random Numbers	18
	3.6.2 Gaussian Random Numbers	19
4.	Outline of PARASOL	19
	4.1 Program Flow	20
	4.2 List of Modules	21
	4.3 Program Tree	23
	4.4 Input Parameters	25
	4.5 Output of Simulation	30
	4.6 Limit of Numbers in Arrays	47

4.7 Parallelization	47
4.7.1 Domain Decomposition Method	47
4.7.2 Parallelization by SPMD Model	48
4.7.3 Usage of MPI Library	49
5. Efficiency of Parallel Computation	49
Acknowledgments	55
References	55

1 はじめに

ITERなどのトカマク型核融合炉において、ダイバータは熱除去や排気、不純物の遮蔽について重要な役割を果たすと考えられている。JT-60Uトカマク等において、ダイバータプラズマの性質が実験的に調べられている。図1.1にJT-60Uの断面を示す。閉じた磁力線で囲まれた主プラズマから、磁力線を横切って流出するプラズマの粒子とエネルギーは、開いた磁力線構造のスクレイプオフ層(SOL)／ダイバータプラズマを通ってダイバータ板に損失する。これらの実験結果から、プラズマパラメータを外挿し、核融合炉のダイバータ機能の予測とダイバータ構造の設計を行なう。このとき、数値シミュレーションが不可欠であり、流体モデル[1]による包括的なシミュレーションコードが用いられている。

SOLプラズマおよびダイバータプラズマの流体モデルには様々な物理モデル、特にプラズマ-壁面境界における境界条件、熱伝導度、粘性等が導入されている。そのような物理モデルの妥当性を調べるために、運動論的な手法が必要である。運動論モデルのうち、もっとも有力なもの一つに粒子シミュレーションがある。このような背景のもと、PARASOL(PARTicle Advanced simulation for SOL and divertor plasmas)コードを開発した。PARASOLコードは文献[2]にあるコードを修正／発展させたものである。PARASOLコードでは、板にはさまれた領域において、イオンと電子の運動を静電的PIC法(electrostatic Particle-In-Cell method)に基づき追跡する。クーロン衝突効果はモンテカルロ法二体衝突モデル[3]で模擬する。中性粒子の運動も荷電粒子と同時的に追跡する。本報告書は、1次元PARASOLコードについて説明する。第2章はPARASOLコードで用いられる物理モデルについて、第3章ではその数値計算法について述べる。第4章ではPARASOLコードのプログラム構造、計算結果などの詳細について説明する。第5章はスカラー並列計算機用に並列化されているPARASOLコードの並列計算効率について述べる。

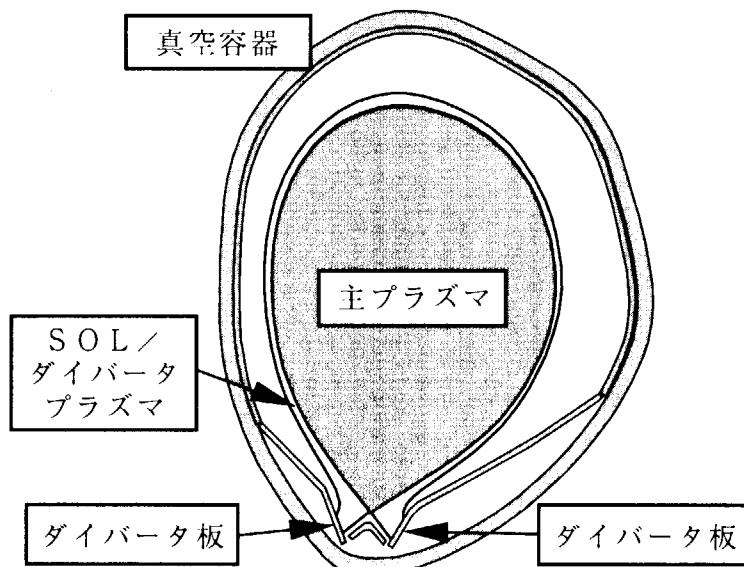


図1.1: JT-60U断面

2 シミュレーションの物理モデル

PARASOL コードは、ダイバータ板を含む SOL およびダイバータプラズマのシミュレーションを行なう静電的 PIC 法に衝突モデルを付加した粒子コードである。

荷電粒子（電子、イオン）と中性粒子の運動を、熱い粒子供給領域を含むダイバータ板に挟まれた領域で追跡する。荷電粒子は、ポアッソン（Poisson）方程式より求まる静電場と磁場（given）の影響を受けて運動し、中性粒子は直線運動する。衝突効果は SOL / ダイバータプラズマにおいては本質的に重要であって、モンテカルロ法二体衝突モデル [3] によって導入されている。PARASOL コードは荷電交換や電離、またダイバータ板からの中性粒子供給といったプラズマ／壁相互作用も模擬する。

本報告書では PARASOL コードの 1 次元バージョンについて記述する。2 次元バージョンは現在（2000 年）開発を進めている。本章ではシミュレーションの物理モデルについて説明する。図 2.1 に PARASOL で取り扱っている物理を分かりやすく図示する。

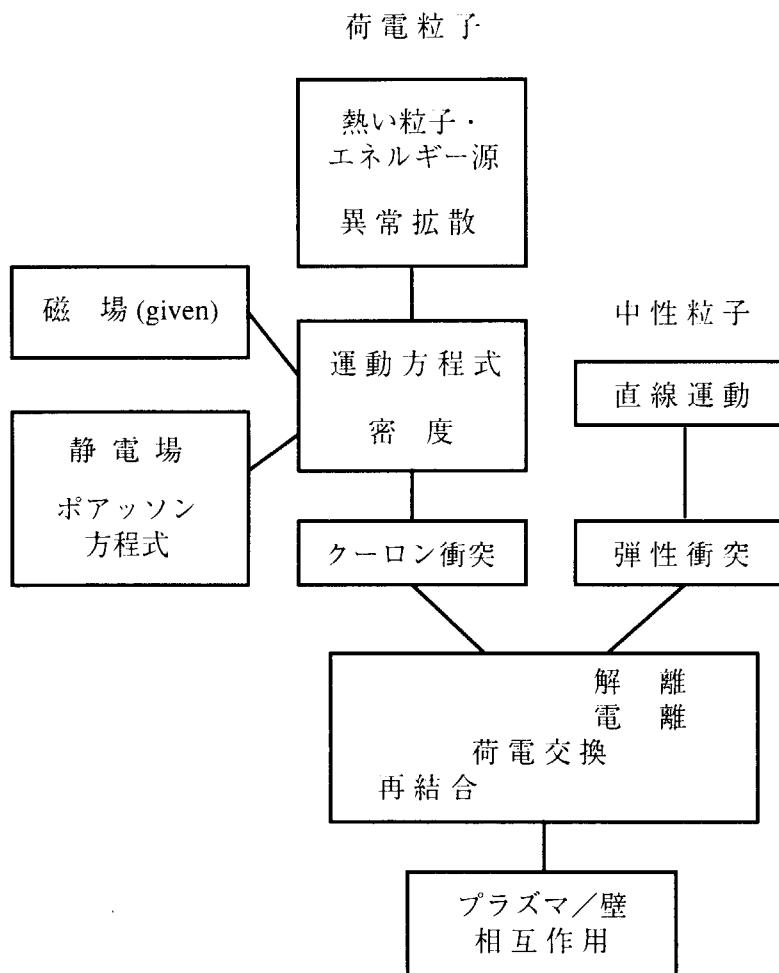


図 2.1: PARASOL の物理モデル

2.1 空間構成, 磁場

シミュレーションプラズマの空間構成を図 2.2 に示す。 x 方向のシステム長を L とする系において、2 枚のダイバータ板が系の両端 $x = -L/2$ および $x = L/2$ の位置に、 x 軸に垂直に設置される。一様磁場 $\mathbf{B} = (B_x, 0, B_z)$ の磁力線はダイバータ板に斜行入射する。SOL プラズマの中心部に熱い粒子供給領域がある。

z 方向には、全ての物理量が一様であるとしている。 y 方向には、物理量の変化は起こり得ると考え、PARASOL では粒子の y 方向運動を追跡する。但し、現在の 1 次元バージョンでは、 y 方向運動は追跡するが、 y 方向の静電ポテンシャルの変化は無視している。

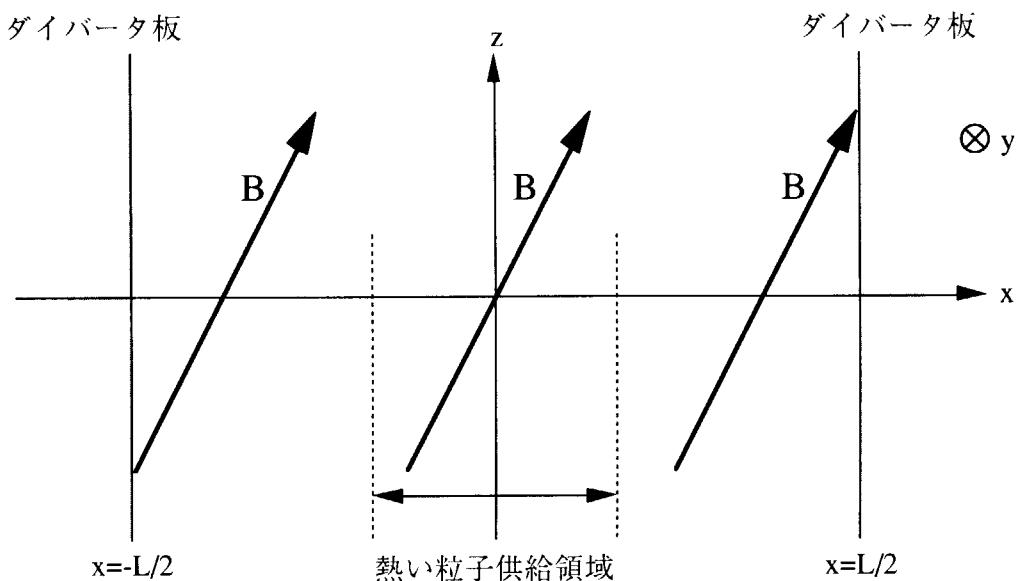


図 2.2: PARASOL における空間構成

2.2 荷電粒子運動方程式

PARASOL コードにおける荷電粒子運動は、電子については旋回中心 (guiding center) の運動で、イオンについては旋回中心の運動または旋回運動を含む全運動の一方を選択して計算を行うことができる。粒子の運動する空間は、旋回中心運動では $2D-2V(x, y, V_{||}, V_{\perp})$ 、全運動では $2D-3V(x, y, V_x, V_y, V_z)$ である。ここで速度 V の添字 $||$ と \perp はそれぞれ磁力線に平行な成分と垂直成分を表す。

以下、時間を t 、電子とイオンの電荷はそれぞれ $-e$, e 、質量をそれぞれ m , M とする。電場 \mathbf{E} および磁場 \mathbf{B} については、 $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$, $\mathbf{B} = (B_x, 0, B_z)$ であり、磁場についてはその大きさ $B = (B_x^2 + B_z^2)^{1/2}$ を一定とする。

2.2.1 電子の運動

旋回中心運動

$$m \frac{dV_{||}}{dt} = -e \frac{B_x}{B} E_x, \quad (2.1)$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{B_x}{B} V_{||} + \frac{B_z}{B^2} E_y, \quad (2.2)$$

$$\frac{dy}{dt} = -\frac{B_z}{B^2} E_x + \delta v_y. \quad (2.3)$$

ここで $(B_z E_y / B^2)$ と $(-B_z E_x / B^2)$ は $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ ドリフト速度であり, δv_y は拡散項である (2.3節参照)。

2.2.2 イオンの運動

旋回中心運動

$$M \frac{dV_{||}}{dt} = e \frac{B_x}{B} E_x, \quad (2.4)$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{B_x}{B} V_{||} + \frac{B_z}{B^2} E_y, \quad (2.5)$$

$$\frac{dy}{dt} = -\frac{B_z}{B^2} E_x + \delta v_y. \quad (2.6)$$

ここで $(B_z E_y / B^2)$ と $(-B_z E_x / B^2)$ は $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ ドリフト速度であり, δv_y は拡散項である (2.3節参照)。

全運動

$$M \frac{dV_x}{dt} = e E_x + e V_y B_z, \quad (2.7)$$

$$M \frac{dV_y}{dt} = e E_y + e(-V_x B_z + V_z B_x), \quad (2.8)$$

$$M \frac{dV_z}{dt} = -e V_y B_x, \quad (2.9)$$

$$\frac{dx}{dt} = V_x, \quad (2.10)$$

$$\frac{dy}{dt} = V_y + \delta v_y. \quad (2.11)$$

ここで δv_y は拡散項である (2.3節参照)。

2.2.3 速度の座標変換

PARASOL コードでは, 旋回中心運動の 2 次元速度座標系 ($V_{||}$, V_{\perp}) と, 全運動の 3 次元速度座標系 (V_x , V_y , V_z) が混在する。

さらに、二体衝突計算をはじめ、粒子速度設定、計測データ作成等の処理においては適宜、速度座標の変換を行う必要が生じる。このためには次式を用いて速度の座標変換を行う。

$$\begin{cases} V_x = \frac{B_x}{B} V_{\parallel} + \frac{B_z}{B} V_{\perp} \sin \xi \\ V_y = V_{\perp} \cos \xi \\ V_z = \frac{B_z}{B} V_{\parallel} - \frac{B_x}{B} V_{\perp} \sin \xi \end{cases} \quad (2.12)$$

$$\begin{cases} V_{\parallel} = \frac{B_x}{B} V_x + \frac{B_z}{B} V_z \\ V_{\perp}^2 = (\frac{B_z}{B} V_x - \frac{B_x}{B} V_z)^2 + V_y^2 \end{cases} \quad (2.13)$$

ここで、 ξ は $0 \sim 2\pi$ 間に一様に分布する乱数である。

2.3 磁力線垂直方向拡散

古典的拡散では表せない磁力線垂直方向の異常拡散については、それを簡単なモデルにより模擬する。粒子の拡散係数 D を与え、磁力線に垂直な y 方向の拡散運動をランダムウォークで記述する。

微小時間 dt における粒子の平均的広がりの 2 乗 $\langle \delta y^2 \rangle$ は

$$\langle \delta y^2 \rangle = D dt \quad (2.14)$$

となる。したがって、各粒子における拡散変位は

$$\delta y = \sqrt{D dt} g \quad (2.15)$$

で与えられる。ここで g は平均が 0 ($\langle g \rangle = 0$)、広がりが 1 ($\langle g \rangle = 1$) の正規乱数である。式 (2.3), (2.6), (2.11) では、この拡散を y 方向時間微分の変化 δv_y

$$\delta v_y = \frac{\delta y}{dt} \quad (2.16)$$

と表している。

2.4 ポアソン方程式と電場

静電ポテンシャル ϕ は x 方向 1 次元のポアソン方程式により決まる。

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -\frac{e}{\epsilon_0} (n_i - n_e) \quad (2.17)$$

ここで n_e , n_i はそれぞれ電子とイオンの電荷密度、 ϵ_0 は真空の誘電率である。両端のダイバータ板には電位差 $\Delta\phi$ を与えることができ、左右の境界で次のように ϕ を決める。

$$x = -L/2 \text{ で } \phi = 0 \quad (2.18)$$

$$x = L/2 \text{ で } \phi = \Delta\phi \quad (2.19)$$

PARASOL コードでは、 SOL プラズマ中の電流値を任意に設定し、電流制御を行なうことができる。SOL プラズマ中を x 方向に流れる電流は

$$J_x = e (\langle n_i V_{xi} \rangle - \langle n_e V_{xe} \rangle) \quad (2.20)$$

であり、コードにおいて用いる「電流」 \underline{J}_x は全空間平均の規格化値とする。

$$\underline{J}_x = L^{-1} \int dx (\langle N_i V_{xi} \rangle - \langle N_e V_{xe} \rangle) / N_{av} \quad (2.21)$$

ここで N_{av} は空間平均イオン密度である。電流制御は、 $x = L/2$ でダイバータ板間に電位差 $\Delta\Phi$ を与えることにより行なう。

$$\Delta\Phi = C_V \int dt (\underline{J}_x - J_0) \quad (2.22)$$

電流 \underline{J}_x が $\approx J_0$ となるとき電位差 $\Delta\Phi$ は一定となる。 C_V と J_0 は入力パラメータである(4.4節参照)。

x 方向電場 E_x は次式で与えられる。

$$E_x = - \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (2.23)$$

径方向の電場 E_y については、これを入力パラメータとして与える(4.4節参照)。

2.5 二体衝突モデル

荷電粒子のクーロン衝突効果を、次の様な二体衝突モデル [3] により模擬する。

- (i) 空間をセルで分割する(PIC 法のセル分割に一致しても、していなくてもよい)。1つのセル内では諸物理量の空間変化は小さく、ほぼ一様である必要がある。
- (ii) 時間ステップ Δt の間では、粒子の無衝突運動(2.2節参照)と衝突効果は直接に結合しないと仮定する。したがって、運動方程式を計算した後に衝突モデルにより衝突効果を加える。
- (iii) ある粒子の衝突は、同じセル内に存在する1つの電子及び1つのイオンを衝突相手としてランダムに選択し、これを模擬する。
- (iv) 2 粒子間の時間ステップ Δt 間の二体衝突は、相対速度の散乱として記述される。この結果、2 粒子の速度が変化する。

2.5.1 衝突相手のランダム選択

1つのセル内において、二体衝突の相手をランダムに選択する方法を以下に示す。

電子が N_e 個、イオンが N_i 個セル内にあるとして、それぞれを配列として並べるとき、各タイムステップ毎にランダムに配列を入れ換える。ランダムに入れ換えられた配列では、順番に衝突対を作っていても、衝突相手がランダムに選択されている。

