

NATIONAL INSTITUTE FOR FUSION SCIENCE

第7回「シミュレーション・サイエンス・シンポジウム」集録

Proceedings of the 7th Simulation Science Symposium

(Received - July 2, 2004)

NIFS-PROC-58

July 2004

This report was prepared as a preprint of work performed as a collaboration research of the National Institute for Fusion Science (NIFS) of Japan. This document is intended for information only and for future publication in a journal after some rearrangements of its contents.

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to the Research Information Center, National Institute for Fusion Science, Oroshi-cho, Toki-shi, Gifu-ken 509-5292 Japan.

RESEARCH REPORT
NIFS-PROC Series

第7回「シミュレーション・サイエンス・シンポジウム」集録

Proceedings of the 7th Simulation Science Symposium

Key word: simulation science

Abstract

The 7th Simulation Science Symposium was held October 16-17, 2003 at National Institute for Fusion Science, aiming at creating interactions between diversified research areas in the Simulation Science. Researchers from a variety of fields presented recent results and stimulating cross-cutting discussions have been made.

はじめに

この冊子は平成15年10月16日から17日まで核融合科学研究所において行われた「第7回シミュレーション・サイエンス・シンポジウム」での発表内容を集めたものです。

これまで、核融合科学研究所理論・シミュレーション研究センターでは、平成9年度以来6回にわたり「シミュレーション・サイエンス・シンポジウム」を開催し、計算機シミュレーションによる新しい科学研究の方法を開拓する議論の場を設けて参りました。第7回となる今年度のシンポジウムにおいては、核融合プラズマ、天体プラズマ、地球科学、生命科学、物質科学等々、様々な分野の先生方に最新の研究成果をご紹介いただくとともに、シミュレーションモデリングの課題などについて活発な議論が行われました。

参加者の皆様におかれましては、本シンポジウムを、シミュレーション・サイエンスを個別学問に共通する新しい方法論として発展させていくための一助としていただければ幸いです。また、ご多忙中にも関わらず、研究発表および集録原稿の執筆をいただきました先生方に、この場を借りて厚く御礼申し上げます。

平成16年3月

核融合科学研究所理論・シミュレーション研究センター

岡本正雄

目次

第7回「シミュレーション・サイエンス・シンポジウム」プログラム

星形成の数値シミュレーション	3
花輪 知幸、松本 倫明	
太陽コロナプラズマにおける電磁流体緩和現象	8
—観測的シミュレーションへの挑戦—	
草野 完也	
固体地球シミュレーション	15
陰山 聡	
タンパク質と核酸のコンピュータシミュレーション	18
館野 賢	
散逸粒子動力学シミュレーションによる両親媒性分子の超分子構造解明	26
中村 浩章	
Arrhenius diffusivity and intra-well temperature in power-law	28
correlated cluster surface diffusion	
Yutaka Maruyama	
2次元電磁流体での渦法 —電流・渦法—	30
八柳 祐一	
階層連結モデルによる相対論プラズマのシミュレーションと	36
レーザー核融合	
坂上 仁志、長友 英夫、城崎 知至、三間 罔興	
電位構造形成の粒子シミュレーション	41
石黒 静児	
ジャイロ運動論的トロイダル粒子コードによるトカマク中の微視的	46
不安定性のシミュレーション	
井戸村 泰宏	
Collisionless reconnection in a three-dimensional open system	51
Ritoku Horiuchi	

第7回「シミュレーション・サイエンス・シンポジウム」
プログラム

日時:10月16日(木)15:00~17日(金)16:50

場所:核融合科学研究所管理棟4階大会議室

10月16日(木)

13:30-14:30 VR ツアー

14:30-15:00 受付

[セッション1] (座長:草野完也)

15:00-15:25 岡本正雄(核融合研)

「はじめに-理論・シミュレーションセンターの研究の紹介」

15:25-16:10 花輪 知幸(千葉大学)

「星形成の数値シミュレーション」

16:10-16:30 (休憩)

[セッション2] (座長:坂上仁志)

16:30-17:15 草野完也(広島大学)

「太陽コロナプラズマにおける電磁流体緩和現象
-観測的シミュレーションへの挑戦-

17:15-18:00 陰山 聡(地球シミュレータ)

「固体地球シミュレーション」

10月17日(金)

[セッション3] (座長:花輪知幸)

9:00- 9:45 岡本 祐幸(分子研)

「タンパク質折り畳みの計算機シミュレーション」

9:45-10:30 館野 賢(産業技術総合研究所)

「タンパク質と核酸のコンピュータシミュレーション」

10:30-10:50 (休憩)

[セッション 4] (座長:岡本祐幸)

10:50-11:15 中村浩章(核融合研)

「散逸粒子動力学シミュレーションによる両親媒性分子の超分子構造解明」

11:15-11:40 丸山豊(産業技術総合研究所)

「非指数型緩和を示すクラスター表面拡散におけるアレニウス性と井戸内温度」

11:40-12:05 八柳祐一(京都大学)

「2次元電磁流体での渦法 ~電流・渦法~」

[セッション 5] (座長:岡本正雄)

13:30-14:15 坂上 仁志(姫路工大)

「階層連結モデルによる相対論プラズマのシミュレーションとレーザー核融合」

14:15-15:00 石黒静児(核融合研)

「電位構造形成の粒子シミュレーション」

15:00-15:20 (休憩)

[セッション 6] (座長:石黒静児)

15:20-16:05 井戸村泰宏(原研)

「ジャイロ運動論的トロイダル粒子コードによるトカマク中の微視的不安定性のシミュレーション」

16:05-16:50 堀内利得(核融合研)

「3次元開放系における無衝突磁気リコネクション」

星形成の数値シミュレーション

花輪 知幸 (千葉大学・先進科学教育センター)

松本 倫明 (法政大学・人間環境学部/国立天文台)

1. 星形成研究の現状

現在も分子雲とよばれる銀河の中でガス密度の高い領域では新しい星が生まれている。太陽程度の質量の星の場合、誕生から 100 万年たつと、赤外線を放射する原始星として観測されるようになる。さらに 1000 万年たつち、核融合により光る一人前の星(=主系列星)となる。このように分子雲から原始星が形成される過程と、原始星が主系列星へと進化する段階を合わせて私たちは星形成と呼んでいる。

原始星から主系列星へと至る進化の研究は、電波・赤外線観測の発達により、最近 20 年度大きく進展した。原始星の多くが円盤状のガス雲を伴っていること、若い原始星からはジェットが噴出すること、などが 1980 年代後半から盛んになった電波・赤外線観測により明らかになった。また原始星の多くは連星であること、太陽以外の星にも惑星があること、質量が低いために自ら核融合で光ることのない星(=褐色矮星)も形成されること、なども近年明らかになってきた。

しかし、星形成には基本的な問題も多く残っている。たとえば何が星の質量を決めているのか未だに謎である。一つの星形成領域には重い星も軽い星もあるが、質量分布に星形成領域ごとの差はあまり見られない。またなぜ連星が多いのかについても、理論は確立していない。