二体衝突は (a) 電子-電子, (b) イオン-イオン, 及び (c) 電子-イオンの間で生じる。また 1 つのセルのなかで (a-1) $N_e =$ 偶数, (a-2) $N_e =$ 奇数, (b-1) $N_i =$ 偶数, (b-2) $N_i =$ 奇数, (c-1) $N_e = N_i$, (c-2) $N_e \neq N_i$ の場合がある。これらの場合について、衝突対の作り方を図 2.3 に示す。(a-1), (b-1) の場合と (c-1) の場合は単純に衝突対を作れる。(a-2) と (b-2) の場合は、最初の 3 粒子間で 3 対を作る。残りは単純に対を作る。(c-2) の場合は、個数の少ない方の粒子 (N_L 個) の一部 (N_{L1} 個) が 2 回の二体衝突をし、個数の多い方の粒子 (N_H 個) は全て 1 回の二体衝突をする。

$$2N_{L1} + (N_L - N_{L1}) = N_H$$

つまり $N_{L1} = N_H - N_L$ と選ぶ。 $N_{L1} > N_L$ となるときは、少数粒子側は 3 回以上の二体衝突をする。

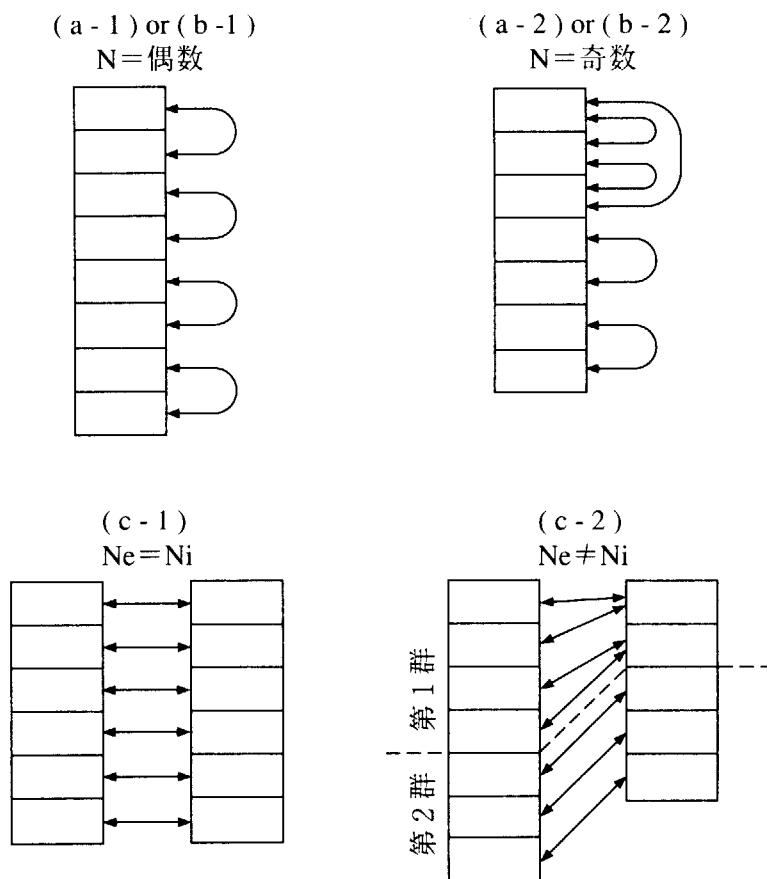


図 2.3: 粒子対の選択法

2.5.2 速度変化

ランダムに選ばれた 2 個の粒子 α と β の、二体衝突による速度の変化について記述する。それぞれの粒子の質量および電荷を m_α , m_β , および e_α , e_β とする。それぞれの粒子の速

度を \mathbf{V}_α , \mathbf{V}_β とすると、実験室系での両者の相対速度 \mathbf{u} は次のようになる。

$$\mathbf{u} = \mathbf{V}_\alpha - \mathbf{V}_\beta = (u_x, u_y, u_z) \quad (2.24)$$

時刻 t における相対速度 $\mathbf{u}^t = \mathbf{V}_\alpha^t - \mathbf{V}_\beta^t$ を、次のように相対速度座標系に移す。

$$\begin{pmatrix} \cos \theta \cos \phi & \cos \theta \sin \phi & -\sin \theta \\ -\sin \theta & -\cos \phi & 0 \\ \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{pmatrix}^t = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ u \end{pmatrix}^t. \quad (2.25)$$

ここで角度 θ, ϕ は図 2.4 のように定義する。

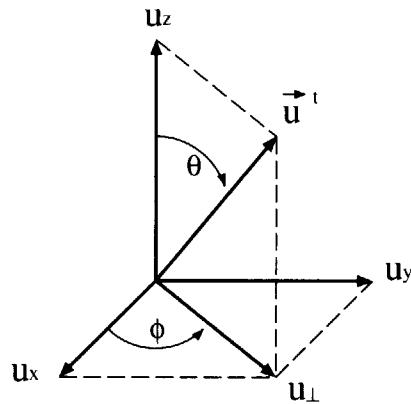


図 2.4: 実験室系における相対速度 \mathbf{u}

二体衝突の結果、時間 Δt 後の相対速度 $\mathbf{u}^{t+\Delta t}$ は、その大きさは \mathbf{u}^t と同じであるが、方向は図 2.5 にあるように、散乱角 Θ だけ変化する。

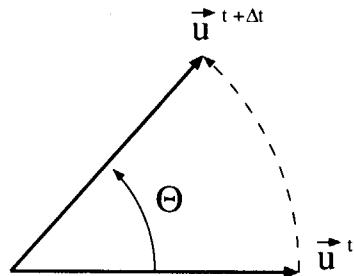


図 2.5: 相対速度の変化

時刻 t における相対速度座標系では次式のように変化する。

$$(0, 0, u)^t \rightarrow (u \sin \Theta \cos \Phi, u \sin \Theta \sin \Phi, u \cos \Theta)^{t+\Delta t}, \quad (2.26)$$

ここで角度 Φ は $0 \sim 2\pi$ に一様に分布する乱数である。相対速度座標系での衝突後の速度は、実験室系においては次のように表せる。

$$(u_x, u_y, u_z)^{t+\Delta t} = (u_x, u_y, u_z)^t + (\Delta u_x, \Delta u_y, \Delta u_z), \quad (2.27)$$

$$\Delta u_x = \frac{u_x^t}{u_\perp^t} u_z^t \sin \Theta \cos \Phi - \frac{u_y^t}{u_\perp^t} u \sin \Theta \sin \Phi - u_x^t (1 - \cos \Theta), \quad (2.28)$$

$$\Delta u_y = \frac{u_y^t}{u_\perp^t} u_z^t \sin \Theta \cos \Phi + \frac{u_x^t}{u_\perp^t} u \sin \Theta \sin \Phi - u_y^t (1 - \cos \Theta), \quad (2.29)$$

$$\Delta u_z = -u_\perp^t \sin \Theta \cos \Phi - u_z^t (1 - \cos \Theta). \quad (2.30)$$

ここで、 $u_\perp = (u_x^2 + u_y^2)^{1/2}$ である。 $u_\perp = 0$ のとき、上方程式は次の形となる。

$$\Delta u_x = u \sin \Theta \cos \Phi, \quad (2.31)$$

$$\Delta u_y = u \sin \Theta \sin \Phi, \quad (2.32)$$

$$\Delta u_z = -u (1 - \cos \Theta). \quad (2.33)$$

これらの式を用いることで、粒子 α, β の実験室系における衝突後の速度は次のように求まる。

$$\mathbf{V}_\alpha^{t+\Delta t} = \mathbf{V}_\alpha^t + \frac{m_{\alpha\beta}}{m_\alpha} \Delta \mathbf{u} \quad (2.34)$$

$$\mathbf{V}_\beta^{t+\Delta t} = \mathbf{V}_\beta^t - \frac{m_{\alpha\beta}}{m_\beta} \Delta \mathbf{u} \quad (2.35)$$

ここで、換算質量 $m_{\alpha\beta}$ は次のように定義される。

$$m_{\alpha\beta} = \frac{m_\alpha m_\beta}{m_\alpha + m_\beta} \quad (2.36)$$

この二体衝突の前後で、系の運動量およびエネルギーは厳密に保存されている。散乱角 Θ を与えるため、次の 2 つの式を導入する。

$$\sin \Theta = \frac{2\delta}{1 + \delta^2} \quad (2.37)$$

$$1 - \cos \Theta = \frac{2\delta^2}{1 + \delta^2} \quad (2.38)$$

$$\delta \equiv \tan\left(\frac{\Theta}{2}\right) \quad (2.39)$$

ここで δ は正規乱数である。その平均値はゼロで、2 乗平均 $\langle \delta^2 \rangle$ は

$$\langle \delta^2 \rangle = \frac{e_\alpha^2 e_\beta^2 n_L \lambda}{8\pi \varepsilon_0^2 m_{\alpha\beta}^2 u^3} \Delta t, \quad (2.40)$$

である。ここで、 ϵ_0 は真空の誘電率であり、 n_L は n_α と n_β の内低い方の密度、 λ はクーロン対数である。粒子数 N_α が奇数のときには、最初の 3 粒子で 3 組の衝突対が選ばれる。その時 $\langle \delta^2 \rangle$ は、

$$\langle \delta^2 \rangle = \frac{1}{2} \cdot \frac{e_\alpha^2 e_\beta^2 n_L \lambda}{8\pi \epsilon_0^2 m_{\alpha\beta}^2 u^3} \Delta t. \quad (2.41)$$

で与えられる。シミュレーションでは、 $\langle \delta^2 \rangle$ は Δt と u^{-3} に比例し、1 より大きくなる場合がある。この場合、散乱角 Θ は一様分布 ($0 \sim \pi$) からランダムに選ばれる。

2.6 粒子と熱の消失と発生

2.6.1 ダイバータ板における消失

粒子がダイバータ板に到達すると、そこで消失する。すなわち粒子座標が $x \leq -L/2$ または $x \geq L/2$ となったとき、その粒子は消失したものとする。

現 1 次元バージョンにおいて、特別な場合としてプラズマ中からイオンと電子を対にして消失させることもできる。

2.6.2 粒子の発生

ダイバータ板にイオンが消失すると、失われた粒子を補うためにその直後（次の時間ステップ）に荷電粒子対（電子とイオン）または中性粒子を所定の場所から、所定の温度を与えて発生させる。

熱い粒子源 (hot particle source) SOL プラズマ中心部の熱い粒子供給領域 $-L_s/2 < x < L_s/2$ において、後述するマクスウェル速度分布に従う荷電粒子対（電子とイオン）を供給する。時間ステップ Δt 間に失われたイオンの個数を N_{loss} 個とし、リサイクリング率を r_g ($0 < r_g \leq 1$) とすると、供給される粒子対の個数は $(1 - r_g)(1 - r_c)N_{loss}$ 個である。 r_c ($0 < r_c < 1$) は発生コールドソースのトータルソースに対する割合を示す。熱い粒子の速度は後述するマクスウェル速度分布に従う。

位置	$-L_s/2 < x < L_s/2$
	$y = 0$
粒子対の数	$(1 - r_g)(1 - r_c)N_{loss}$
電子温度	T_{e0}
イオン温度	T_{i0}

T_{e0} および T_{i0} は、それぞれ供給される電子とイオンの温度である。

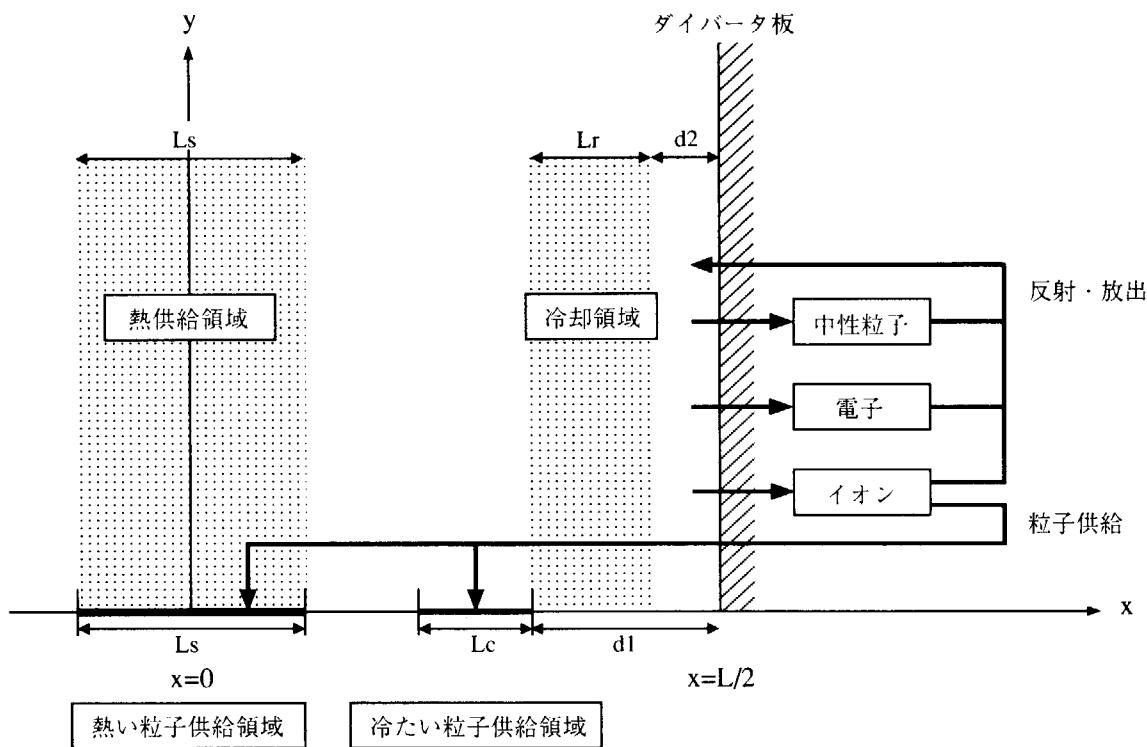


図 2.6: 粒子と熱の消失と発生

冷たい粒子源 (cold particle source)

1. 荷電粒子対

ダイバータ板近傍のプラズマ領域において、冷たい荷電粒子対を $(1 - r_g)r_c N_{loss}$ 個供給する。供給する粒子の温度は電子とイオンについて以下に示す通りである。

$$\text{位置 } -L/2 + d_1 < x < -L/2 + d_1 + L_c$$

$$L/2 - d_1 - L_c < x < L/2 - d_1$$

$$y = 0$$

粒子対の数	$(1 - r_g)r_c N_{loss}$
-------	-------------------------

電子温度	T_{ec}
------	----------

イオン温度	T_{ic}
-------	----------

磁力線平行方向平均速度	$v_{ic} = \sqrt{2E_c/M}$
-------------	--------------------------

L_c は冷たい粒子供給領域の領域幅であり、 d_1 はダイバータ板から冷たい粒子供給領域までの距離を表す。 T_{ec} および T_{ic} は、それぞれ電子とイオンのコールドソース温度、 E_c はイオンの平均流動エネルギーである。磁力線平行方向平均速度 v_{ic} はダイバータ板から離れる向きに与えられる。

2. 中性粒子

ダイバータ板に流入し消失した荷電粒子は、リサイクリング率 r_g の割合でダイバータ板からプラズマ領域に再び中性粒子として反射・放出される。発生する中性粒子の個数は $r_g N_{loss}$ 個であり、速度は以下に示す通りである。

$$\text{位置 } x = -L/2, x = L/2$$

$y = \text{イオン消失位置}$

$$\text{粒子数} \quad r_g N_{loss}$$

$$\text{温度} \quad T_{wn}$$

ここで r_{wn} は、ダイバータ板から発生する中性粒子の、イオンに対する温度比を示す。また、発生中性粒子の速度の方向は、プラズマに向かう方向のみである。

2.6.3 热供給と冷却

高温プラズマ補給領域 $-L_s/2 < x < L_s/2$ において荷電粒子に熱供給する。

ダイバータ板近傍において、熱放出する。熱放出率により荷電粒子の速度を熱放出下限エネルギーまで減少させる。

$$\text{対象領域 } -L/2 + d_2 < x < -L/2 + d_2 + L_r$$

$$L/2 - d_2 - L_r < x < L/2 - d_2$$

$$\text{電子温度} \quad (1 - r_{he}) T_e$$

$$\text{イオン温度} \quad (1 - r_{hi}) T_i$$

L_r は熱放出領域の領域幅であり、 d_2 はダイバータ板から熱放出領域までの距離を表す。 r_{he} , r_{hi} はそれぞれ電子とイオンの熱放出率である。

2.6.4 マクスウェル速度分布

マクスウェル-ボルツマン速度分布法則による速度設定を行う。

$$f(v_x, v_y, v_z) = C \exp\left(\frac{-m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2T}\right)$$

ここで、 T , m はそれぞれ絶対温度、粒子質量である。

PARASOL コードにおいては、速度成分それぞれについて次の式で与える。

$$V = \sqrt{\frac{T}{m}} g$$

g は正規乱数であって、平均 $\langle g \rangle = 0$, 分散 $\langle g^2 \rangle = 1$ である。ホットソース、コールドソースなどのソース別に 100 個単位にマクスウェル分布した速度群を用意し、そこから速度を選ぶ。この速度群は厳密に $\langle V \rangle = 0$, $\langle V^2 \rangle = T/m$ になっている。

2.7 中性粒子の運動と中性粒子関連の衝突

中性粒子運動方程式

中性粒子の運動（等速直線運動）を次のように表す。

$$\frac{dV_x}{dt} = 0, \quad (2.42)$$

$$\frac{dV_y}{dt} = 0, \quad (2.43)$$

$$\frac{dV_z}{dt} = 0, \quad (2.44)$$

$$\frac{dx}{dt} = V_x, \quad (2.45)$$

$$\frac{dy}{dt} = V_y. \quad (2.46)$$

中性粒子間衝突

PARASOL コードは上記荷電粒子対の衝突計算だけでなく、中性粒子間の弾性衝突計算を行う。弾性衝突に相当する速度変化をモンテカルロ法で計算する。

$$(V_{0a}, V_{0b}) \rightarrow (V'_{0a}, V'_{0b})$$

ここで、近接する 2 つの中性粒子を a, b とする。

反射

中性粒子がダイバータ板に到達したとき、すなわち $x \leq -L/2$ または $x \geq L/2$ となったとき、中性粒子は反射する。

荷電交換

近接するイオン a と中性粒子 b について荷電交換を行う。以下に示すようにそれぞれの速度を交換する。

$$\mathbf{V}_a \leftrightarrow \mathbf{V}_b$$

電離

電離確率により中性粒子をイオン化し、1 対の荷電粒子対（電子とイオン）を発生させる。

解離・再結合

分子の解離過程およびイオンと電子の再結合については、現バージョンでは取り扱っていない。

3 数値解法

3.1 方程式の規格化

PARASOL コードで取り扱う変数は、下記の物理量によって規格化された、無次元変数である。

時間： 空間平均のプラズマ密度 $\langle n \rangle$ で決められた電子プラズマ周波数

$$\omega_{pe} \equiv \left(\frac{e^2 \langle n \rangle}{\epsilon_0 m_e} \right)^{1/2}, \quad \omega_{pe} t \rightarrow t \quad (3.1)$$

速度： 初期電子温度 T_{e0} (= 高温プラズマ粒子源の電子温度) での電子熱速度

$$v_{e,th} \equiv \left(\frac{T_{e0}}{m_e} \right)^{1/2}, \quad \frac{V}{v_{e,th}} \rightarrow V \quad (3.2)$$

距離： ω_{pe} と $v_{e,th}$ で決められたデバイ長

$$\lambda_D \equiv \frac{v_{e,th}}{\omega_{pe}}, \quad \frac{x}{\lambda_D} \rightarrow x \quad (3.3)$$

静電ポテンシャル：

$$\frac{e\phi}{T_{e0}} \rightarrow \phi \quad (3.4)$$

電場：

$$\frac{eE\lambda_D}{T_{e0}} \rightarrow E \quad (3.5)$$

磁場の強さは、イオンの熱速度 $v_{i,th} \equiv (T_{i0}/m_i)^{1/2}$ で決められたイオンのラーマ半径 $\rho_i \equiv m_i v_{i,th} / eB$ と系の長さ L との比により、規格化する。

上記の規格化により、イオンの運動方程式（旋回運動を含む）は次のように書換えられる。

$$\frac{d\mathbf{V}}{dt} = C_i \mathbf{E} + C_B \frac{\mathbf{B}}{B} \times \mathbf{V} \quad (3.6)$$

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{V} + \delta\mathbf{v}_y \quad (3.7)$$

ここで C_i , C_B は、

$$\begin{aligned} C_i &= \frac{m_e}{m_i} \\ C_B &= \frac{v_{i,th}}{v_{e,th}} \frac{\lambda_D}{L} \frac{L}{\rho_i} \end{aligned}$$

である。また、規格化された旋回中心運動方程式は、次式で表される。

$$\frac{dV_{||}}{dt} = C_{e,i} \frac{\mathbf{B}}{B} \cdot \mathbf{E} \quad (3.8)$$

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\mathbf{B}}{B} V_{||} + C_{E \times B} \mathbf{E} \times \frac{\mathbf{B}}{B} + \delta\mathbf{v}_y \quad (3.9)$$

ここで $C_{e,i}$ は、電子に対しては $C_{e,i} = -1$ 、イオンに対しては $C_{e,i} = m_e/m_i$ 、また電子とイオンに対して共通に $C_{E \times B} = C_i/C_B$ である。

規格化されたポアッソン方程式と電場の式は次式で表される。

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{1}{\langle n \rangle} (n_i - n_e) \quad (3.10)$$

$$E_x = -\frac{d\phi}{dx} \quad (3.11)$$

y 方向の拡散については、音速で系を通過する特徴的時間 $\tau = (BL/B_x)(m_i/T_{e0})^{1/2}$ 内の拡散拡がり（規格化された拡がりが Δ_{dif} ）を基準にして、規格化拡散係数を与える。

$$D = \Delta_{dif}^2 \left(\frac{m_e}{m_i} \right)^{1/2} \frac{B_x \lambda_D}{BL} \quad (3.12)$$

クーロン衝突については、電子の平均自由行程 l_{mfp} と系の長さの比 L により規格化する。また、中性粒子関連の衝突（弾性、電離、荷電交換等）については、それぞれの衝突過程に対して、中性粒子の平均自由行程と系の長さの比により規格化する。

3.2 空間メッシュ

x 方向の領域 $-L/2 \leq x \leq L/2$ を等間隔メッシュで分割する。分割数を JX とすると、メッシュ巾は $\Delta x = L/JX$ である。現 1 次元バージョンでは、格子点上の電荷密度および電場を x 方向についてのみ 1 次元で計算する。

3.3 運動方程式の leap-frog 法（時間差分）

前節に示した粒子の運動方程式を数値的に解くために、(1) 微分を差分に置き換え、(2) leap-frog 法による時間積分を行う。

差分方程式を以下に示す。

旋回中心運動

$$V_x^{t+\Delta t} - V_x^t = C_{e,i} \frac{B_x}{B} E_x^{t+\frac{1}{2}\Delta t} \Delta t, \quad (3.13)$$

$$X^{t+\frac{3}{2}\Delta t} - X^{t+\frac{1}{2}\Delta t} = \frac{B_x}{B} V_x^{t+\Delta t} \Delta t + C_{E \times B} \frac{B_z}{B} E_y^{t+\frac{1}{2}\Delta t} \Delta t, \quad (3.14)$$

$$Y^{t+\frac{3}{2}\Delta t} - Y^{t+\frac{1}{2}\Delta t} = -C_{E \times B} \frac{B_z}{B} E_x^{t+\frac{1}{2}\Delta t} \Delta t + \delta v_y \Delta t. \quad (3.15)$$

$C_{e,i}$, $C_{E \times B}$ については 3.1 節を参照。

全運動

全運動は、前章で示した方程式を差分化することで ($V_x^{t+\Delta t}$, $V_y^{t+\Delta t}$, $V_z^{t+\Delta t}$) に関する 3 元連立 1 次方程式を解く問題に帰着する。

$$V_x^{t+\Delta t} - V_x^t = C_i E_x^{t+\frac{1}{2}\Delta t} \Delta t + 0.5 C_B \frac{B_z}{B} (V_y^{t+\Delta t} + V_y^t), \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} V_y^{t+\Delta t} - V_y^t &= C_i E_y^{t+\frac{1}{2}\Delta t} \Delta t - 0.5 C_B \frac{B_z}{B} (V_x^{t+\Delta t} + V_x^t) \\ &\quad + 0.5 C_B \frac{B_x}{B} (V_z^{t+\Delta t} + V_z^t), \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$V_z^{t+\Delta t} - V_z^t = -0.5 C_B \frac{B_x}{B} (V_y^{t+\Delta t} + V_y^t), \quad (3.18)$$

$$X^{t+\frac{3}{2}\Delta t} - X^{t+\frac{1}{2}\Delta t} = V_x^{t+\Delta t} \Delta t, \quad (3.19)$$

$$Y^{t+\frac{3}{2}\Delta t} - Y^{t+\frac{1}{2}\Delta t} = V_y^{t+\Delta t} \Delta t + \delta v_y \Delta t. \quad (3.20)$$

式 (3.16) ~ (3.18) において、

$$V^{t+\frac{1}{2}\Delta t} = \frac{V^{t+\Delta t} + V^t}{2}$$

とした。 C_i , C_B については 3.1 節を参照。

等速直線運動

中性粒子については次のような差分方程式を解く。

$$X^{t+\frac{3}{2}\Delta t} - X^{t+\frac{1}{2}\Delta t} = V_x^{t+\Delta t} \Delta t, \quad (3.21)$$

$$Y^{t+\frac{3}{2}\Delta t} - Y^{t+\frac{1}{2}\Delta t} = V_y^{t+\Delta t} \Delta t. \quad (3.22)$$

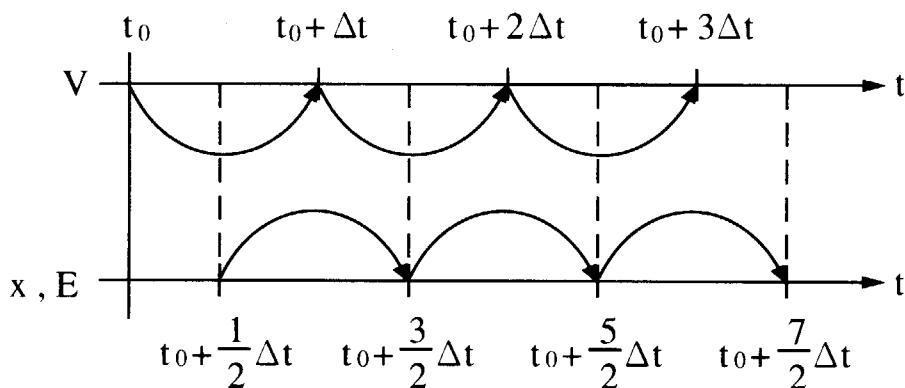


図 3.1: leap-frog 法

3.4 密度、電場計算の PIC 法

3.4.1 密度計算

PARASOL コードは、電荷密度計算に PIC (Particle In Cell) 法を用いる。PIC 法に従い、 x 方向に分割された格子系において、粒子の電荷を近接する格子点に距離で重み付け配分する。

$$\begin{aligned}\rho_j &\leftarrow \rho_j \pm (1 - D) \\ \rho_{j+1} &\leftarrow \rho_{j+1} \pm D\end{aligned}$$

ここで加算はイオンの場合を、減算は電子の場合に相当する。

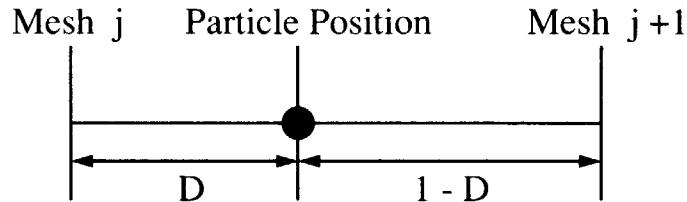


図 3.2: 電荷密度計算

3.4.2 電場計算

格子点上の電場を、次式より差分で求める。

$$E_j = -\frac{(\phi_{j+1} - \phi_{j-1})}{2\Delta x} \quad (3.23)$$

粒子位置における電場は、PIC 法による内挿電場を用いる。

$$E = (1 - D)E_j + DE_{j+1} \quad (3.24)$$

3.5 ポアソン方程式の数値解法

$-\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \rho$ とすると、 x 方向のメッシュ幅を Δx とした中心差分であらわせば、

$$-\phi_{j-1} + 2\phi_j - \phi_{j+1} = \Delta x^2 \rho_j \quad (3.25)$$

式 (3.25) の右辺が既知であるので、右辺を R_j で表すとすると、三項対角行列で表される連立方程式を解くことで ϕ_j が求まることとなる。

式 (3.25) を

$$\phi_j = P_j + Q_j \phi_{j-1} \quad (3.26)$$

の形に置き換える。右端境界において ϕ_{JX+2} が与えられているとすると、

$$-\phi_{JX} + 2\phi_{JX+1} = R_{JX+1} + \phi_{JX+2} \equiv R_{JX+1}^* \quad (3.27)$$

$$\phi_{JX+1} = P_{JX+1} + Q_{JX+1}\phi_{JX} = \frac{R_{JX+1}^*}{2} + \frac{\phi_{JX}}{2} \quad (3.28)$$

したがって、

$$P_{JX+1} = \frac{R_{JX+1}^*}{2} \quad (3.29)$$

$$Q_{JX+1} = \frac{1}{2} \quad (3.30)$$

次に $-\phi_{j-1} + 2\phi_j - \phi_{j+1} = R_j$ より、

$$-\phi_{j-1} + 2\phi_j - (P_{j+1} + Q_{j+1}\phi_j) = R_j \quad (3.31)$$

$$\phi_j = P_j + Q_j\phi_{j-1} = \frac{P_{j+1} + R_j}{2 - Q_{j+1}} + \frac{\phi_{j-1}}{2 - Q_{j+1}} \quad (3.32)$$

したがって、

$$P_j = \frac{P_{j+1} + R_j}{2 - Q_{j+1}} \quad (3.33)$$

$$Q_j = \frac{1}{2 - Q_{j+1}} \quad (3.34)$$

このように P_j, Q_j は後退代入によって求まる。 P_j, Q_j が全て求まっており、また左端境界の ϕ_2 が与えられているとすると、式(3.26)から前進代入によって ϕ_j ($j = 3, 4, \dots, JX + 1$) が求まる。

左端境界が対称点境界、 $\partial\phi/\partial x = 0$ ($\phi_1 = \phi_3$) のときは、式(2.46)から

$$-\phi_1 + 2\phi_2 - \phi_3 = R_2 \quad (3.35)$$

変形して、

$$\phi_3 = \phi_2 - R_2/2 \quad (3.36)$$

一方、式(3.26)より

$$\phi_3 = P_3 + Q_3\phi_2 \quad (3.37)$$

の関係があるので、この2式より、 $\phi_2 = (P_3 + R_2/2)/(1 - Q_3)$ が決まる。式(3.26)から前進代入により ϕ_j ($j = 3, 4, \dots, JX + 1$) が求まる。

3.6 数値的乱数

3.6.1 一様乱数

PARASOL コードで利用する乱数は、線形合同法による一様乱数 R (0 と 1 の間に一様に分布している乱数) を基礎とする。

$$R_{n+1} \equiv aR_n + b \quad (n = 0, 1, \dots \bmod m)$$

ここに a, b, m は適当に選ばれた非負の整数である。一般に、32bit 電子計算機では、法 m は 2^{31} となる。PARASOL コード内では次のように設定されている。

$$\begin{cases} a &= 32771 \\ b &= 1234567891 \\ m &= 2147483647 \end{cases}$$

PARASOL コード高並列計算機バージョンは SPMD (Single Program Multiple Data) モデルによるメッシュ領域分割法で並列化されていて、複数の計算ノードを利用して大規模計算を行なうことができる（後述）。各計算領域で同じ乱数値が発生することを避ける目的から、次のように計算ノード毎に異なる種乱数 R_0 を決める。

$$R_0 = \frac{i\text{rank} + 1}{i\text{size} + 1} \times m$$

ここで、 $i\text{rank}$ は 0 から数える自ノード番号、 $i\text{size}$ は計算総ノード数である。

3.6.2 正規乱数

正規乱数は、上述の一様乱数を用いて正規分布テーブルを参照、さらに別の一様乱数とともに符号を決めて生成する。この正規分布テーブルは 0 から最大 4 までの値を取り、分散は 1、標本点数は 3000 であって、コード実行時に一度だけ生成される。

4 PARASOL の概要

PARASOL コードは ANSI Fortran 77 規格にしたがってコーディングされており、2000 年現在のバージョンは超並列計算機 Paragon XP/S15-256 (Operating System : Paragon OSF/1 Release 1.4.7, Compiler : if77) での動作を前提としている。PARASOL コードのロードモジュール作成には、Paragon システムで利用される NX ライブラリ、MPI ライブラリのリンクが必要である。

以下、PARASOL コードの概要を示す。4.1節、4.2節では主プログラムのフローチャートと副プログラムの一覧を、4.3節ではプログラムツリー構造を示す。PARASOL コードを実行する上で必要となる入力パラメータについては 4.4節で、4.5では PARASOL コードのプロットファイル出力の一覧を示す。PARASOL コードが行なう静的配列宣言により設定される配列寸法について 4.6節で示す。4.7節では PARASOL コードの並列化について、その概要を示す。

4.1 プログラムフロー

図 4.1 に、PARASOL コードの主プログラムにおける処理のフローチャートと、それに対応する副プログラム名を示す。

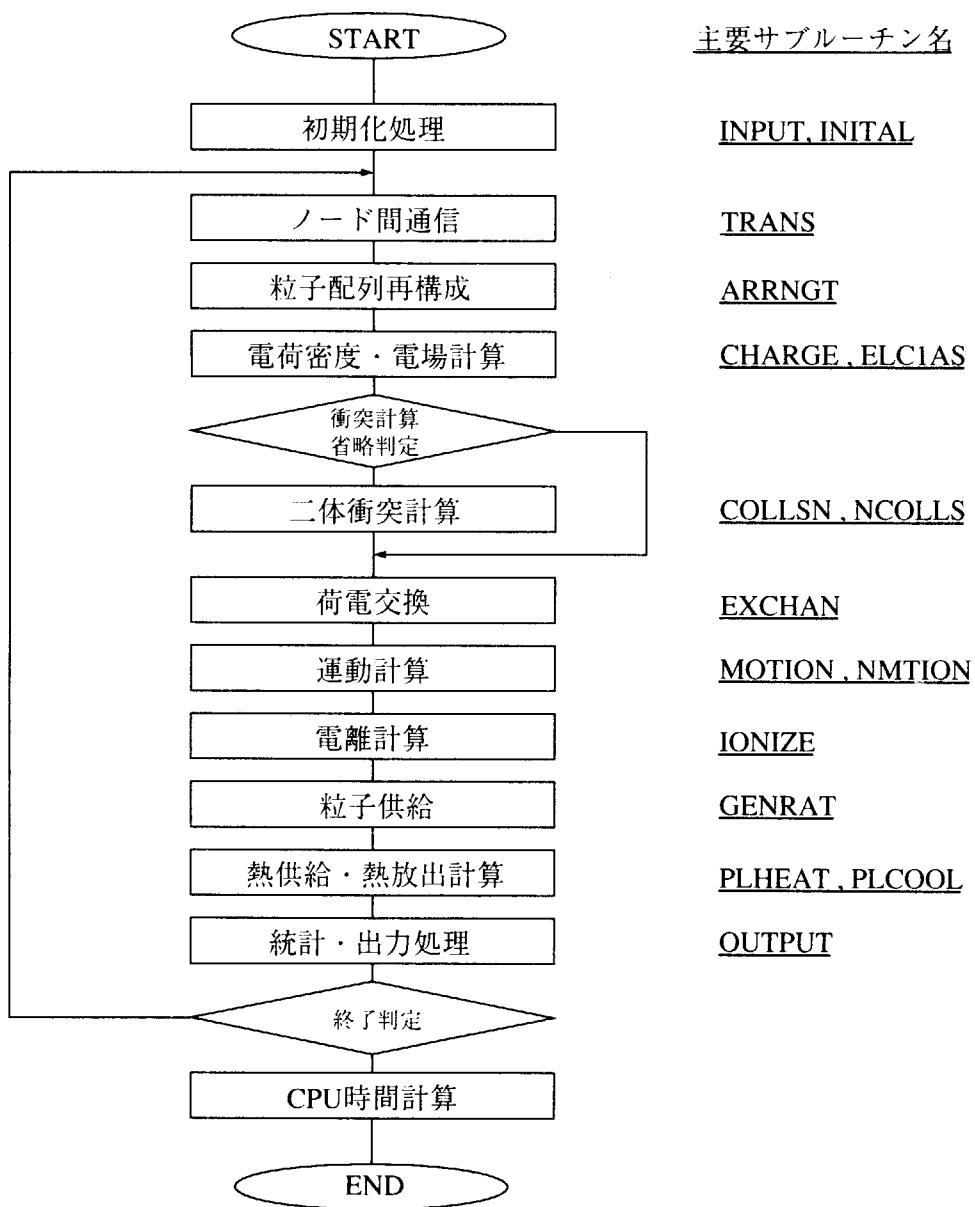


図 4.1: プログラムフロー

4.2 モジュール一覧

本節では PARASOL コードのモジュール一覧とその概要を示す。以下、種類の欄にある英字は、それぞれ主プログラム (M) , 副プログラム (S) , 関数副プログラム (F) を示す。関数副プログラムの型は REAL*4 である。表中の記号'→'と'←'は上位モジュールから引用されることを示す (REDFN から VLCORD までのモジュールについては引用関係表示を省略する)。

名前	種類	内容
MAIN	M	PARASOL の主コントロール
INPUT	S	計算パラメータ入力
→ PLTDA1	S	プロット出力 (計算パラメータ)
INITAL	S	初期化処理 (粒子の初期位置と速度の設定, 統計処理配列の初期化等)
→ RMTBL	S	正規分布データテーブルと三角関数データテーブルの設定
TRANS	S	ノード間通信 (粒子情報) の主コントロール
→ TRANSA	S	ノード間通信 (粒子情報) のコントロール
→ TRANSB	S	ノード間通信 (粒子移動)
→ TRANSG	S	ノード間通信 (粒子供給)
ARRNGT	S	粒子配列再構成の主コントロール
→ ARRNG	S	粒子配列をメッシュ番号の昇順に再構成する。
→ ARRNGR	S	粒子配列をメッシュ内でランダムに再構成する。
CHARGE	S	電荷密度の計算 (§3.4)
ELC1AS	S	電場計算 (§3.5)
→ ELC1BC	S	SOL 電流制御のための両側ダイバータ間電位差計算
COLLSN	S	荷電粒子間衝突計算 (クーロン衝突) の主コントロール (§2.5)
→ COLL1	S	荷電粒子間衝突計算 (クーロン衝突) に関する粒子選択
→ COLL2	S	荷電粒子間衝突計算 (クーロン衝突)
NCOLLS	S	中性粒子間衝突計算 (弹性衝突) に関する粒子選択
→ COLL3	S	中性粒子間衝突計算 (弹性衝突)
EXCHAN	S	荷電交換処理の主コントロール (§2.7)
→ EXCHN	S	荷電交換計算
MOTION	S	荷電粒子運動計算 (旋回中心運動と旋回運動) (§2.2)
→ MATRIX	S	3 元連立 1 次方程式を解く。
NMTION	S	中性粒子運動計算 (直線運動) (§2.7)
IONIZE	S	電離計算 (§2.7)