分子雲から原始星が生まれる過程の研究には、いくつもの困難がある。第 1 に原始星の進化は速いので、形成途上の原始星や生まれたばかりの原始星を数が少ない。また存在していても、分子雲の中に埋もれているので、探し当てるのが困難である。理論的にも非線型性が強く、取り扱いにくい問題である。京都大学の林(忠四郎)グループらが 1960 年代から先駆的な仕事をしているが、初期の研究では分子雲も原始星も球対称であるという粗い近似が採用されていた。1980 年代からは回転や磁場の効果も徐々に扱われるようになったが、十分な精度のある 3 次元数値シミュレーションが行われるようになったのは、この 5 年ほどである。

2. 星形成シミュレーションの技術的問題点

星形成のシミュレーションが困難である原因は、密度変化のダイナミックレンジがあまりにも広いことにある。平均的な分子雲のガス密度は 1000 cm^{-3} 程度であり、その中で最もガス密度が高い部分(分子雲コア)ですらガス密度は 10^5 cm^{-3} 程度である。これに対し、原始星は生まれた時ですら ガス密度は 10^{11} cm^{-3} で、赤外線で輝くころには 10^{20} cm^{-3} を超す。このように大きな密度変化に伴い、空間スケールも大きく変化する。分子雲の大きさは小さいものでも 10^{19} cm の広がりをもつ。分子雲コアですらその半径は 10^{17} cm であ

る。生まれたばかりの原始星の半径は 10^{14} cm、太陽の半径は 10^{11} cm である。このようにダイナミックレンジが広い現象を、通常の数値格子で取り扱うことは、不可能である。全領域に必要な空間分解能を達成しようとする、メモリーや計算量が莫大になる。しかし分解能が不足すると、偽の分裂など、定性的な結果すら信用出来ないシミュレーションになる(Truelove et al. 1997)。

広いダイナミックレンジを保ちながら必要な分解能を得るには、AMR (Adaptive Mesh Refinement)のように異なる解像度の格子を組み合わせる方法が有効である。高い空間分解能必要なのは、原始星が形成されるごく狭い領域に限られる。分子雲の大半の領域は密度が低く、低い空間分解能で計算しても本質は損なわれない。AMR では解から必要な空間分解能を計算し、計算量を抑えている。私たちはこれを簡略化し、計算領域の中心付近だけ空間分解能を上げる方法—Nested Grid (多層格子)—を採用した(Matsumoto & Hanawa 2003b、概念については図 1 を参照のこと)。分子雲コアから原始星が生まれるステージを取り扱う場合、密度は多くの場合その中心近傍で最も高い。このため原始星は分子雲コアの中心で生まれる。従って高空間分解能が必要となるのは計算領域の中心付近に限られる。Nested Grid では空間分解能を高められる領域が限られるが、コードが単純になり、ベクトル型計算機では計算が高速になる。私たちはこれらのメリットを考え、Nested Grid を採用した。

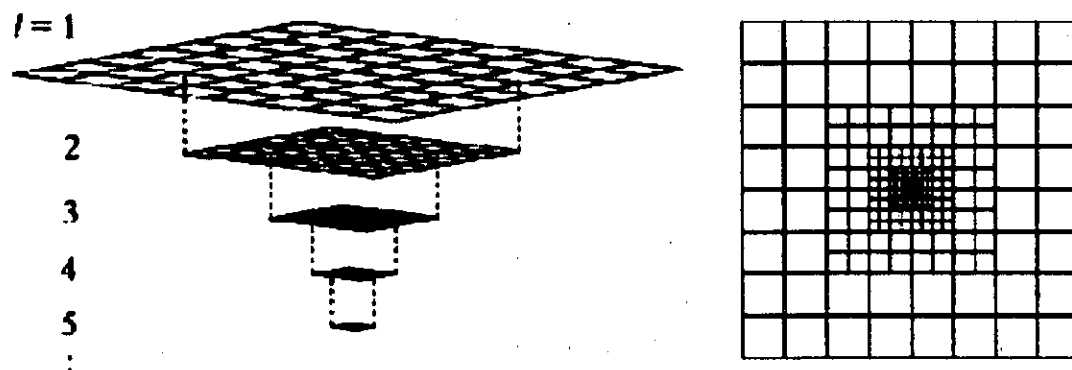


図 1. Nested Grid での数値格子の構造。実際には 3 次元セルであるが、概念を説明するために 2 次元で示している。2 倍ずつ分解能の異なる格子が階層的に組み立てられていて、中心部だけ高い空間分解能が達成されている。左図は右図を立体的に表したものだ。レベル(l)が異なる格子の境界では、違う大きさのセルが隣り合うので、差分化に工夫がいる。

AMR や Nested Grid には異なるサイズのセルが含まれるので、サイズの違うセルをまたがる差分をどのように取り扱うかという問題が生じる。流体力学方程式の場合は既に多くの研究があり、全体として 2 次精度を保ちながら、全体として質量や運動量の保存をみたく差分法が開発されている。これに対して自己重力については標準的な解法が定まっていない。ここでは私たち(Matsumoto & Hanawa 2003a)が開発した方法をご紹介します。

3. Nested Grid での Poisson 方程式の高速解法

私たちは重力ポテンシャルの計算法を考えるに当たり、次のような 3 条件を課した。第

1 に連星がつくる 4 重極モーメントも正しく計算できるだけの精度(accuracy)が必要と考えた。これは連星による重力トルクが、連星の形成や進化に重要な意味を持つからである。第 2 に計算速度が十分に速く(fast)、確実に解が得られる(sure convergence)ことも必須とした。さらに数値格子に含まれるセル数が増えても、計算量がたかだかセル数に比例する程度(scalability)を期待した。

私たちが求めた条件は至極普通に見えるが、これまでこれらの条件を満たすものは無かった。粗い格子から順に解を求めるような簡単な方法では、連星の 4 重極モーメントは正しく取り扱うことができない。粗い格子も細かい格子も同時に計算すると、要素数が増えるために、問題は難しくなり、適当な反復法により確実かつ高速に解が得られる保証がなくなる。

しかし幸いなことに、Gauss の法則を厳密に満たす差分式と多層格子反復法を組み合わせることにより、上記の条件をすべて満たす解法が見つかった(Matsumoto & Hanawa 2003a)。ここではその概略と得られた結果をまとめる。

[差分法]

Poisson 方程式を重力加速度 \mathbf{g} を露わにし、さらに体積積分と線積分により積分型に書き換えた。

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{g} &= 4\pi G\rho & \rightarrow & \int \mathbf{g} \cdot d\mathbf{S} = \int \rho dV \\ \mathbf{g} &= \nabla\phi & \phi &= \int \mathbf{g} \cdot d\mathbf{s} \end{aligned}$$

ここで右上の式は Gauss の法則である。差分式でも Gauss の法則が厳密に成り立つよう、粗い格子と細かい格子が接する面で、そこを通過する重力加速度が完全に同じにした(「重力力線」が保存することに対応)。またセルの中心で定義される重力ポテンシャル ϕ は右下の式を満たすように設定し、重力ポテンシャルが 1 価のスカラー関数となるようにした。

[反復解法]