名前	種類	内容
GENRAT	S	荷電粒子・中性粒子供給計算 (§2.6)
→ DISPOS	S	ホットソースの発生位置設定
→ DISPO2	S	コールドソースの発生位置設定
PLHEAT	S	プラズマの熱供給計算 (§2.6)
PLCOOL	S	プラズマの熱放出計算 (§2.6)
MAXWEL	S	マクスウェル-ボルツマン速度分布則に従う速度設定 (§2.6.4) ← INITAL, GENRAT, PLHEAT
VLCORD	S	速度座標変換 (§2.2.3) ← INITAL, CHARGE, COLLSN, EXCHN, MOTION, NMOTION, GENRAT, IONIZE, PLHEAT, PLCOOL, DSMEAN
OUTPUT	S	プロットデータ出力の主コントロール
→ DSMEAN	S	プロットデータ計算 (速度分布)
→ HEADNG	S	計算中の粒子数情報をリスト出力する。
→ OUTPRT	S	統計データのリスト出力
→ PLTDA3	S	プロット出力 (メッシュデータ)
→ PLTDA4	S	プロット出力 (速度分布データ)
→ PLTDA5	S	プロット主力 (静電ポテンシャルの時系列データ)
→ PLTDA6	S	プロット出力 (壁消失粒子データ)
→ PLTDA7	S	プロット出力 (動画用粒子データ)
→ PLTDA8	S	プロット出力 (動画用メッシュデータ)
→ PLTDA9	S	プロット出力 (動画用速度分布データ)
→ PLTD10	S	プロット出力 (動画用壁消失粒子データ)
→ REDUCE	S	ノード間通信 (統計データ) と, PE#0からのプロット出力
→ GATHRV	S	ノード間通信 (統計データ) と, PE#0からのプロット出力
REDFN	S	外部ファイルに装置機番を割り当てる。
RANDOM	F	一様乱数の生成 (§3.6.1)
RANDG	F	正規乱数の生成 (§3.6.2)
GAUSS	S	正規分布データテーブルの配列番号を設定する。

4.3 プログラムツリー

以下、プログラムツリー構造図を示す。一様乱数生成モジュールについては表記を割愛する。

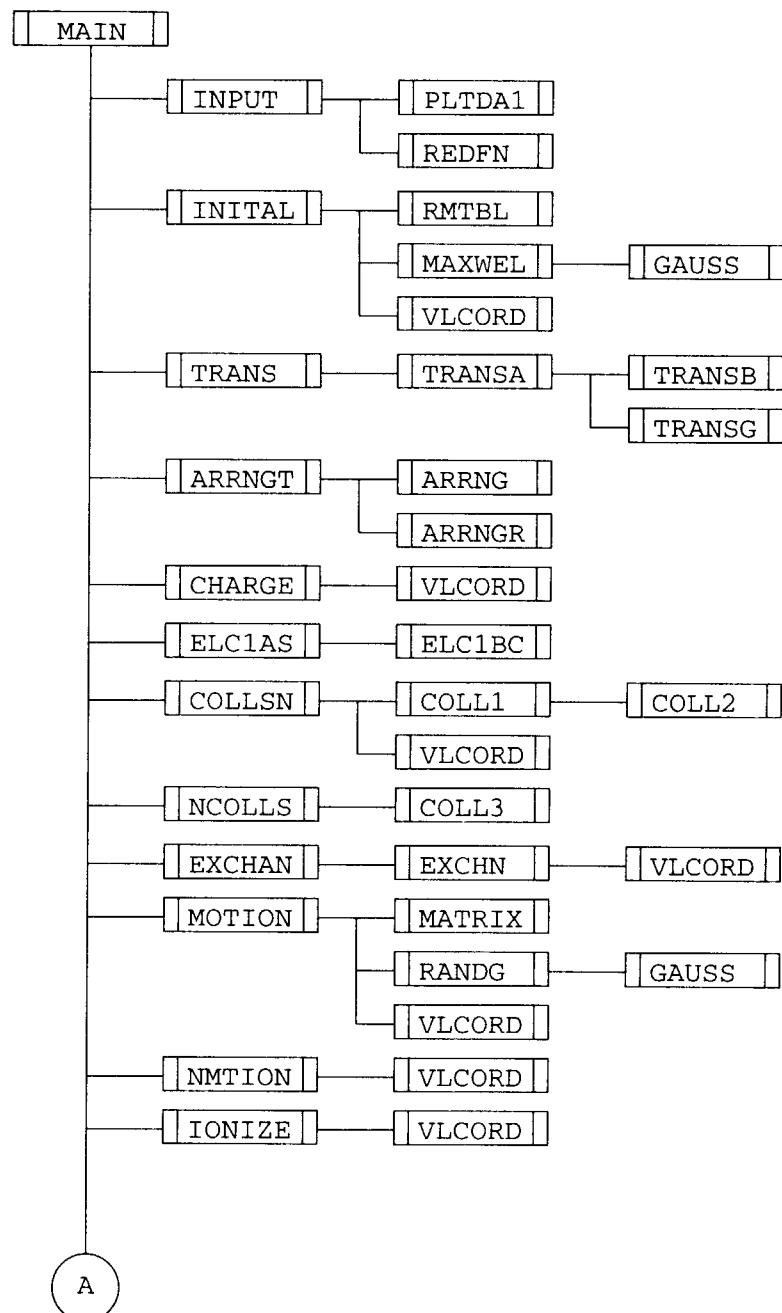


図 4.2: プログラムツリー構造

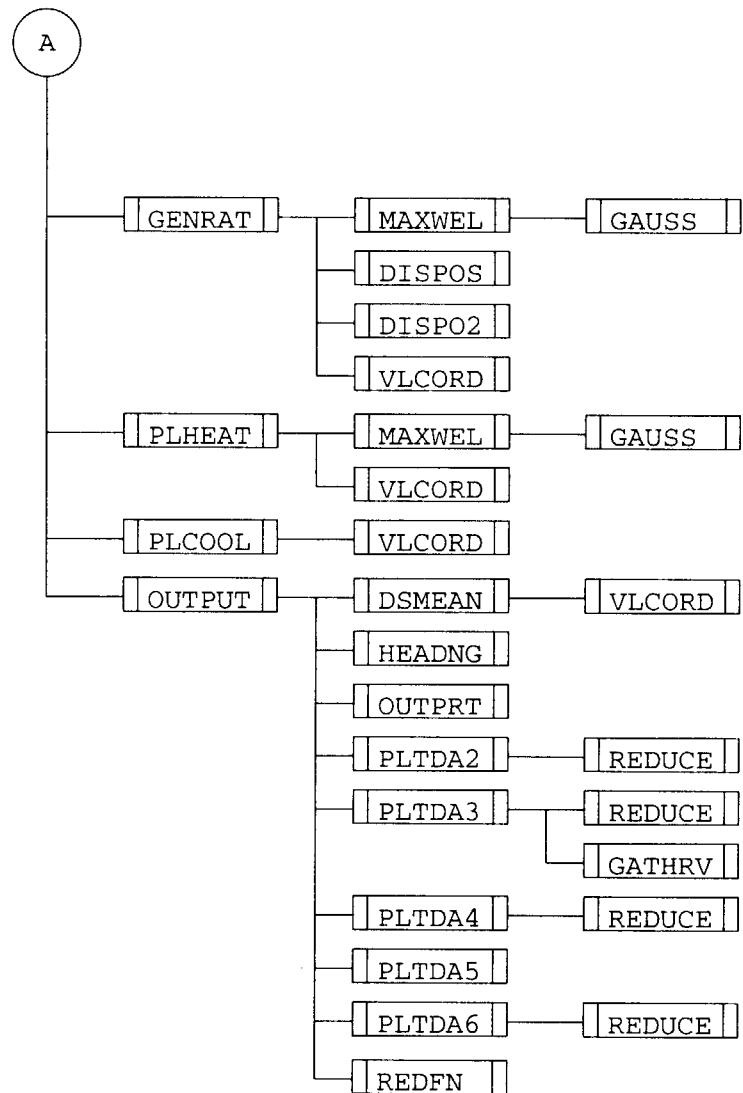


図 4.3: プログラムツリー構造（続き）

4.4 入力パラメータ

各パラメータは、装置機番5（標準入力）からネームリスト形式で渡される。入力されるネームリストFORTRAN記録はCARD01～CARD10まであって、ネームリスト文と、その入力処理は副プログラムINPUTで実行される。

ネームリスト: CARD01

項目	型	COMMON	意味
TITLE	40C	TITL	計算タイトル

ネームリスト: CARD02

項目	型	COMMON	意味
N0	I*4		荷電粒子数
N0N	I*4		中性粒子数

ネームリスト: CARD03

項目	型	COMMON	意味
MDISKI	I*4	DISK	リスタートファイル入力制御 ≠0：リスタート計算を行う。
MDISKO	I*4	DISK	リスタートファイル出力制御 ≠0：リスタート計算用ファイル出力を行う。
IPLOPT	I*4	DISK	プロットファイル出力制御 >0：アスキー形式出力 =0：バイナリー形式出力 <0：出力なし
KTMX	I*4	BCKK	計算タイムステップ数
KTPR	I*4	BCKK	プロット出力オプション =1：時間平均値出力 =3：時間平均値出力、および長時間平均値出力
KTPR0	I*4	BCKK	プロット出力開始ステップ
KTPR1	I*4	BCKK	プロット主力最終ステップ
KTPR2	I*4	BCKK	時間平均値間隔

ネームリスト: CARD03(続き)

項目	型	COMMON	意味
KTPR3	I*4	BCKK	長時間平均値間隔
KCOLS	I*4	STEPC	衝突計算の頻度 (KCOLS ステップに一度の計算)
MKFLG	I*4	MARK	動画ファイル出力制御 > 0: アスキーフォーマット出力 = 0: バイナリーフォーマット出力 < 0: 出力なし
MKMS0	I*4	MARK	追跡粒子選択のための領域指定 (メッシュ番号)
MKMS1	I*4	MARK	追跡粒子選択のための領域指定 (メッシュ番号) MKMS0 < MKMS1
KMNA	I*4	MARK	時間平均値間隔 (動画用)
RTMRK	R*4	MARK	追跡粒子選択確率 $0 < \text{RTMRK} < 1$

ネームリスト: CARD04

項目	型	COMMON	意味
N1	I*4	PLMESH	プロット出力領域指定 (メッシュ番号)
N2	I*4	PLMESH	プロット出力領域指定 (メッシュ番号) N1 < N2
N2VP	I*4	PLMESH	プロット出力領域指定 (メッシュ番号) 最大値計算区間を指定する。

ネームリスト: CARD05

項目	型	COMMON	意味
JX	I*4	MESH	メッシュ数
JX0	I*4	MESH	粒子配置の初期領域
JCOLS	I*4	MESHC	衝突計算におけるメッシュ幅員
JCLES	I*4	MESHC	壁近傍の無衝突領域指定 (メッシュ数)

ネームリスト: CARD06

項目	型	COMMON	意味
RMIME	R*4	PLSM	イオン質量（電子比）
RTITE	R*4	PLSM	イオン温度（電子比）
RMNME	R*4	NEUTC	中性粒子質量（電子比）
RTNTE	R*4	NEUTC	中性粒子温度（電子比）
RMFPL	R*4	COLL	電子の平均自由行程長（システムサイズ比）
DXMS	R*4	MESH	メッシュサイズ
DT	R*4	TSTEP	タイムステップサイズ
PRBEX	R*4	NEUTC	荷電交換確率
GAMMA	R*4	IONIZ	電離確率
RLAMIL	R*4	IONIZ	中性粒子の平均自由行程長（プラズマ長比）
RTIWTI	R*4	IONIZ	発生イオンの温度（イオン比）

ネームリスト: CARD07

項目	型	COMMON	意味
GWIN	R*4	PLSM	壁に吸収された荷電粒子の再結合率
GAMMN	R*4	PLSM	壁に吸収された中性粒子の損失率
RTWNTI	R*4	NEUTC	発生中性粒子の温度（イオン比）
POSTN	R*4	NEUTC	壁から再生する中性粒子位置

ネームリスト: CARD08

項目	型	COMMON	意味
NRGN	I*4	VBNPS	速度分布プロットの領域分割数
NVM	I*4	VBNPS	速度分布プロット（ヒストグラム表示）の階級数
VMAX	R*4	VBNPS	速度分布プロットの表示最大速度
PKFCTA	R*4	INPUTC	速度分布プロットの水平方向スケールファクタ
PKFCTB	R*4	INPUTC	速度分布プロットの垂直方向スケールファクタ

ネームリスト: CARD08 (続き)

項目	型	COMMON	意味
PKFCT2	R*4	VBNP2	速度分布プロットのスケールファクタ
YMAX	R*4	VBNPS	ダイバータ板上熱流分布図の Y 軸方向最大値
NOSLC	10I*4	INPUTC	速度分布プロットの表示位置指定

ネームリスト: CARD09

項目	型	COMMON	意味
SORC	R*4	POSITN	粒子供給オプション = 0: 壁に吸収された粒子数により、荷電粒子対を供給 > 0: 供給する荷電粒子対数(定数)
XHOTA	R*4	POSITN	ホットソース発生領域指定(システム全長比)
XHOTB	R*4	POSITN	ホットソース発生領域指定(システム全長比) XHOTA < XHOTB
XIONA	R*4	IONNI	コールドソース発生領域指定(システム全長比)
XIONB	R*4	IONNI	コールドソース発生領域指定(システム全長比) XIONA < XIONB
RATE1	R*4	IONNI	コールドソース数(供給トータルソース比)
TE1	R*4	IONNI	コールドソースの電子温度
TI1	R*4	IONNI	コールドソースのイオン温度
EVI1	R*4	IONNI	イオンの平均流動エネルギー
PRBHT	R*4	EXENGY	熱供給確率
CDIFF	R*4	EXENGY	粒子拡散パラメータ $= \Delta_{dif}$
XCOOLA	R*4	PLENGY	熱放出領域指定(システム全長比)
XCOOLB	R*4	PLENGY	熱放出領域指定(システム全長比) XCOOLA < XCOOLB
HERATE	R*4	PLENGY	熱放出率(電子)
HIRATE	R*4	PLENGY	熱放出率(イオン)
ENGMIN	R*4	PLENGY	熱放出のエネルギー下限値(電子基準)

ネームリスト: CARD10

項目	型	COMMON	意味
THETA	R*4	MAGNET	ダイバータ板に対する磁力線の傾き $= B_x/B$
SLRMR	R*4	MAGNET	イオンのラーマ半径とシステム全長の比 $= \rho_i/L$
IFLAG	R*4	ELCFLD	電場 E_y の選択オプション $\leq 0 : E_y = E_0$ $> 0 : E_y = C\phi_x$
E0	R*4	ELCFLD	電場 E_y (定数値)
C	R*4	ELCFLD	電場 E_y (E_x に対する比)
GYRO	R*4	MAGNET	イオンの運動計算選択 $= 0 : $ 旋回中心運動 $\neq 0 : $ 旋回運動
EBJ0	R*4	CONDNS	SOL 電流制御における制御電流値
CVIMPD	R*4	CONDNS	ダイバータ間バイアス電圧に対する制御係数 $= 0 : $ SOL 電流制御無

型における C は 1 バイトの文字型, I*4 は 4 バイト整数型, R*4 は 4 バイト実数型である。非対称系 PARASOL コードにおいて有効でないパラメータは省略する。

4.5 計算結果出力

本節では出力一覧を示す。以下、機番とは外部装置識別子の参照番号を、図番号は次ページ以降の計算結果一覧に対応している。

項目		機番	図番号
計算パラメータ		11	4.4
粒子数、熱供給／放出量		13	4.5
静電ポテンシャル	ϕ	13	4.6
密度	$N (e,i)$	13	4.6
	$2(N_i - N_e)/(N_i + N_e)$	13	4.6
速度（磁力線平行成分）	$V_{ } (e,i)$	13	4.7
速度（x成分）	$V_x (e,i)$	13	4.7
	$V_x - \eta V_{ }$ ($\eta \equiv B_x/B$)		
トータルエネルギー	$\langle v^2/3 \rangle (e,i)$	13	4.8
エネルギー（磁力線垂直成分）	$\langle v_{\perp}^2/2 \rangle (e,i)$	13	4.8
エネルギー（磁力線平行成分）	$\langle (v_{\perp} - V_{\perp})^2 \rangle (e,i)$	13	4.8
エネルギーフロー（電子）	$\langle (v_{ } - V_{ })^3 \rangle, \langle (v_{ } - V_{ })v_{ }^2/2 \rangle$	13	4.9
エネルギーフロー（イオン）	$\langle (v_{ } - V_{ })^3 \rangle, \langle (v_{ } - V_{ })v_{ }^2/2 \rangle$ $\langle v_x v^2 \rangle$ $\langle v_x v^2 \rangle$	13	4.9
密度	$N (n)$	13	4.10
速度（磁力線平行成分）	$V (n)$	13	4.10
トータルエネルギー	$\langle v^2/3 \rangle (n)$	13	4.11
エネルギー（磁力線垂直成分）	$\langle v_{\perp}^2/2 \rangle (n)$	13	4.11
エネルギー（磁力線平行成分）	$\langle (v_{\perp} - V_{\perp})^2 \rangle (n)$	13	4.11
エネルギーフロー（中性粒子）	$\langle (v_{ } - V_{ })^3 \rangle, \langle (v_{ } - V_{ })v_{ }^2/2 \rangle$	13	4.11
速度分布（磁力線垂直／平行成分）		14	4.12 ~ 14
速度分布		14	4.15 ~ 17
静電ポテンシャルの時系列データ		15	4.18
壁流入粒子数のy方向分布		16	4.19
壁流入エネルギーのy方向分布		16	4.19

ここで、 N と V は時間平均値 $\langle n \rangle$, $\langle v \rangle$ を、 (e,i) および (n) はそれぞれ電子、イオン、中性粒子について出力処理のあることを示す。

次ページ以降に計算結果を示す。この結果は、文献[4]のために行なわれた多くのシミュレーションランのうちの1ランの結果である。

SCRAP-E-OFF PLASMA SIMULATION		RUN-DATE: 02-AUG-99
INPUT	DATA	
TITLE=	PLASMA SIMULATION(PARASOL)	
NO=	1000000	NON= 0
MDISK1=	0	MDISK0= 3
KTMX=	300000	KTPR= 1
KCOLS=	1	KTPR0= 1
N1=	1	N2= 800
JX=	800	JX0= 788
RMIME=	400	RTITE= 0.5
RMFPL=	3	DXMS= 0.5
PRBEX=	0	
GAMMA=	0.001	PLAMIL= 0.15
IRECYC=	0	RTWTI= 0.01
GWIN=	0	GAMMIN= 0.2
NRGN=	10	NVM= 20
VMAX=	3.5	PKFTA= 800
NOSLC=	1000010001	PKFTB= 800 PKFT2= 1 YMAY = 200
SORC=	0	
XHOTAA=	0.4	XHOTB= 0.6
XIONA=	0.5	XIONB= 0.75 RATE1= 0
TE1=	0.01	TI1= 0.05 EVI1= 0
PRBHT=	0	CDIFF= 0.05
XCOOLA=	0	XCOOLB= 0 HERATE= 0 HIRATE= 0 ENGMIN= 0
THETA=	0.2	SLRMRE= 0.004
IFLAG=	0	E0= 0 C= 0