図 2 に示すように、流体計算にも使用する Nested Grid (図 2 では左端のもの)に対して、各段でのセル数を半分ずつ減らした作業用の Nested Grid を多段に用意する。最初は右端の最も粗い Nested Grid での解を、単純な Red-Black Gauss-Seidel 反復法で求める。これを初期値として、中央のやや粗い Nested Grid での解を同様に反復法で求める。既に初期値が良い近似値なので、やや粗い Nested Grid での反復は少数回で十分である。さらにこれを繰り返すことにより、実際に使用する Nested Grid での解が得られる。

図 3 はこの方法で計算した連星の重力ポテンシャルである。この例では 64^3 のグリッドが階層的に 5 段組み合わされている。重力ポテンシャルが滑らかに求められている様子が見える。誤差を定量的に解析するため、1 段あたりのセル数を増やし、誤差がどのように減少するか確認した。粗いセルと細かいセルの境界を除けば、重力加速度 \mathbf{g} の誤差はセルの巾 Δx の 2 乗に比例して減少することが確かめられた。図 4 に示すように、反復ごとに残差は 1/1000 ずつ小さくなる。セルの数を増やしても計算量はその 1 乗にしか比例しないので、十分に短い時間で精度の良い解がえられる。図 5 は本スキームを組み込んだ、連星形成の数値シミュレーションの例である。このモデルの詳細については Matsumoto & Hanawa (2003)を参照していただきたい。

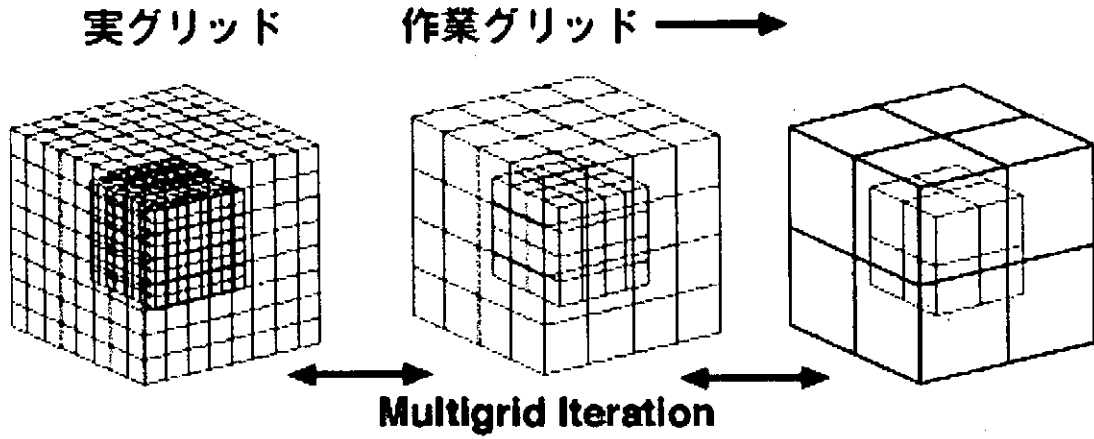


図 2. 反復解法に使用した粗さの異なる Nested Grid。右側の粗い Nested Grid で近似解を求め、順次、左側の細かい Nested Grid での解を求める。

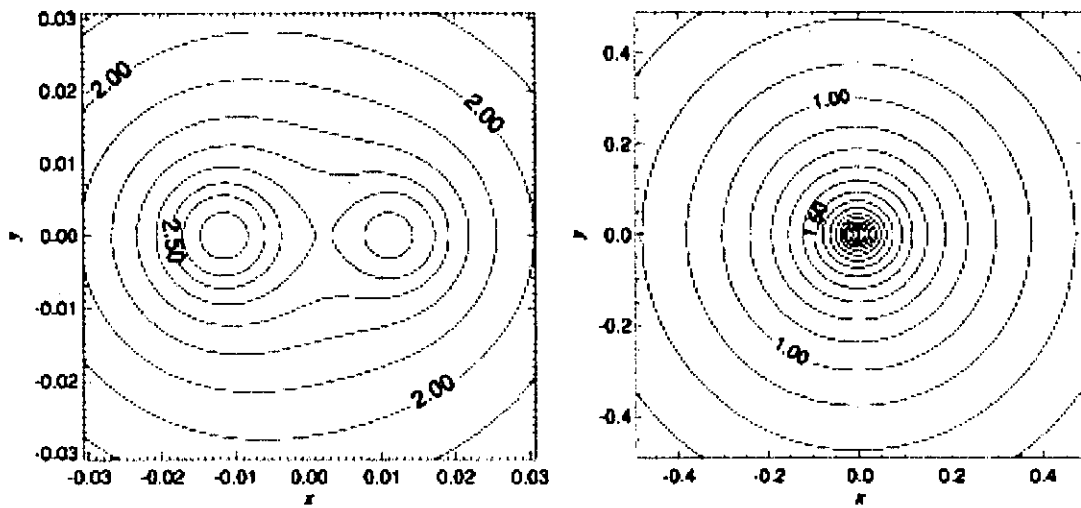


図 3. Nested Grid を使って計算した連星の重力ポテンシャル。右は最も粗いグリッドで見た重力ポテンシャル。左はその中心部の拡大図。実線は等ポテンシャル面を表している。

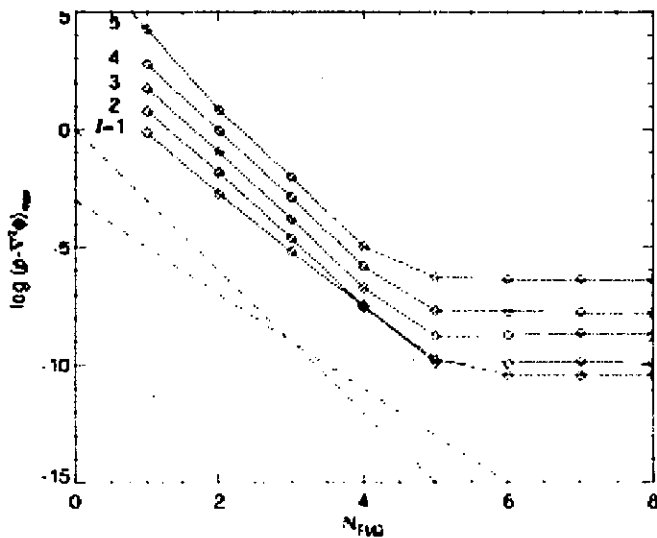


図 4. 反復回数と残差。実線は残差の絶対値($=|\Delta\phi - 4\pi G\rho|$)の最大値をセルのサイズごとに分けて書いたもの。残差は細かい(l の大きい)セルで大きいですが、反復 1 回あたり 1000 分の 1 ぐらいずつ減り、5 回の反復で丸め誤差程度になる。

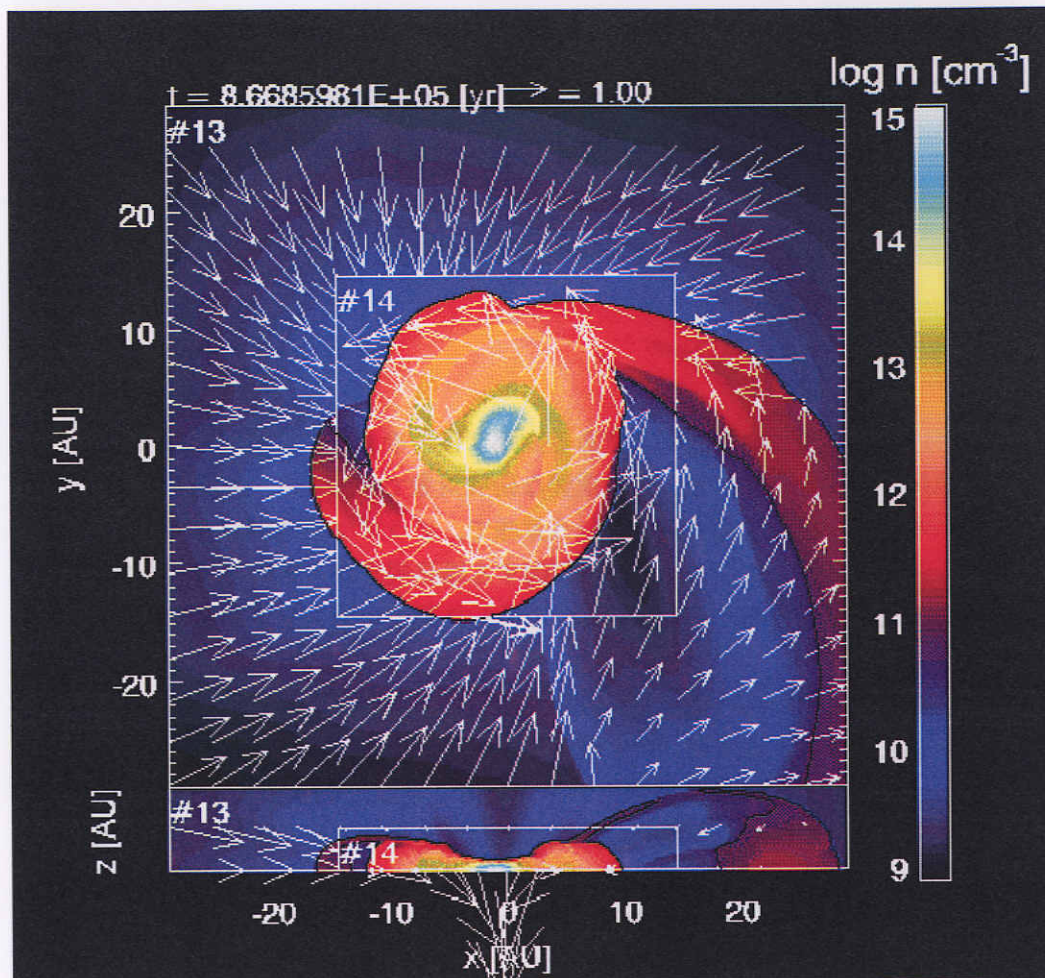


図 5. Nested Grid を使って計算した分子雲コア収縮の数値シミュレーションの例。中心に密度の濃い渦状腕がみえる(Matsumoto & Hanawa 2003b)。

参考文献

- Matsumoto, T. & Hanawa, T. 2003b, A Fast Algorithm for Solving the Poisson Equation on a Nested Grid, *Astrophys. J.*, 583, p. 296
- 2003a, Fragmentation of a Molecular Cloud Core versus Fragmentation of the Massive Protoplanetary Disk in the Main Accretion Phase, *Astrophys. J.*, 595, p. 913
- Truelove, J. K., Klein, R. I., McKee, C. F., Holliman, J. H., II, Howell, L. H. & Greenough, J. A. 1997, The Jeans Condition: A New Constraint on Spatial Resolution in Simulations of Isothermal Self-gravitational Hydrodynamics, *Astrophys. J.*, 486, L179

太陽コロナプラズマにおける電磁流体緩和現象

—観測的シミュレーションへの挑戦—

草野完也¹

広島大学大学院先端物質科学研究科

1 はじめに

太陽圏空間における最も激しい爆発現象である太陽フレアやコロナ質量放出 (CME) は、太陽のみならず恒星の物理を理解する上でも重要な研究対象です。また、高温プラズマにおける典型的なエネルギー解放過程であるという意味で、プラズマ物理学の立場からも興味深い現象とも言えます。さらに、太陽に起因する爆発現象は人類の宇宙活動や地球近傍の電磁環境に多大な影響を与えることから、こうした現象の発生を予知することが強く期待されています。

「ようこう」、「SOHO」、「Trace」および「RHESSI」など近年多くの太陽観測衛星が打ち上げられ、様々な波長域による太陽コロナ観測が成功しました。その結果、太陽コロナが極めてダイナミックな状態にある高温プラズマであることが分かってきました。特に、フレアのメインフェーズにおけるX線発光の詳細構造が明らかにされた結果、フレア爆発によるエネルギー解放の主たる機構が磁気リコネクションであることがほぼ確認されました。その意味で、太陽コロナにおける爆発現象は、逆転磁場ピンチ (RFP) やトカマクなど実験室プラズマにおける電磁流体力学 (MHD) 的エネルギー緩和過程と共通の物理で理解できる現象であると考えられます [1]。

しかし、フレアの際にリコネクションが生じていることを示す多くの観測結果があるにも関わらず、フレア発生時の物理的な原因は未だによく分かっていません。すなわち、「いつ、どこで、なぜリコネクションが爆発的に発生するのか?」という基本的課題が未解決のまま残されているといえます。その主な理由の一つは、紫外線やX線などフレア観測に最も効果的な電磁波が主にフレアの結果として放出されるという事実によります。フレアはその特徴として突発的に発生するため、予兆現象を観測によって捉えることは容易ではなく、フレア発生前 (プリフレア・フェーズ) の情報は今でも極めて限定されています。

フレア発生機構の解明を困難にするもうひとつの理由は、観測によって捉えることができる空間スケールに限界があることです。太陽コロナ磁場の基本スケールは、太陽表面で間欠的に強い磁場をもつ領域 (活動領域) の大きさ (L) によって規定されます。一方、高温プラズマである太陽コロナの拡散時間は極めて長く、磁気レイノルズ数 R_m がとても大きな値をもつため、磁気リコネクションが発生する拡散領域のスケールは磁場の大規模構造に対して極めて小さくなります。例えば、古典的抵抗値を用いた場合、コロナ磁場のスケール $L \sim 100\text{Mm}$ (太陽半径の $1/7$) に関して $R_m \sim 10^{14}$ であり、Sweet-Parker スケー

¹e-mail: kusano@hiroshima-u.ac.jp

リングに従うならば、拡散領域の厚さは $\delta = R_m^{-1/2}L \sim 10\text{m}$ となります。しかし、最も精細な観測の分解能 (約 1arcsec) が太陽面上で 700Km に対応することから、磁気リコネクションの本質である拡散領域を直接観測することは極めて困難であろうと考えられます。