図 4.4: 計算結果出力図 (1)

TIME STEP 30000 (TIME AVERAGED VALUE OVER 1000 TIME STEPS)	
CALCULATION PARAMETERS	
(MESH SIZE)/(INITIAL DEBYE LENGTH)	= 0.5
NUMBER OF MESH	= 800
NUMBER OF COLLISIONLESS MESH	= 8
COLLISION SKIP STEP	= 1
MESHS FOR COLLISION PAIR	= 2
RATIO OF ION MASS TO ELECTRON MASS	= 400
RATIO OF ION ELECTRON MEAN FREE PATH TO SYSTEM LENGTH	= 3
RECYCLE RATIO	= 0.001
< NUMBER OF >	
CURRENT TOTAL	IONS 98773
TOTAL LOST	NEUTRAL 100000
BY MOTION	IONS 81762
BY IONIZE	NEUTRAL 81762
TOTAL GENERATED	IONS 81635
BY MOTION	NEUTRAL 0
BY IONIZE	IONS 0
BY GENRAT	NEUTRAL 81635
< AVERAGE OF >	
VELOCITIES	IONS 0.000447444
VELOCITIES SQUARES	IONS 0.731138
 	
CENTER	
ENERGY RELEASE [PARALLEL]	ELECTRONS 0
ENERGY RELEASE [VERTICAL]	IONS 0
ENERGY EXCHANGE [PARALLEL]	ELECTRONS 0
ENERGY EXCHANGE [VERTICAL]	IONS 0
NUMBER OF ENERGY RELEASE	ELECTRONS 0
TOTAL NUMBER IN THE REGION	IONS 0
NUMBER OF ENERGY EXCHANGE	ELECTRONS 0
TOTAL NUMBER IN THE REGION	IONS 0
TOTAL	
ENERGY RELEASE [PARALLEL]	ELECTRONS 0
ENERGY RELEASE [VERTICAL]	IONS 0
ENERGY EXCHANGE [PARALLEL]	ELECTRONS 0
ENERGY EXCHANGE [VERTICAL]	IONS 0

図 4.5: 計算結果出力図 (2)

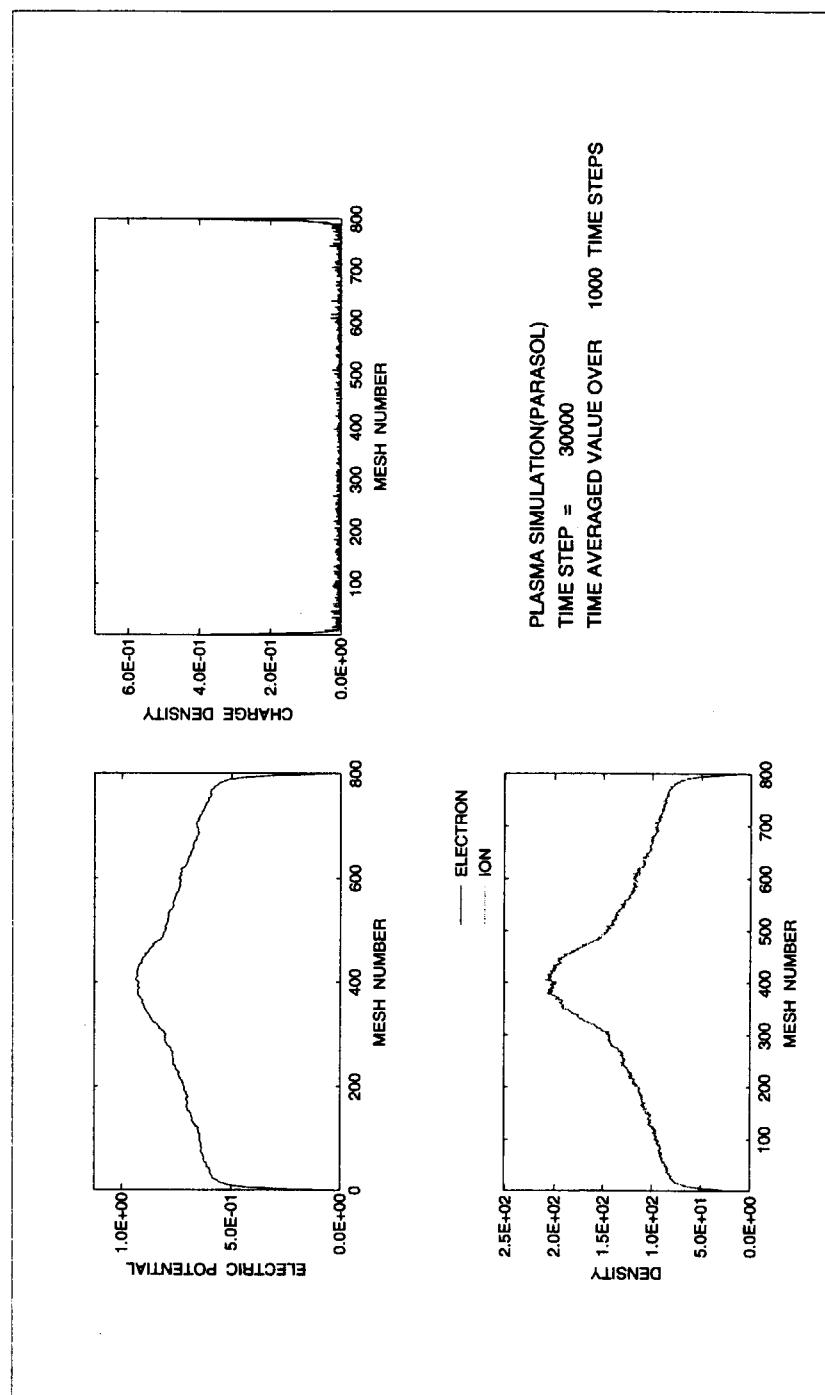


図 4.6: 計算結果出力図 (3)

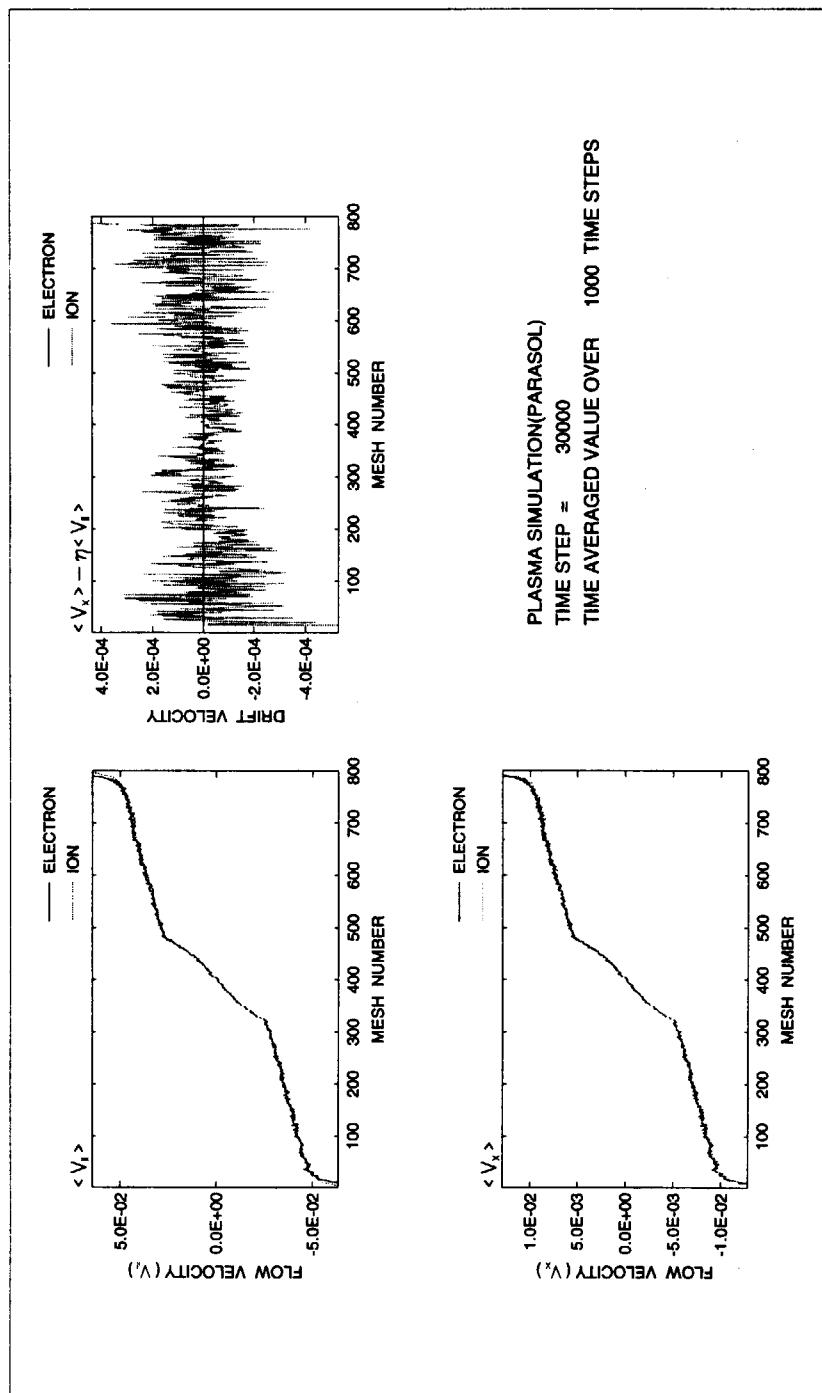


図 4.7: 計算結果出力図 (4)

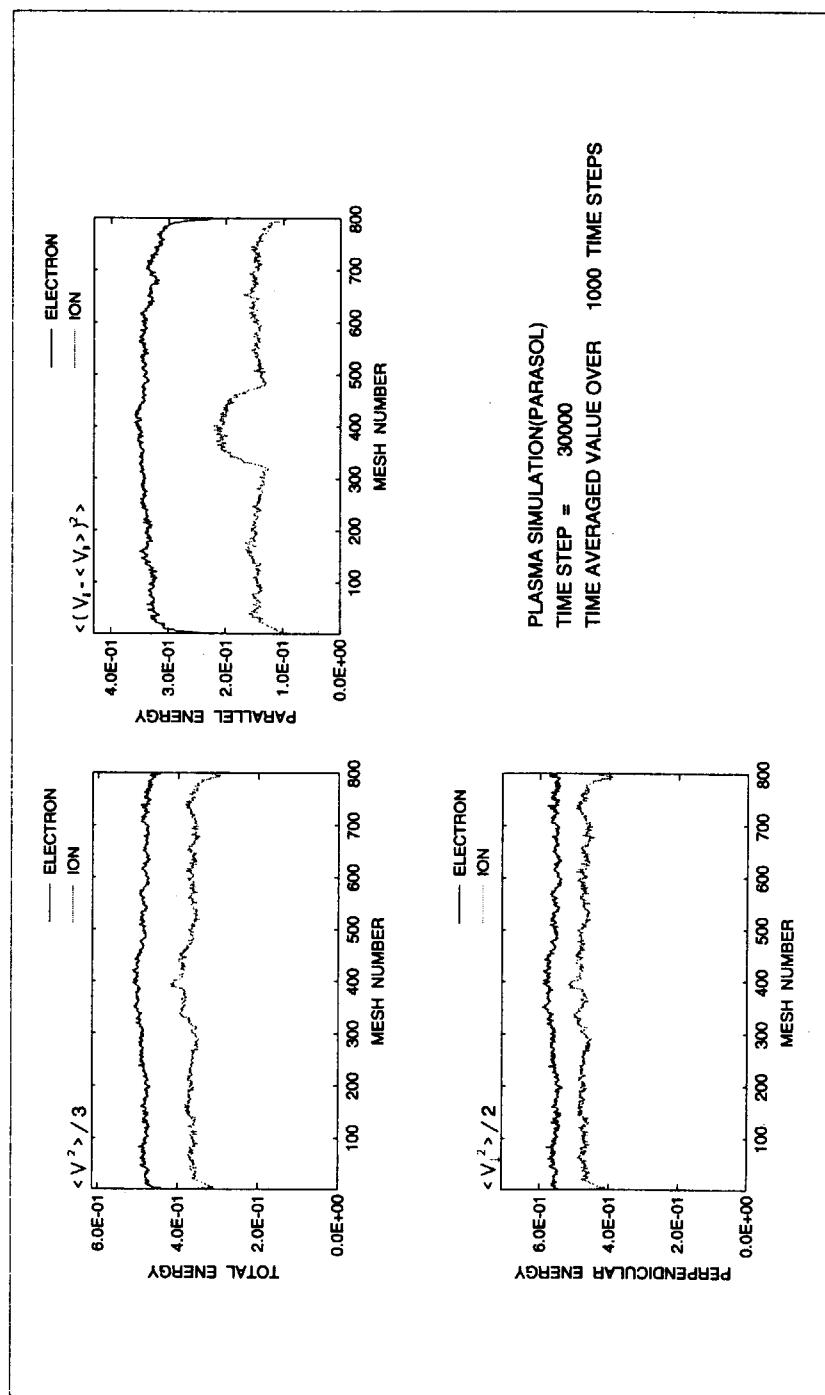


図 4.8 計算結果出力図 (5)

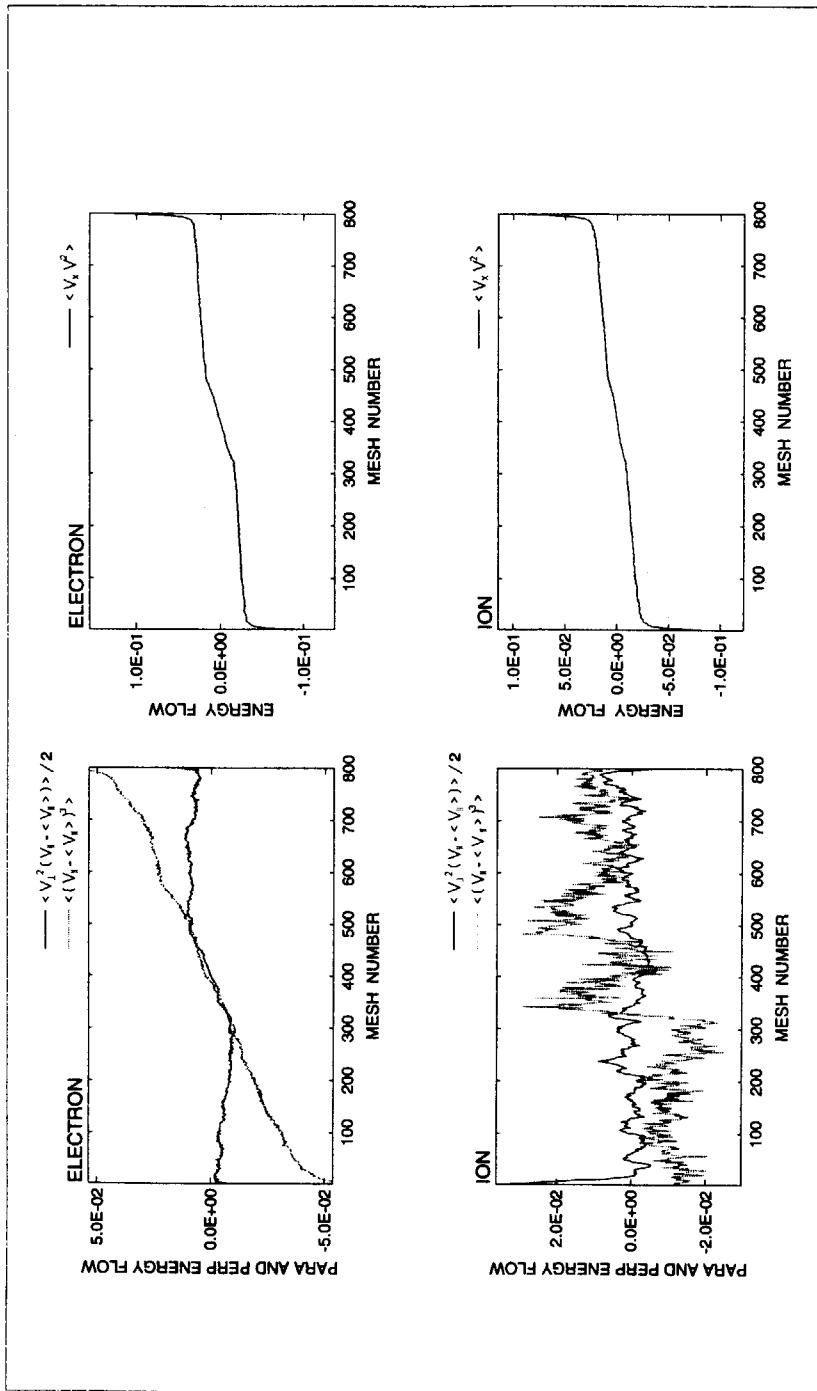


図 4.9: 計算結果出力図 (6)

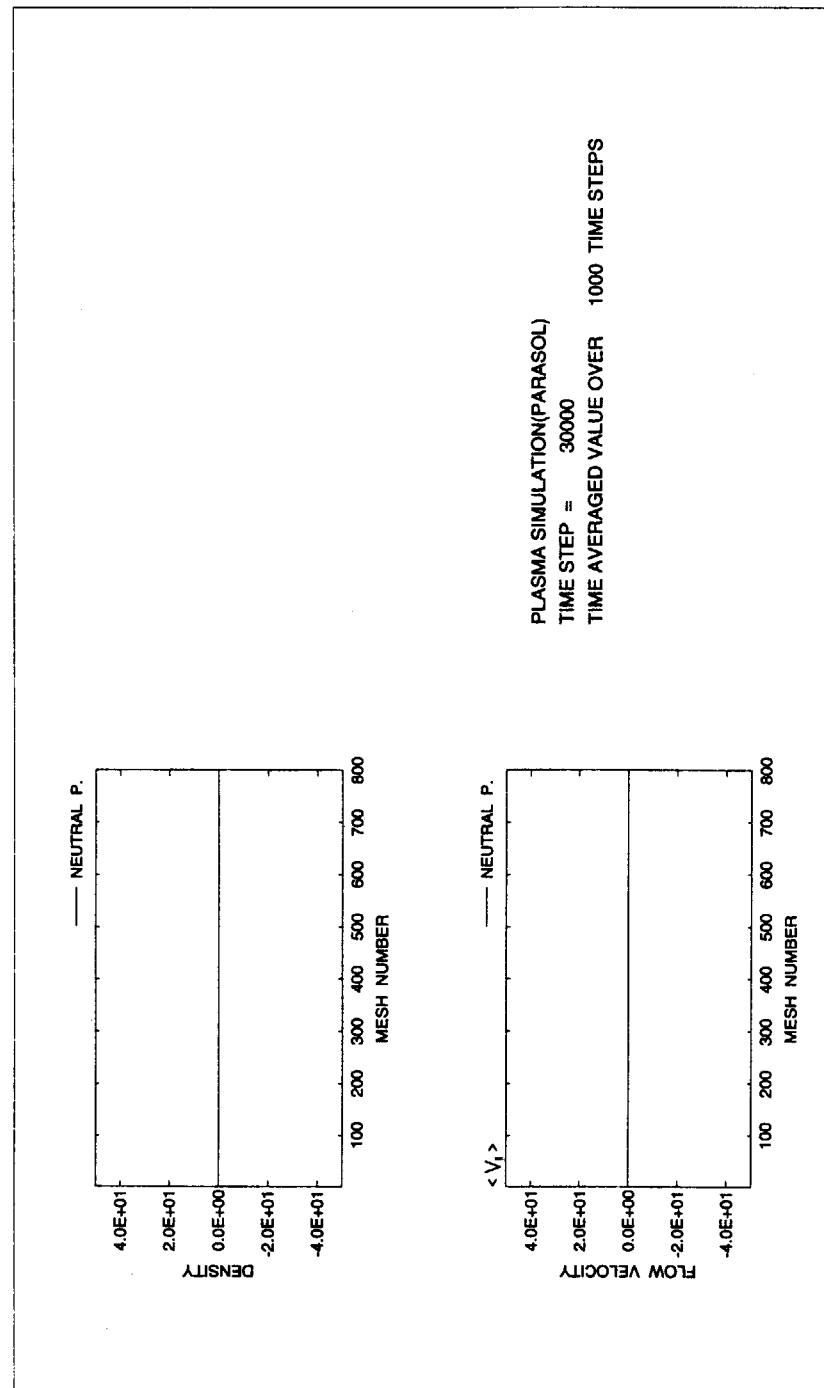


図 4.10: 計算結果出力図 (7)

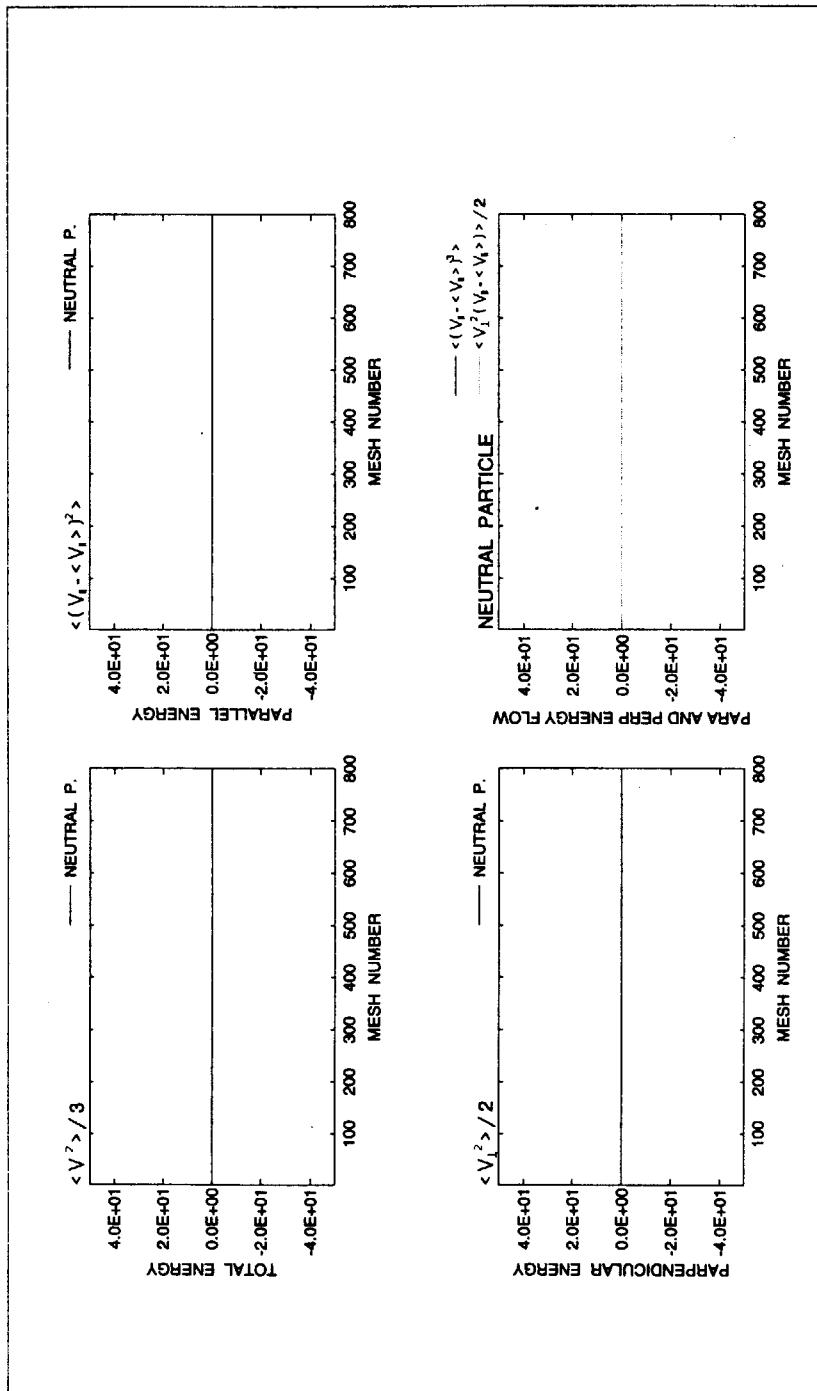


図 4.11: 計算結果出力図 (8)

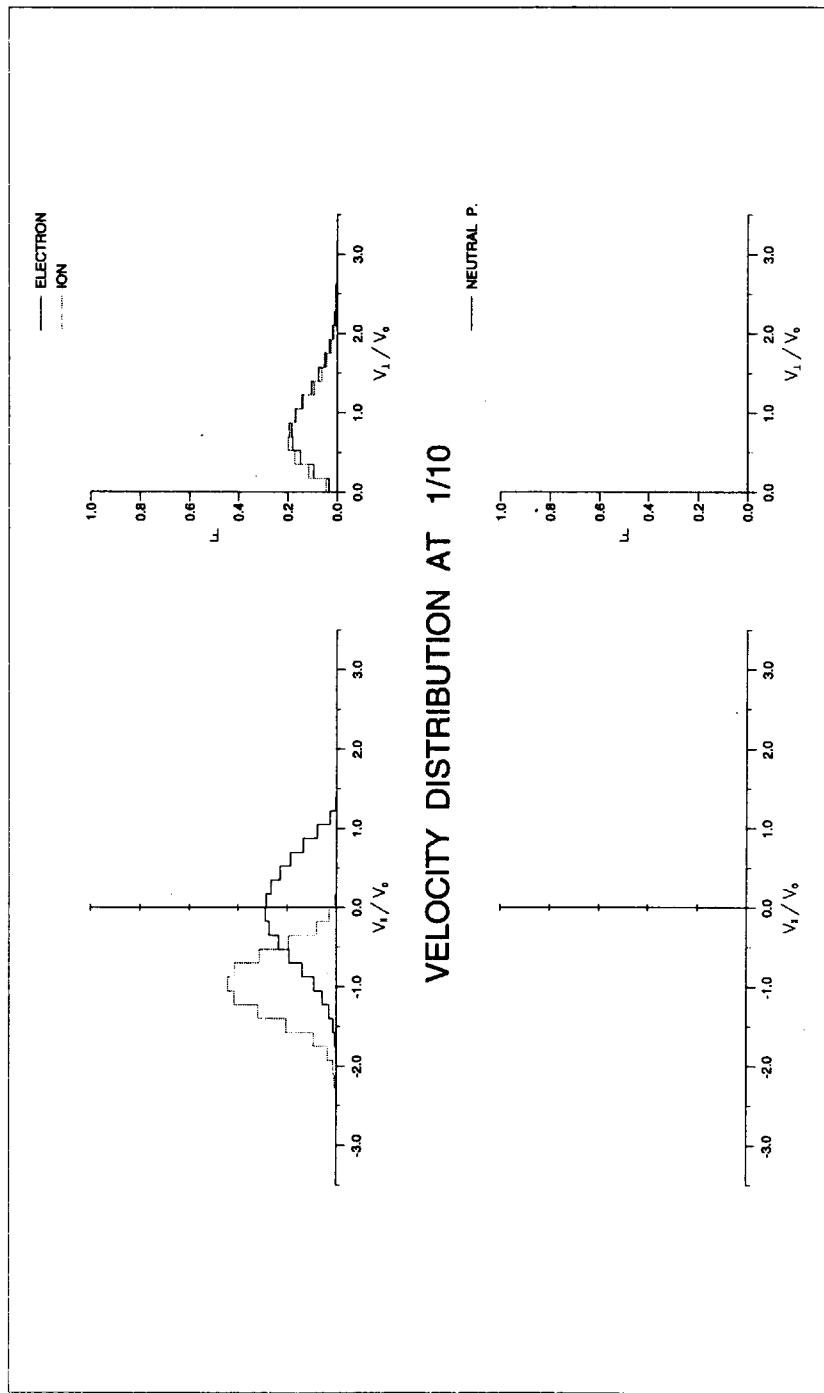


図 4.12: 計算結果出力図 (9)

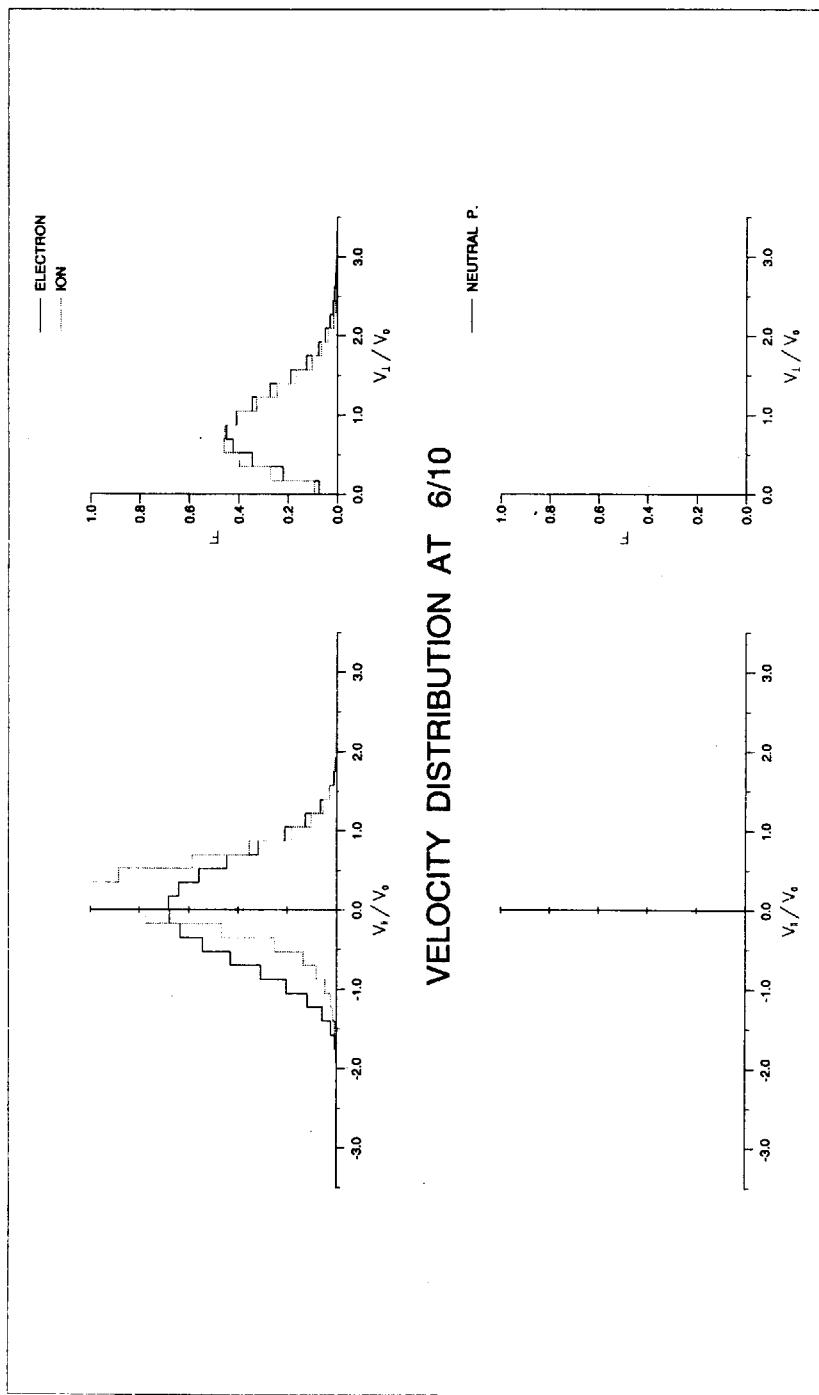


図 4.13: 計算結果出力図 (10)

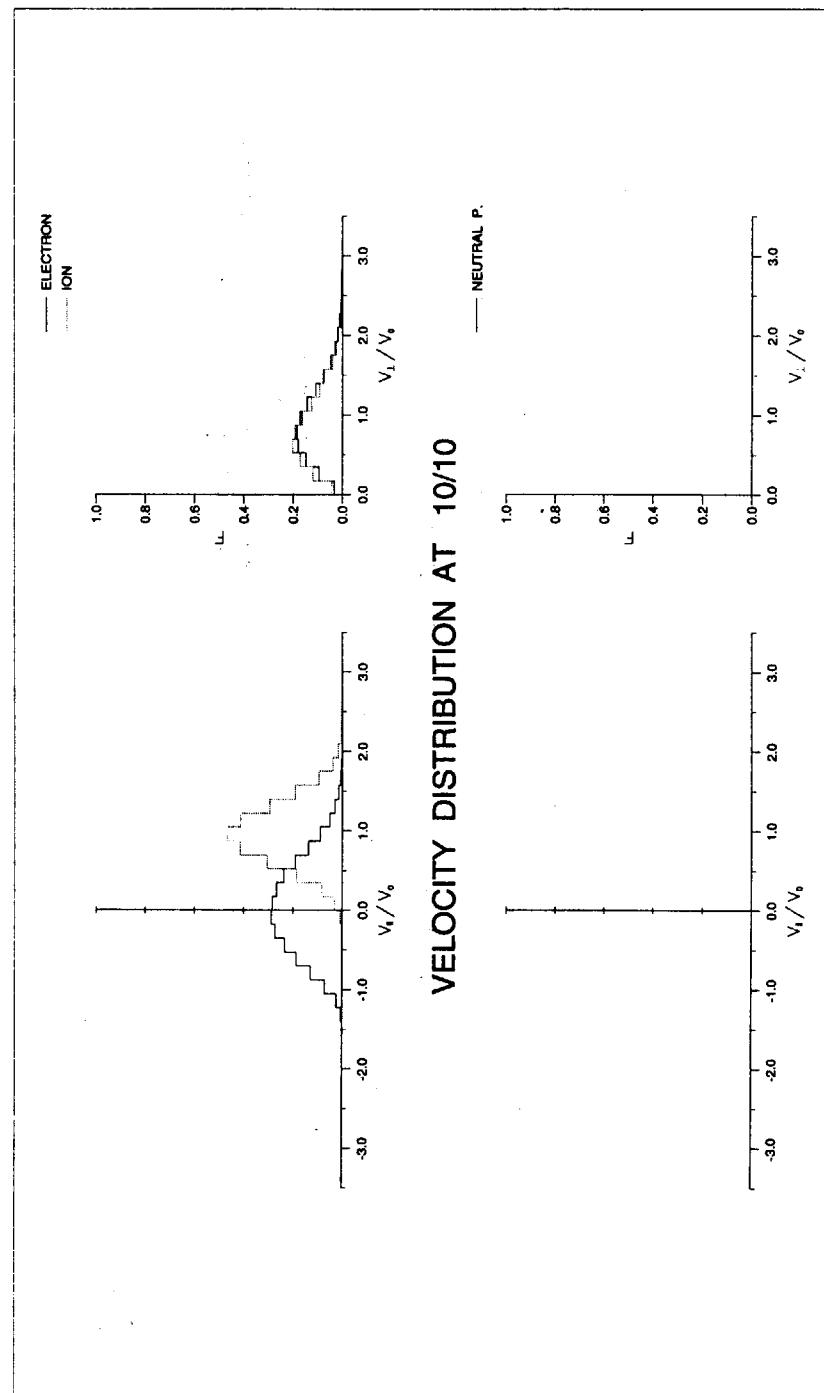


図 4.14: 計算結果出力図 (11)

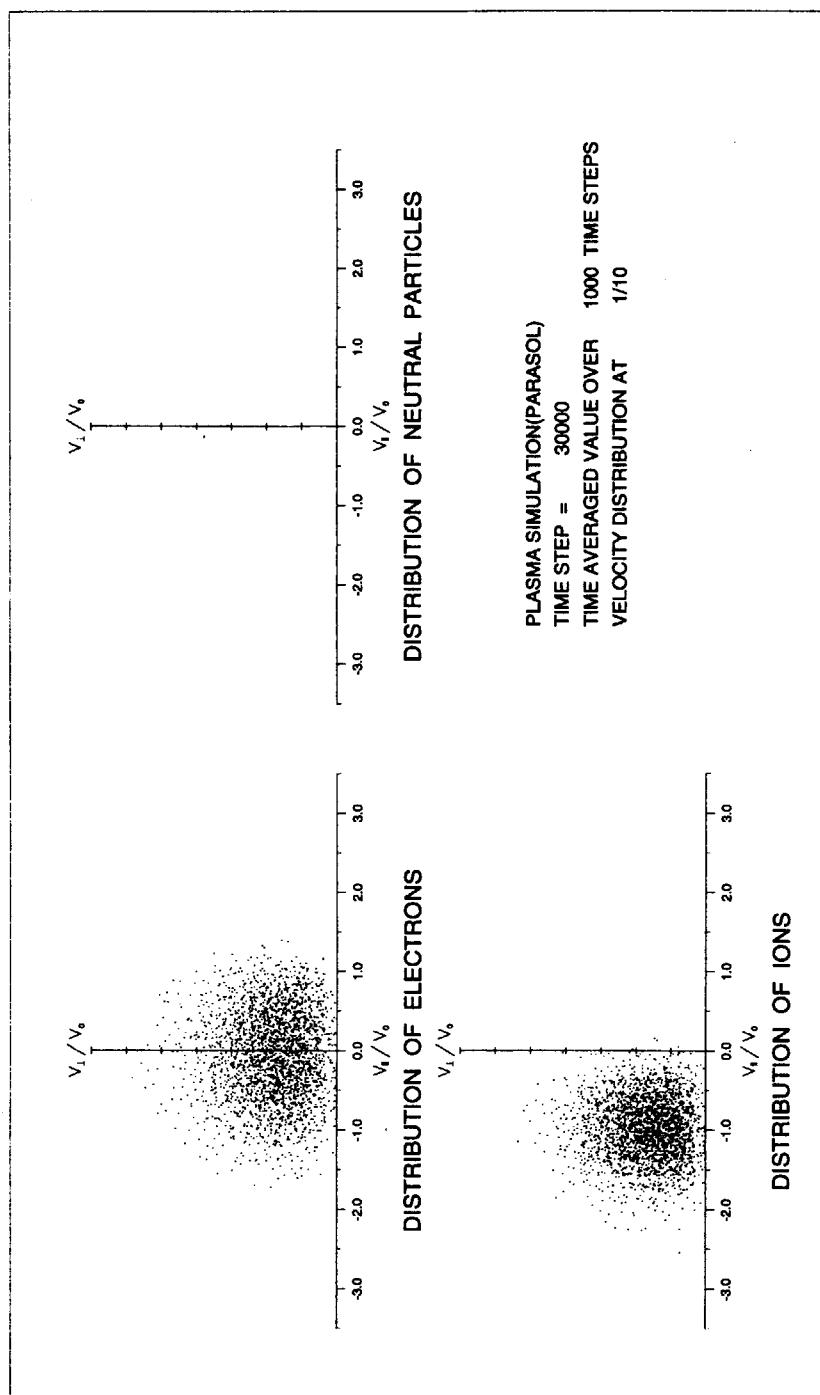


図 4.15: 計算結果出力図 (12)