それ故、今後のフレア研究では電磁波で直接見ることのできない現象を捉えるための新しい方法論が必要となるでしょう。著者は数値シミュレーションがそのための強力な手段になると考えています。しかし、そのためには主に2つの課題を克服する必要がありますでしょう。一つは、マクロスケールを再現する MHD シミュレーションの中に現実のコロナプラズマの複雑さをいかに取り込むかという問題であり、もう一つはマクロな MHD プロセスとマイクロなプラズマプロセスのフィードバックをいかに扱うかという問題です。本稿では、MHD シミュレーションの立場から前者の方法に関して論じ、観測データに整合するシミュレーション研究の可能性を指摘します。

2 フレアのトリガ機構

太陽フレアの発生機構を探るためには磁気リコネクションを引き起こす拡散領域の形成過程を特定する必要があります。太陽コロナ磁場は太陽内部の対流層におけるダイナモ過程が再生成した磁束の上昇によって形成されます。すなわち、太陽表面のプラズマ運動に起因するポインティング・フラックスがコロナ磁場の自由エネルギー源です。しかし、太陽表面における典型的な速度 (0.1Km/sec) と磁場 ($10^{-2} - 10^{-1}\text{T}$) が 10^8m 程度の活動領域に太陽フレアを駆動するエネルギー (10^{26}J) を供給するためには $10^4 - 10^5\text{sec}$ 程度の時間が必要です。一方、太陽フレアの立ち上がり (インパルス・フェーズ) はコロナ磁場のアルフベン時間 ($10 \sim 10^2\text{sec}$) と同程度の短い現象です。つまり、太陽フレアはコロナ磁場に徐々に蓄積された自由エネルギーが突然、熱と運動に変換されるカタストロフ的現象と考えられます。それゆえ、「フレアがなぜ起きるか」を理解するためには、エネルギーの蓄積から解放へ転じる機構を説明しなければなりません。今のところ明らかになっていません。フレアがリコネクションと共に起きるならば、トリガ問題はリコネクションの突発性を説明する問題であり、これを解明するためにはゆっくりとした大規模構造の変化が小さな拡散領域を生み出すダウンサイジング・プロセスを明らかにする必要があります。

太陽表面磁場のゆっくりとした変化が突発的現象を生み出す理論的なシナリオは2つ考えられています。一つは、太陽表面境界における磁場の準静的かつ連続的な変化の結果、コロナ領域の MHD 平衡が保てなくなるために、システムが動的状態に遷移するという「平衡消失 (loss-of-equilibrium) モデル」です。典型的な平衡消失モデルでは、コロナ中を流れる電流が作る磁束管 (flux rope) の上昇を太陽表面につなぎ止めるループ磁場が、太陽表面活動によって次第につなぎかわる結果、平衡条件が失われて flux rope の急激な上昇が起き、フレアが発生すると説明されています [2, 3]。これらのモデルは、第1原因であるループ磁場のつなぎ変わりが flux rope の下方で生じるか上方で生じるかによって、「tether cutting model」と「break-up model」に区別されており、多数のシミュレーション研

究が行われてきました [4, 5, 6]. 平衡消失モデルは突発的現象を説明する優れたモデルですが, 平衡消失点までシステムが安定性を保って変化するという前提で成立します. この前提がより現実的なシステムで成り立つかどうかを調べることは課題として残されています.

一方, 境界条件の変化がシステムを不安定化することによってフレアのトリガ機構を説明しようとする不安定化 (loss-of-stability) モデルがあります. ただし, 不安定化モデルの場合, 最大成長率が正値をとった直後にエネルギー解放が起きてしまうと, 自由エネルギーを十分に蓄積できないという問題があります. それゆえ, 自由エネルギーを十分貯め込んだ後に, 急激に不安定化するなんらかのメカニズムを明らかにしなければなりません. こうしたカタストロフ過程は, 時間スケールの違う複数のプロセスの連鎖反応として現れるでしょう. 時間スケールと空間スケールには一般に相関があるので, トリガ問題の解決のためには, 時間と空間における多階層過程の理解と現実の太陽の条件に関する正確な記述が必要です.

3 観測データの取り込み

太陽フレアの第 1 原因は太陽表面における磁場と運動にあります. それ故, 太陽表面境界条件はフレアの原因を考える上で最も重要な要素です. 従来の数値シミュレーション研究は, コロナ磁場のダイナミクスを生み出すと思われる境界条件を理論的視点から与え, その数値解を求めるという方法で行われてきました. それゆえ, 理論モデルの検証がシミュレーション研究の主たる目的であったといえます. しかし, 初期境界条件と電磁流体ダイナミクスは非線形的に関連しており, 現実の太陽表面における電磁流体力学的条件は非常に複雑な構造を持っているため, 単純なモデル境界条件がどこまで適用できるかは明らかではありません. それゆえ, 現実的な過程をシミュレーションで再現するためには, 最も大きなスケールの構造と時間変化を観測によって決定する必要があります. これは, 局所的な集中豪雨の原因を探るためには, 現実の地形データに基づくシミュレーションを行う必要があることに似ています.

それゆえ, 太陽表面観測データをシミュレーションに取り込まなくてはなりません. このプロセスは気象予測シミュレーションなどでデータの同化 (assimilation) と呼ばれる作業に対応しています. MHD 方程式の解を求める際には, 密度 ρ , 圧力 P , 速度 V , 及び磁場 B の境界条件を決めなければいけませんが, 太陽コロナの観測は電磁波による遠隔測定に限られるためその情報は制限されています. 特に, 誘導電場を駆動するプラズマの速度をベクトル場として直接測定することは困難です.

一方, 偏光スペクトル線のゼーマン分岐より太陽表面の磁場ベクトルを測定する方法は広く実用化されており [7], 数 arcsec の精度で太陽表面のベクトル磁場を観測することが可能です. 近い将来打ち上げられる「Solar B」衛星には, 太陽表面磁場を 0.2arcsec の高分解能で連続観測するための光学望遠鏡 (SOT) が搭載される予定です. そこで, 著者ら