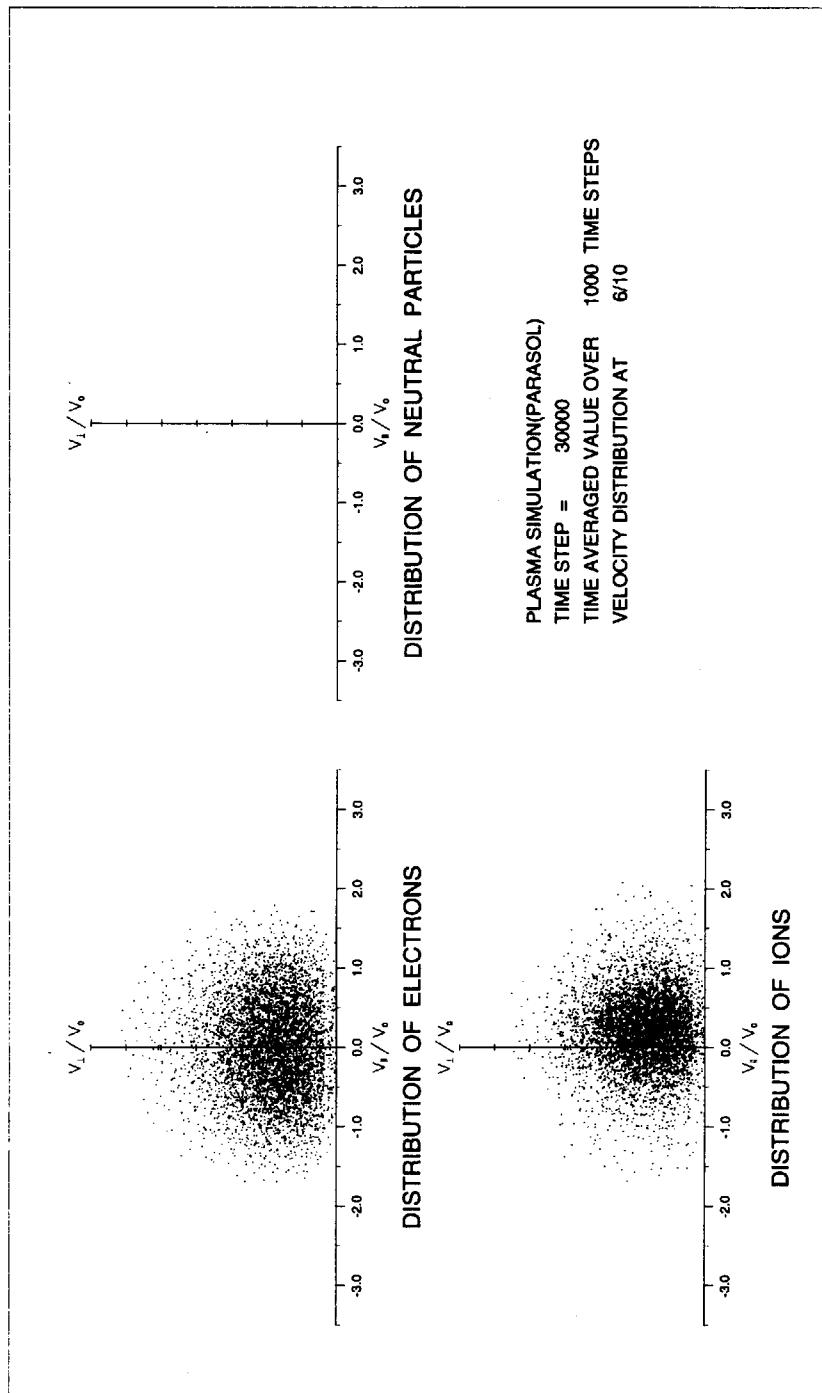


図 4.16: 計算結果出力図 (13)

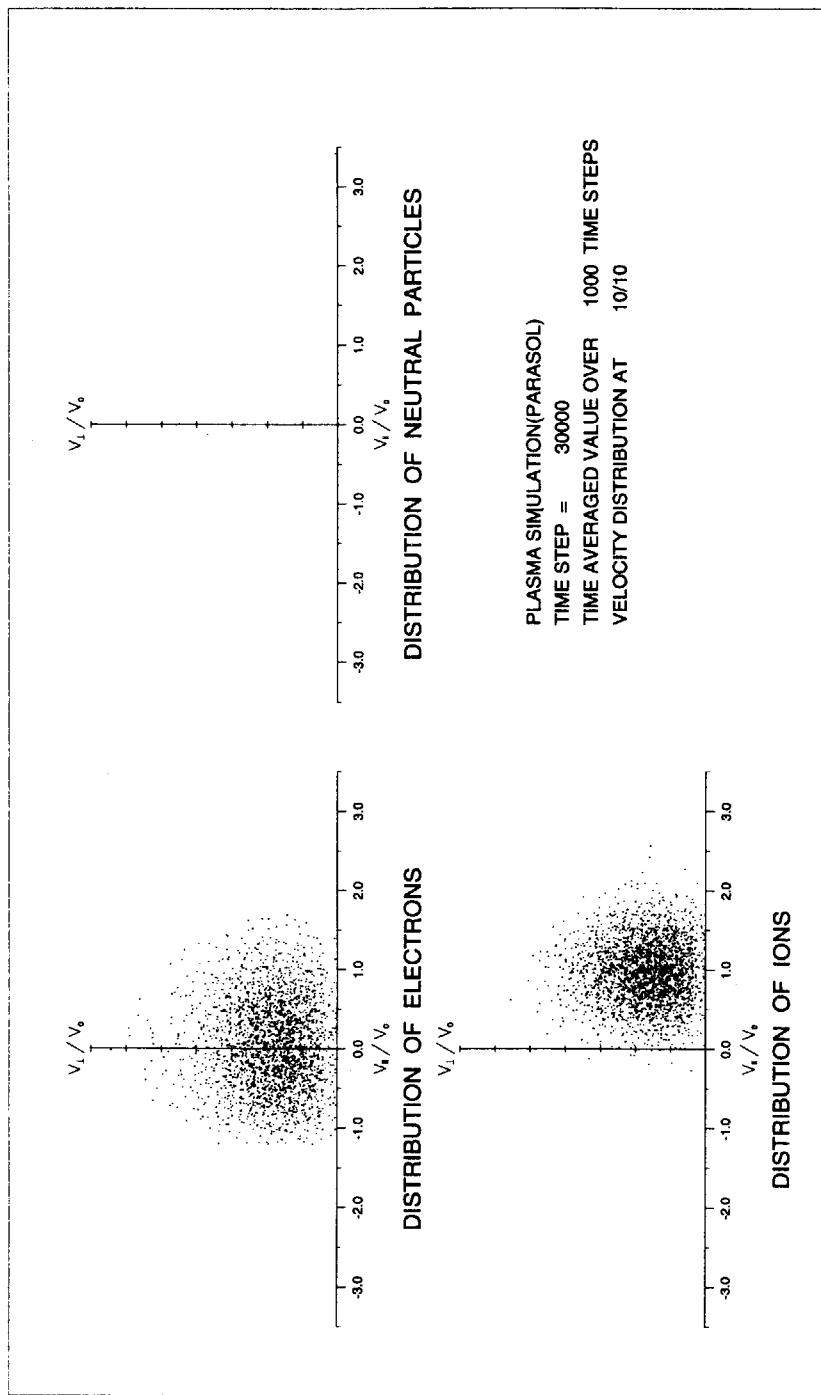


図 4.17: 計算結果出力図 (14)

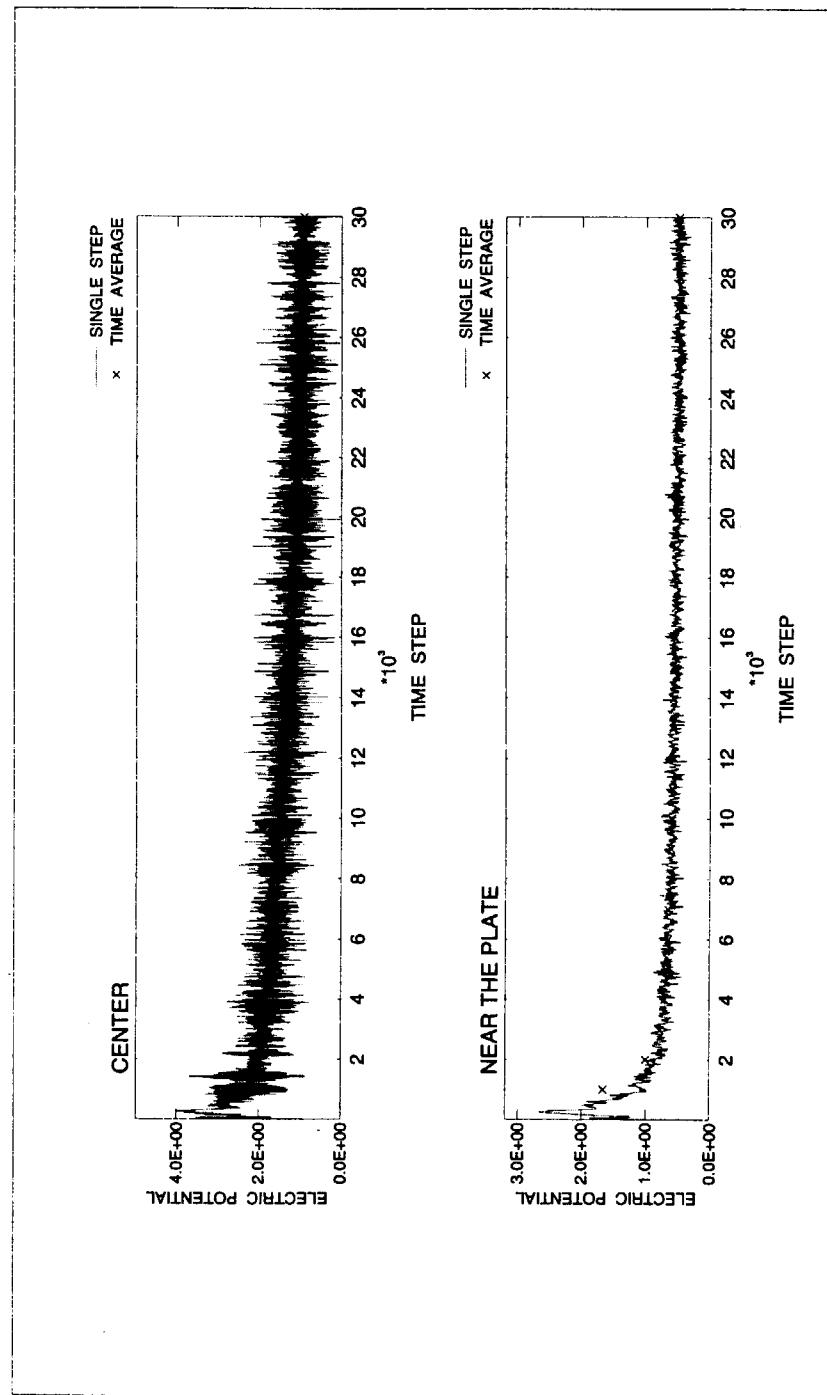


図 4.18: 計算結果出力図 (15)

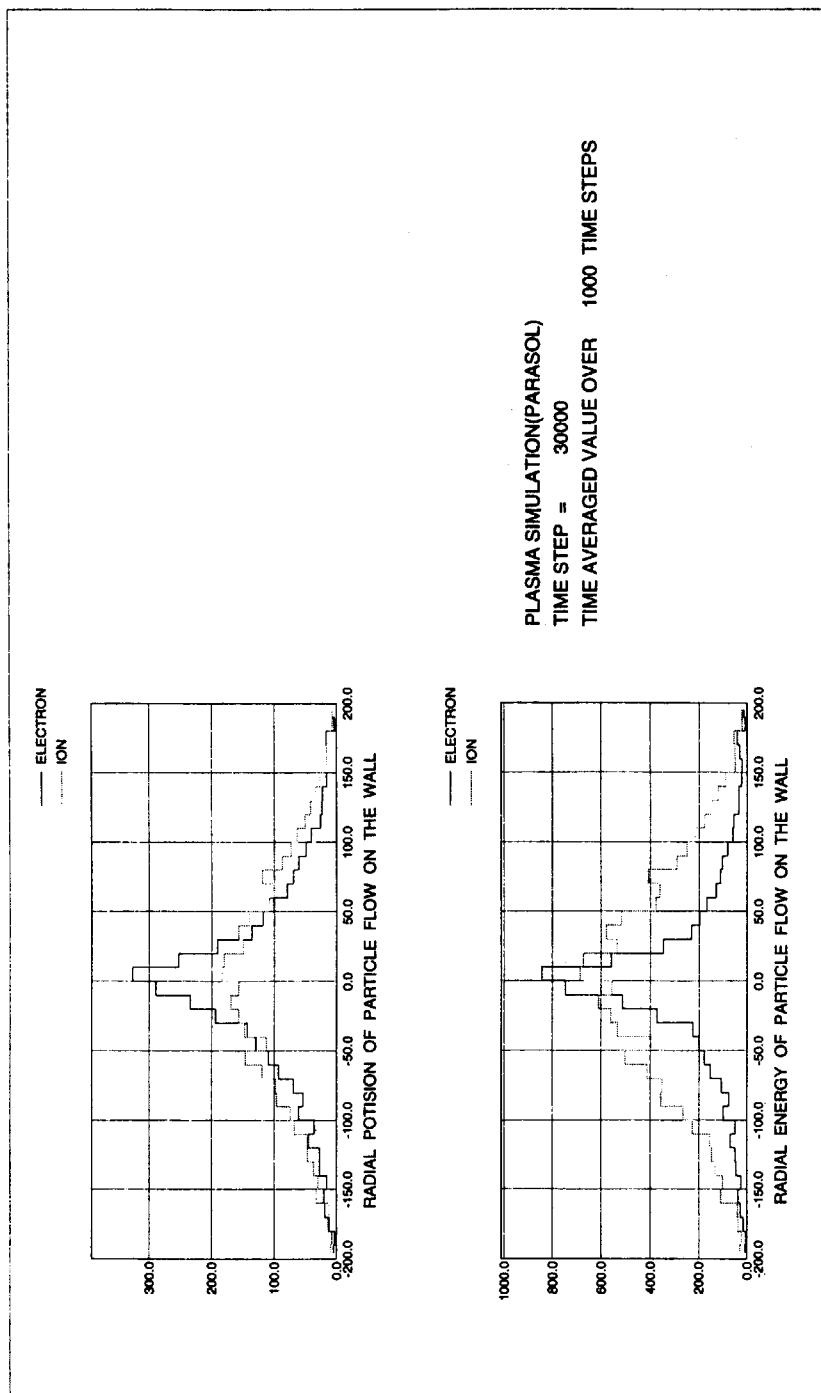


図 4.19: 計算結果出力図 (16)

4.6 配列数制限

PARASOL コードは次の各項目を PARAMETER 文で定義し、配列寸法上限とする。現在の定義値を示す。

項目	デフォルト	内容
NOEMX	25000	粒子配列上限（電子・1 ノード当たり）
NOIMX	25000	粒子配列上限（イオン・1 ノード当たり）
NONMX	25000	粒子配列上限（中性粒子・1 ノード当たり）
NOMAX	25000	粒子配列上限の最大値（ダミー・1 ノード当たり）
MSALL	1500	メッシュ上限（計算空間全体）
MSMAX	200	メッシュ上限（1 ノード当たり）
NDMAX	128	並列計算プロセッサ数
MXVM	25	1D 速度分布図階級数（磁場垂直成分）
MXVM2	50	1D 速度分布図階級数（磁場平行成分）
MXVRY	1250	2D 速度分布図階級数
MXBNP	3	速度分布図の空間位置指定数
MXSTP	40000	タイムステップ上限
MXMSTP	400	時間平均値出力回数上限
MXLSTP	40	長時間平均値出力回数上限
MXSAR	2000	通信用粒子数上限（1 ノード当たり）
MXIDM	12000	通信用粒子配列上限（1 粒子種）

4.7 並列化

本節では PARASOL コードに適用されている並列化について説明する。

PARASOL コードの並列化は分散メモリ型スカラー並列計算機による実行を前提としている。現行バージョンの PARASOL コードは、この計算機アーキテクチャを持つ Intel 社製超並列計算機 Paragon XP/S15-256 上で動作する。

4.7.1 領域分割法

各計算ノードに対して、システム全体をメッシュ単位で均等分割した計算空間を割り当てる。領域分割の最小単位は、二体衝突計算の要請から、衝突対を選択するときのメッシュ数（パラメータ名：JCOLS）となる。

それぞれの計算ノードは領域分割によって割り当てられた計算空間内の情報だけを持つ。ただし、この配列の縮小については下表に示すように対象外となる配列がある。

配列名	配列寸法 (1PE)	計算全体
(粒子情報)		
XE YE VPAE VVRE	NOEMX	NOEMX*ISIZE
XI YI VIX VIY VIZ	NOIMX	NOIMX*ISIZE
XN YN VNX VNY VNZ	NONMX	NONMX*ISIZE
(電場情報)		
FAI ROU E	MSALL+3	MSALL+3

粒子情報配列は配列の縮小が行われていて、計算可能な粒子数は並列計算ノードの個数を ISIZE 個とすると NOEMX*ISIZE 個となる。一方、ポアッソン方程式の解法の制約から、電場に関するいくつかの配列は縮小されない。この場合、1 ノード当たりの配列寸法と計算全体の大きさは等しくなる。

4.7.2 SPMD モデルによる並列化

PARASOL コードは SPMD (Single Program Multiple Data) モデルによって並列化されているので、資源割り当てや実行制御を行うホストノードではなく、すべての計算ノードが同じロードモジュールを実行する。

一方、外部ファイルとの入出力、粒子の発生や熱の供給／放出といった物理モデルに関する処理については、特定のノードでだけ計算が行なわれる。ここで PARASOL コードの入力および出を行なうノードについて以下にまとめた。

I/O	装置機番	ノード番号	内容
入力	6	0	計算パラメータ
	2	ALL	リスタート計算データ
出力	11	0	計算パラメータ
	13	0	プロット出力 (メッシュデータ)
	14	0	プロット出力 (速度分布データ)
	15	0	プロット出力 (静電ポテンシャル時系列データ)
	16	0	プロット出力 (壁消失粒子データ)
	17	0	プロット出力 (動画用粒子データ)
	18	0	プロット出力 (動画用メッシュデータ)
	19	0	プロット出力 (動画用速度分布データ)
	20	0	プロット出力 (動画用壁消失粒子データ)
	2	ALL	リスタート計算データ