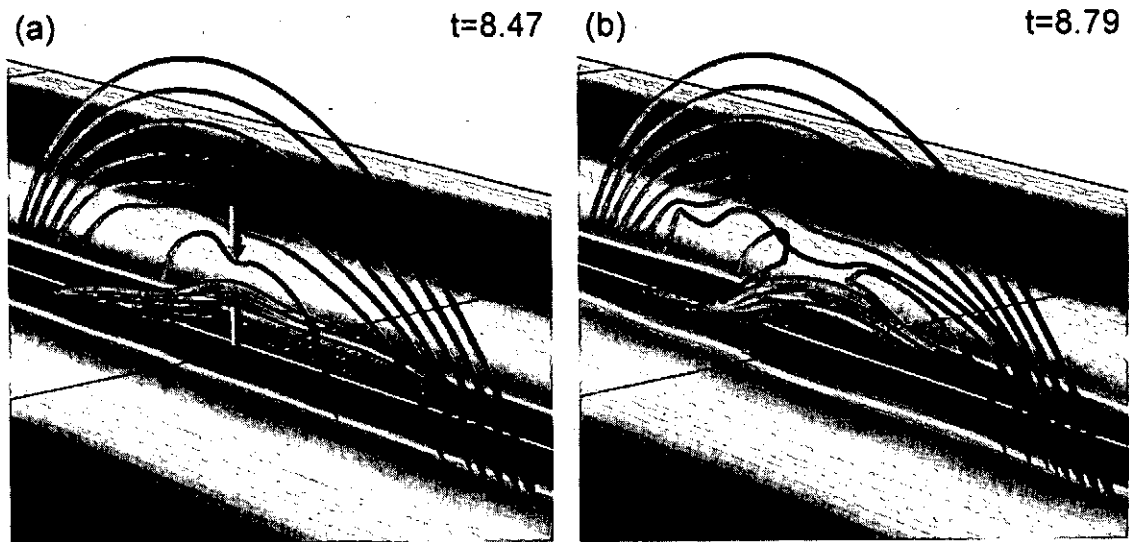


図 1: 異符号磁気ヘリシティを太陽表面運動によって入射した場合の3次元シミュレーションにおける磁力線構造. (a)および (b) はそれぞれヘリシティ反転層における磁気リコネクションの前と後の構造を表す.

は誘導方程式の逆問題として磁場の観測データから磁場変動とコンシステントな速度場を求める方法を開発し [8], その結果に基づいてシミュレーションを行う試みを提案しています. 最近, 我々はこの方法を応用し, MHD 緩和過程において最も重要な物理量である磁気ヘリシティと自由エネルギーのコロナへの供給量を磁場観測データから直接測定することに世界で初めて成功しました. さらに, フレア活動との詳しい相関解析の結果, この方法がコロナ活動を定量的に理解するために極めて有効であることが分かってきました.

特に激しいフレア活動が観測された活動領域 NOAA8100 において測定された磁気ヘリシティ入射密度分布を調べるとヘリシティ入射の符号が単一の活動領域内部においても複雑に変化していることが分かります. 従来の理論モデルでは大量のヘリシティ入射がフレア活動を駆動すると広く信じられていました. しかし, 実際の測定結果は, 太陽コロナ磁場のヘリシティがこれまで考えられてきた以上に複雑な構造を持っていることを示しています. 現実のコロナプラズマにおけるこうした複雑さを効果的に取り込んだ実データシミュレーションが, 従来の理論型シミュレーションでは見出し得なかった隠された非線形プロセスを解明する有効な手段になると著者は考え, その実現へむけた準備を進めています.

4 コロナ磁場の自己組織化

我々は最近, 活動領域以外に磁場のソースが無いと仮定して太陽表面の磁気ヘリシティ密度を求めることにより, ヘリシティの符号が急激に変化する線状の構造 (ヘリシティ反

転層) がしばしば太陽表面上に存在すると共に、多くのフレアが「ヘリシティ反転層」の近傍で発生していることを見い出しました。

著者らはこの結果に基づき、磁気ヘリシティの複雑さ、特にその符号反転とフレア発生との関連に注目しています。実際、観測結果と同様に太陽表面運動が磁気アーケードのヘリシティを反転させる過程を3次元MHDシミュレーションを用いて再現しました。図1および図2はその結果を示します。磁気反転線上空に正のヘリシティを持つ線形 force-free 磁場を初期条件として作り、磁気シアを反転させる流速を太陽表面に境界条件として与えると、図1 aのように磁気ヘリシティの反転層が形成されます。この反転層では磁気シアが局所的に変化するため、強い層状電流が流れ複数のフーリエ成分が抵抗テアリングモードに対して不安定化します。その結果、電流層の急速な thinning が局所領域で進み、図1 bに示されるような磁気リコネクションを通して磁気エネルギーが効果的に解放されることがわかりました。さらに、このリコネクションを通して太陽表面近傍で磁気シアの空間構造が急激に平坦化され、線形 force-free 場に近い状態が再び自発的に形成される事実も明らかにされています。これらのシミュレーション結果は、磁場配位の違いにも関わらず太陽コロナにおいてもトラスプラズマと同様の電磁流体力学的エネルギー緩和過程が実現する可能性を示唆しています。

さらに、シミュレーションを続けると磁気シアの反転層で発生した複数のリコネクションによって駆動された複雑な流れのエネルギーが非線型結合を通して大規模構造に遷移することにより、磁気アーケード上空のある点で新たな電流層が生成され第2のリコネクションが発生することがわかりました(図2)。これは、磁気シアの反転層における第1のリコネクションが磁気アーケードに沿った磁束の対消滅を引き起こすため、アーケード構造がMHD平衡を保つことができずに内部崩壊する結果として生じる強い非線型現象です。第2のリコネクションの結果、X線観測で頻繁に観測されるカスプ構造が形成されると共に、コロナから上方への大規模な放出流も生み出されることから、実際の太陽フレア現象に近いMHDダイナミクスがシミュレーションの結果として再現されたと考えています。

今回得られた2つのリコネクション過程は非線型過程としても興味深い現象です。なぜなら、第2のリコネクションの下降放出流は第1のリコネクションの流入流として働くため、2つのリコネクションは相互に相手を駆動しあい、エネルギー変換効率を急速に高める機構として働く可能性があるからです。この過程は、不安定性によるダイナミクスとその結果である平衡構造の変化とが互いにフィードバックすることにより実現する大規模かつ急速な磁場構造の自己組織化として説明できます。こうした複雑なリコネクションの相互作用は、3次元空間においてはじめて実現可能な現象であり、詳細な研究はリコネクション研究における今後の課題の一つであると思います。