4.7.3 MPI ライブラリの利用

ノード間通信には、MPI (Message Passing Interface) ライブラリを利用する。PARASOL コードにおける通信の目的は、主に次の 3 種である。

1. ファイル I/O に伴う、root (#0) から comm (その他全てのノード) への集団通信 (ブロードキャスト) と、comm から root への集団通信 (ギャザ)
2. 粒子の移動と発生による 1 対 1 ノード間通信。「粒子の移動」については両隣の計算ノードとのデータの送受信を、「粒子の発生」のときには計算空間の両端ノードから、発生領域の計算ノードへのデータ送信。
3. メモリの並列化がされていない電荷密度情報について、システム全体で総和を取るためのレダクションオペレーション。

PARASOL コードの各副プログラムは、以下に示す MPI サブルーチンを引用する。MPI サブルーチンの詳細は省略する。

副プログラム 通信用モジュール

MAIN	MPI_INIT, MPI_COMM_SIZE, MPI_COMM_RANK, MPI_WTIME, MPI_FINALIZE
INPUT	MPI_BCAST, MPI_BARRIER, MPI_ALLGATHER MPI_ALLGATHERV
TRANSB	MPI_IRecv, MPI_Send, MPI_Wait, MPI_Abort
TRANSG	MPI_Recv, MPI_Send
CHARGE	MPI_Allreduce
ELC1BC	MPI_Allreduce
OUTPUT	MPI_Reduce, MPI_BARRIER
HEADNG	MPI_Reduce
REDUCE	MPI_Reduce
GATHRV	MPI_Gatherv

5 並列計算効率

並列化の目的は、(1) 大きな記憶領域の確保と (2) 計算時間の短縮することにある。PARASOL コードにおける配列の縮小については前章で述べた。本章では実際の並列計算による計算時間の短縮について説明する。

一般に、スカラー並列計算機を用いて並列計算を行なうとき、ノード数を n 、計算時間を t とすると、並列化による計算の高速化には「理想的な台数効果」があって、

$$t = Cn^{-1}$$

と表せる (C : 比例定数)。

実際の並列計算においては、ノード間通信や計算負荷の偏りによって理想とする台数効果を得ることはできない。この時のノード数と計算時間の関係を次のように考える。

$$t = Cn^r$$

係数 r (≥ -1) は -1 に近いほど良い台数効果が得られる（並列計算効率が高い）ことを示す。

PARASOL コードに対して適用されている並列化の並列計算効率を調べるために、ノード数を変えたときの計算時間を計測した。表 5.1 にノード数対計算時間の計測結果を、図 5.1 にこの計測結果を両対数軸で図示する。以下、ノード数比および計算時間比はノード数 $n = 10$ のときを基準とする比である（その時のノード数を n_0 、そのときの計算時間を t_0 とする）。係数 r は次式で求める。

$$r = \frac{\log(t/t_0)}{\log(n/n_0)}$$

計算は那珂研究所に導入されている Intel 社製超並列計算機 Paragon XP/S15-256 を用いた。実行モジュール生成には Paragon 用フォートランコンパイラ（コマンド名 if77、最適化のためのオプション'-O2'）を用いた¹。主な計算パラメータの値は次の通りである。

初期粒子数	N0	=	100,000
タイムステップ数	KT	=	1,000
メッシュ数	JX	=	800

表 5.1 より、ノード数 $n = 100$ における計算は、ノード数 $n = 10$ のときに比べて約 8 倍の処理速度の向上があること、また係数 r の値から、ノード数の増加に伴って r の値が大きくなり、並列計算効率は低下することが分る。

次に、副プログラム毎にその並列計算効率を見る。計算時間を比較的多く必要とする幾つかの副プログラムを 2 つのグループに分けて、係数 r の値を示す。

¹副プログラム TRANS およびそれに引用される副プログラムのコンパイルには、処理速度向上のためにコンパイラオプション'-O4 -Mvect' を指定した [5]。

表 5.1: ノード数対計算時間の計測

ノード数	10	25	50	100
計算時間 [sec]	1847.8	761.5	407.7	237.0
ノード数比	1.0	2.5	5.0	10.0
計算時間比	1.0	2.4	4.5	7.8
係数 r	—	-0.97	-0.94	-0.89

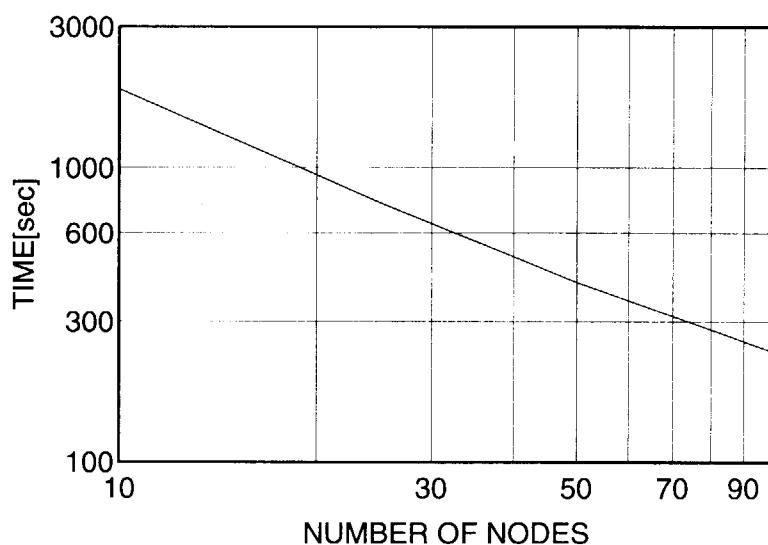


図 5.1: PARASOL コードの台数効果

表 5.2: 副プログラムグループ 1 のノード数対計算時間の計測

ノード数	10	25	50	100
COLLSN	—	-0.99	-0.99	-1.0
MOTION	—	-0.98	-1.0	-1.0
ARRNG	—	-0.98	-1.0	-1.0

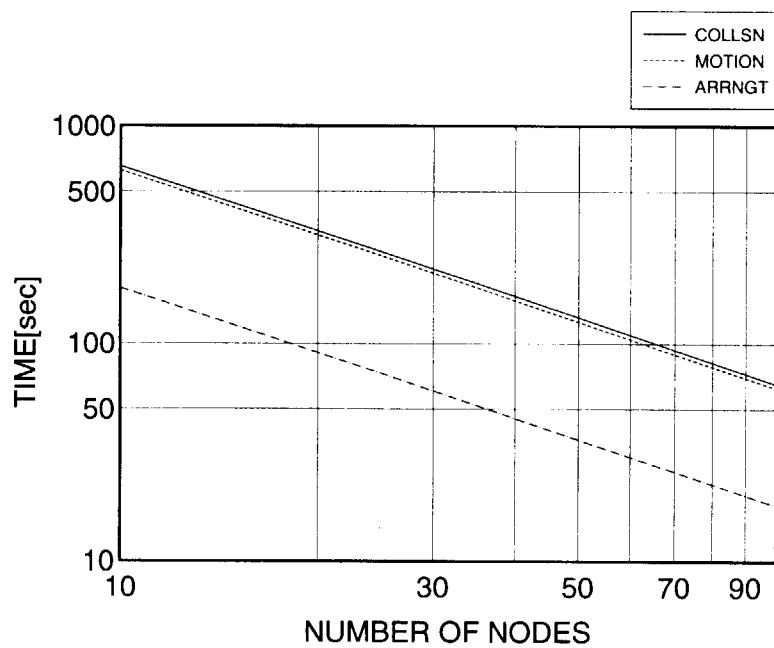


図 5.2: 副プログラムグループ 1 の台数効果

表 5.3: 副プログラムグループ 2 のノード数対計算時間の計測

ノード数	10	25	50	100
TRANS	—	-1.0	-0.82	-0.69
CHARGE	—	-0.94	-0.96	-0.95
ELC1AS	—	0.04	0.04	0.04

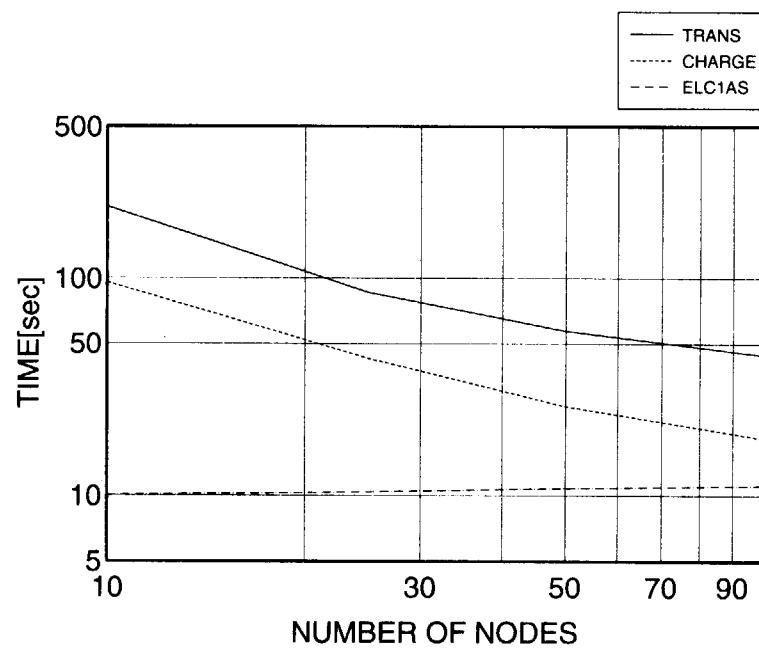


図 5.3 副プログラムグループ 2 の台数効果

副プログラムグループ 1 は、係数 r の値からほぼ理想的な台数効果を得ることが分かる。一方、副プログラムグループ 2 ではノード数の増加に従って並列計算効率が低下している。副プログラム TRANS, CHARGE, ELC1S の処理はそれぞれ次のようなものである。

TRANS ノード間を移動する粒子情報を、粒子供給領域から発生する粒子情報を、1 対 1 ブロック通信を用いて送受信するためのコントロールルーチンであって、電子、イオンおよび中性粒子ごとに副プログラム TRANSA を呼び出す。

TRANSA 送信対象となる粒子を検出し、副プログラム TRANSB および TRANSG を呼び出す。粒子の数だけ DO 文を実行する処理であることから、並列計算効率が高い。

TRANSB ノード間を移動する粒子情報を、左右 2 つのノードと両方向の送受信を行なう。この処理はノード数によらず、一定の処理時間を必要とする。

TRANSG 粒子供給領域では、ダイバータ板で消失した粒子数をもとに粒子の供給が行なわれる。ダイバータ板を計算領域に含むノードから、粒子供給領域を担当するノードへ粒子情報が伝えられる。この通信処理は、ダイバータから供給領域への片方向通信であって、供給領域のノード数が多いほど処理時間を必要とする。

CHARGE 副プログラム CHARGE では電荷密度計算を行なう。各ノードごとの計算領域内における電荷密度計算は、粒子の数だけ DO 文を実行する処理であり、並列計算効率が高い。一方、ポアソンソルバ ELC1AS が並列化されていないために、各計算ノードで計算空間全体の電荷密度情報を持たせるためのグループ通信が行なわれる。一般的に、グループ通信はノード数の増加にしたがって通信時間が増加する。

ELC1AS 上記にあるように、副プログラム ELC1AS は並列化されておらず、一定の処理時間を必要とする。ELC1AS は SOL 電流制御のための境界条件計算を行なう副プログラム ELC1BC を呼び出すが、この中ではグループ通信が行なわれるため、ELC1AS の実行時間はノード数の増加に従って増加する。

副プログラム CHARGE と ELC1AS では、同じグループ通信ルーチン (MPI_ALLREDUCE) を用いているが、計算効率の低下の程度は前者の方が大きいことが図 5.3 から分かる。これは通信バッファの配列の大きさによるものと考えられる。

以上、PARASOL コードに対して適用されている並列化の計算効率についてまとめる。

- 計算負荷が比較的大きい物理計算ルーチン (COLLSN, MOTION) については、領域分割法による並列化によってほぼ理想とする台数効果が得られる。
- 並列化していない処理 (ポアソンソルバ) および台数効果が期待できない処理 (副プログラム TRANS) が存在し、ノード数の増加による並列計算効率の低下の原因となる。

謝辞

PARASOL コードは、日本原子力研究所における NEXT (Numerical EXperiment of Tokamak) 計画の一環として開発が行われている。PARASOL コードの開発にあたり、炉心プラズマ解析室の清水勝宏、林伸彦両研究員の貴重な助言、および岸本泰明プラズマ理論研究室室長の支援に感謝します。

参考文献

- [1] T. D. Rognlien et al., Contrib. Plasma Phys. **36** (1996) 105.
- [2] T. Takizuka et al., J. Nucl Mater. **128-129** (1984) 104.
- [3] T. Takizuka and H. Abe, J. Comput. Phys. **25** (1977) 205.
- [4] T. Takizuka and M. Hosokawa “Particle Simulation Study of the Effect of Radial Electric Field on Scrape-off-Layer Plasma and Sheath Formation”, 7th Int. Workshop on Plasma Edge Theory in Fusion Devices, Tajimi, 1999; to be published in Contib. Plasma Phys.
- [5] Intel Co., ParagonTM System Fortran Compiler User’s Guide (1995) 3-1.

This is a blank page.

国際単位系(SI)と換算表

表1 SI基本単位および補助単位

量	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質量	モル	mol
光度	カンデラ	cd
平面角	ラジアン	rad
立体角	ステラジアン	sr

表3 固有の名称をもつSI組立単位

量	名称	記号	他のSI単位による表現
周波数	ヘルツ	Hz	s ⁻¹
力	ニュートン	N	m·kg/s ²
圧力、応力	パスカル	Pa	N/m ²
エネルギー、仕事、熱量	ジュール	J	N·m
功率、放射束	ワット	W	J/s
電気量、電荷	クーロン	C	A·s
電位、電圧、起電力	ボルト	V	W/A
静電容量	ファラード	F	C/V
電気抵抗	オーム	Ω	V/A
コンダクタンス	ジーメンス	S	A/V
磁束	ウェーバ	Wb	V·s
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A
セルシウス温度	セルシウス度	C	
光束度	ルーメン	lm	cd·sr
照度	ルクス	lx	lm/m ²
放射能	ベクレル	Bq	s ⁻¹
吸収線量	グレイ	Gy	J/kg
線量等量	シーベルト	Sv	J/kg

表2 SIと併用される単位

名 称	記 号
分、時、日	min, h, d
度、分、秒	, ′, ″
リットル	L, L
トン	t
電子ボルト	eV
原子質量単位	u

$$1 \text{ eV} = 1.60218 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$1 \text{ u} = 1.66054 \times 10^{-25} \text{ kg}$$

表5 SI接頭語

倍数	接頭語	記号
10^6	エクサ	E
10^5	ヘクタ	P
10^4	テラ	T
10^3	ギガ	G
10^2	メガ	M
10^1	キロ	k
10^{-1}	ヘクト	h
10^{-2}	デカ	da
10^{-3}	デシ	d
10^{-4}	センチ	c
10^{-5}	ミリ	m
10^{-6}	マイクロ	μ
10^{-9}	ナノ	n
10^{-12}	ピコ	p
10^{-15}	フェムト	f
10^{-18}	アト	a

(注)

- 表1～5は「国際単位系」第5版、国際度量衡局1985年刊行による。ただし、1eVおよび1uの値はCODATAの1986年推奨値によった。
- 表4には海里、ノット、アール、ヘクタールも含まれているが日常の単位なのでここでは省略した。
- barは、JISでは流体の圧力を表わす場合に限り表2のカテゴリーに分類されている。
- E C閣僚理事会指令ではbar, barnおよび「血圧の単位」mmHgを表2のカテゴリーに入れている。

換 算 表

力	N(=10 ⁵ dyn)	kgf	lbf
1	0.101972	0.224809	
9.80665	1	2.20462	
4.44822	0.453592	1	

$$\text{粘度 } 1 \text{ Pa}\cdot\text{s}(N\cdot\text{s}/\text{m}^2) = 10^3 \text{ P(ボアズ)(g/(cm\cdot s))}$$

$$\text{動粘度 } 1 \text{ m}^2/\text{s} = 10^4 \text{ St(ストークス)(cm}^2/\text{s)}$$

圧	MPa(=10bar)	kgf/cm ²	atm	mmHg(Torr)	lbf/in ² (psi)
力	1	10.1972	9.86923	7.50062 × 10 ³	145.038
0.0980665	0.0980665	1	0.967841	735.559	14.2233
0.444822	0.444822	4.03323	1	760	14.6959
1.33322 × 10 ⁻¹	1.33322 × 10 ⁻¹	1.35951 × 10 ⁻³	1.31579 × 10 ⁻³	1	1.93368 × 10 ⁻³
6.89476 × 10 ⁻³	6.89476 × 10 ⁻³	7.03070 × 10 ⁻³	6.80460 × 10 ⁻³	51.7149	1

エネルギー・仕事・熱量	J(=10 ⁷ erg)	kgf·m	kW·h	cal(計量法)	Btu	ft·lbf	eV	1 cal = 4.18605J(計量法)	
								= 4.184J(熱化学)	
	1	0.101972	2.77778 × 10 ⁻⁷	0.238889	9.47813 × 10 ⁻⁴	0.737562	6.24150 × 10 ¹⁸	= 4.184J(熱化学)	
9.80665	1	2.72407 × 10 ⁻⁶	2.34270	9.29487 × 10 ⁻³	7.23301	6.12082 × 10 ¹⁸	= 4.1855J(15°C)		
3.6 × 10 ³	3.67098 × 10 ⁵	1	8.59999 × 10 ⁻¹	3412.13	2.65522 × 10 ⁶	2.24694 × 10 ²¹	= 4.1868J(国際蒸気表)		
4.18605	0.426858	1.16279 × 10 ⁻⁶	1	3.96759 × 10 ⁻³	3.08747	2.61272 × 10 ¹⁹	仕事率 1 PS(仮馬力)		
1055.06	107.586	2.93072 × 10 ⁻¹	252.042	1	778.172	6.58515 × 10 ²¹	= 75 kgf·m·s		
1.35582	0.138255	3.76616 × 10 ⁻⁷	0.323890	1.28506 × 10 ⁻³	1	8.46233 × 10 ¹⁸	= 735.499W		
1.60218 × 10 ¹⁹	1.63377 × 10 ⁻²	4.45050 × 10 ⁻²⁶	3.82743 × 10 ⁻²⁶	1.51857 × 10 ⁻¹⁹	1.18171 × 10 ¹⁹	1			

放射能	Bq	Ci	吸収線量	Gy	rad	照射線量	
						1	100
	1	2.70270 × 10 ⁻⁶		1	100		
	3.7×10^{10}	1		0.01	1		

放射能	C/kg	R	照射線量	1	線量当量	
					1	3876
					2.58×10^{-4}	1

放射能	Sv	rem	線量当量	
			1	100

(86年12月26日現在)