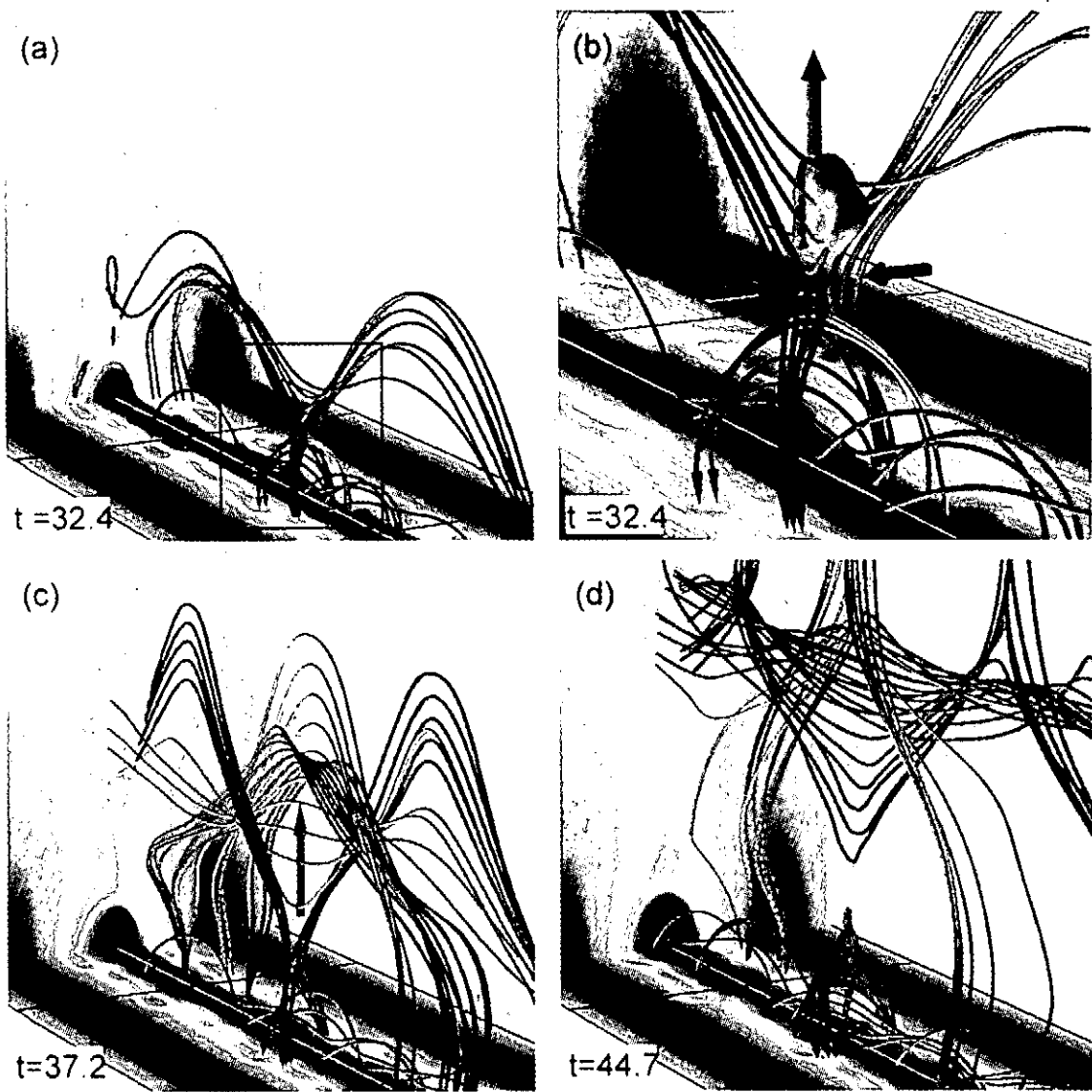


図 2: 3次元シミュレーションにおける磁力線構造. (a) 図1で示された磁気リコネクションの結果として第2のリコネクションが発生し, (c)-(d) 磁気アーケードの一部が上空へ放出される. (b) は (a) の矩形領域における磁力線の詳細構造を示す.

5 展望

太陽コロナプラズマでは大規模構造のスケールとプラズマのミクロスコピックなスケールのギャップが大きく、MHD 近似が成り立つレンジが非常に広いという特徴があります。一方、それゆえ MHD の非線型性に潜む物理が未だに明らかではなく、MHD プロセスと運動論効果の結合を実現する道筋はまだ示されていません。著者は今後数年間の太陽コロナシミュレーションの課題は「観測データの取り込み」によって現実の複雑さを表現方法を確立することと、大規模構造から微小な構造を作り出す「非線形プロセス」を解明することにあるのではないかと考えています。また、粒子モデルシミュレーションなどとの結合によって、運動論効果との相互フィードバックをいかに実現するかという将来的課題に取り組む必要もあるでしょう。

2006 年度に打ち上げが予定されているわが国の次期太陽観測衛星「Solar-B」は太陽光学望遠鏡を搭載し、世界ではじめて宇宙空間から精密かつ連続的な太陽表面ベクトル磁場の観測を実現する予定です。我々はこの観測データを MHD 方程式における境界条件として利用することにより、より現実的な磁場配位に関する太陽コロナの電磁流体シミュレーションを実現する計画を進めています (図 3)。これによって、シミュレーションが単に方程式の解法としてのみならず、観測データから太陽コロナの実像を再構成する道具として広く使われる時代が来ると考えています [10]。

参考文献

- [1] 草野完也, 常田佐久, 日本物理学会誌 53 656 (1998)
- [2] E.Priest and T.Forbes, *Solar Phys.*, 126 319 (1990).
- [3] T.Forbes and E.Priest, *Astrophys. J.*, 446 377 (1995)
- [4] T. Amari and J. F. Luciani, *Phys. Rev. Lett.* 84, 1196 (2000)
- [5] S.K.Antiochos, C.R. DeVore, J.A. Klimchuk, *Astrophys. J.*, 510, 1, 485 (1999)
- [6] P.F.Chen, K. Shibata, *Astrophys. J.*, 545, 1, 524 (2000).
- [7] 一本潔, 小特集 偏光プラズマ分光 5. 偏光を用いた太陽磁場計測, プラズマ・核融合学会誌 2002 第 78 巻 第 8 号 p.752-758.
- [8] Kusano, K., Maeshiro, T., Yokoyama, T., & Sakurai T. 2002, *Astrophys. J.*, 577, 501
- [9] Kusano, K., Miike, H., Maeshiro, T., Yokoyama, T., & Sakurai T. 2003, submitted to *Astrophys. J.*
- [10] 草野完也, プラズマ・核融合学会誌 2003 第 79 巻 第 5 号 p.496-503.

固体地球シミュレーション

陰山 聡

海洋科学技術センター 横浜研究所 地球シミュレータセンター
固体地球シミュレーション研究グループ

Email: kage@jamstec.go.jp

1 固体地球科学とは

固体地球科学の研究対象は、地球内部の構造とダイナミクスである。固体地球という言葉は、動きの全くない、静かなイメージを抱かせるが、実は地球内部は、今この瞬間にもダイナミックに動き、流れている。「固体が流れる」というのは奇異に感じられるかもしれない。しかし、十分に長い時間スケールで見れば、固体も液体と同様に流れ得ることは氷河を見れば分かるであろう。地球全体の体積の80%以上を占めるマントルは岩石でできているので、物質の相としては固体だが、地球内部の熱を外に捨てるために対流運動（マントル対流）をしている。マントル対流の駆動源は、地球内部に蓄えられた地球形成時の熱と、放射性同位元素である。

マントル対流は、地球表面にプレートと呼ばれる薄板状の剛体構造を形成し、その動きを誘起している。このプレート運動が、地震や火山活動を引き起こす直接の原因である。プレート運動は、理論的に推測され、長年、間接的な証拠しかなかったが、最近ではGPS等の技術を用いてそのゆっくりとした動き（1年で数mmから十数cmの速度）が直接観測されている。従って、地球内部のマントル対流も同程度の速さ（つまり10cm/年のオーダー）で流れていると考えられる。日常生活の時間スケールでは、これは「速さ」と呼ぶのがためらわれるほどのゆっくりとした動きだが、46億年の歴史を持つ地球にとっては十分に「激しい」動きと言える。

地球表面は、全部で十数枚のプレートで覆われている。それらのプレートが、互いに別々の方向に動き、ぶつかり合ったり、すれ違ったりするところで地震や火山活動が起きている。これがプレートテクトニクス理論である。例えば東太平洋海嶺で生まれたプレートは、東と西に分かれて動いていく。西に向かったプレートは、1億年以上かかって日本列島の近くまで移動し、日本海溝で陸側のプレートの下にもぐり込む。沈み込み帯と呼ばれるこの領域では、壮大なスケールでの摩擦と破壊現象が起きている。これが多くの地震の原因と考えられている。

現在、プレートテクトニクスは、マントル対流の一

部（その表面部分に現れた冷たく堅い境界層）として包括的に理解されようとしている。しかしながら、観測されているようなプレートの構造や挙動を説明するようなマントル理論モデルはなく、また実験室や計算機シミュレーションでの再現に成功した人もいない。固体地球科学の最前線の一つがここにある。

マントルのさらに下、つまり地球中心には、コアと呼ばれる領域がある。マントルは岩石だが、コアは鉄でできている。はるか46億年前、地球が形成された時には、コアの鉄はその全てが高温のためにどろどろに溶けていた。そして、地球全体が次第に冷えていくに従い、コアの温度も下がり、現在でもその一部が少しずつ固まっている。地球中心に近いほど圧力が高いので、コアの鉄の固化は地球の中心部分から進行している。固体化したコアの領域は地球の中心（内側のコア）にあるので内核、外側にあるまだ液体状の部分（つまり外側のコア）は外核と呼ばれている。

外核の半径は約3500キロである。地球の半径は約6400キロだから、コアは非常に深いところにあるわけである。我々の足下にあるとは言え、これほど遠いところに存在するコアの鉄だが、意外なことに、我々の日常生活に直接的な影響を及ぼしている。それは、地球の磁場（地磁気）が、外核中のMHD (Magnetohydrodynamics) ダイナモ機構を通じて生成されているからである。MHDダイナモによっていかにして双極子磁場が生成されるかという物理機構については、我々の論文 [1] を参照して頂きたい。

2 陰陽（インヤン）格子

2.1 緯度経度格子の問題点

地磁気ダイナモのシミュレーションや、あるいは最近我々のグループ（地球シミュレータセンター、固体地球シミュレーション研究グループ）でも始めたマントル対流のシミュレーションでは、球殻ジオメトリの下で流体の時間発展方程式を有限差分法で解いている。差分化するにあたり、少し前まで我々は、普通の球座標上の格子系を用いていた。これは球面上に等間隔に引いた緯度線と経度線の交点をとった格子系である（図

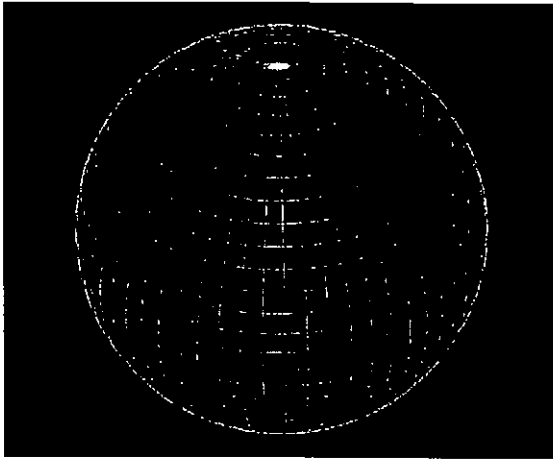


図 1: 緯度経度格子

1 参照)。しかしこの緯度経度格子系では、北極と南極近くに格子点が集まりすぎ、その分だけ低緯度部分(赤道近く)が粗くなるという欠点があった。これはシミュレーションの計算上効率が悪い。

緯度経度格子系がもつこの欠点を克服するために、最近私は「陰陽(インヤン)格子」という新たな格子系を考案した[2]。我々のグループでは、今では地磁気ダイナモとマントル対流のどちらのシミュレーションコードも、この陰陽(インヤン)格子で計算している。

陰陽格子とは、図2に示したように、全く同じ形をした二つの要素格子を二つ(イン格子とヤン格子)組み合わせ、球面全体を覆った格子系である。要素的格子を複数合わせて計算領域全体を覆うこのような格子形成手法は一般にキメラ法と呼ばれる。

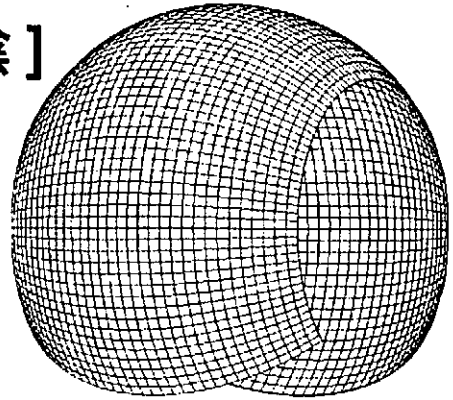
2.2 キメラの一種としての陰陽格子

キメラ格子(Chimera gridまたは overset grid または overlaid grid)とは、複数の要素格子を用いて計算領域全体を覆う複合型の格子の一種である。要素格子同士はその境界部分で部分的に重なり合っている。一つの要素格子の境界上の値は、他の要素格子の値から補間により求める。

球の2次元表面を覆うキメラ格子には無数のバリエーションが考えられるが、要素格子の数が多いと補間計算の負荷が増えるので、その数は最小値の2が望ましい。二個の要素格子だけで球面を覆う方法もまた無数に存在するであろうが、全く同じ形の二つの要素格子で球面を覆うことができれば、プログラムが簡単になるし、何よりエレガントであろう。また、計算速度を考えると、要素格子は直交系であるべきである。

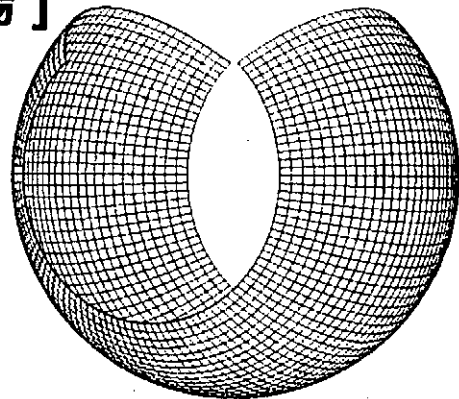
陰陽(インヤン)格子はこのような条件を満たしている。陰陽格子の要素格子は、通常の球座標の低緯度の一部分に他ならない。緯度方向には赤道付近の南北

[陰]



+

[陽]



||

[陰陽]

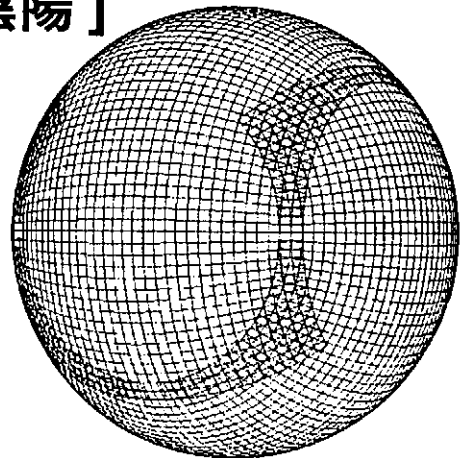


図 2: 陰陽(インヤン)格子

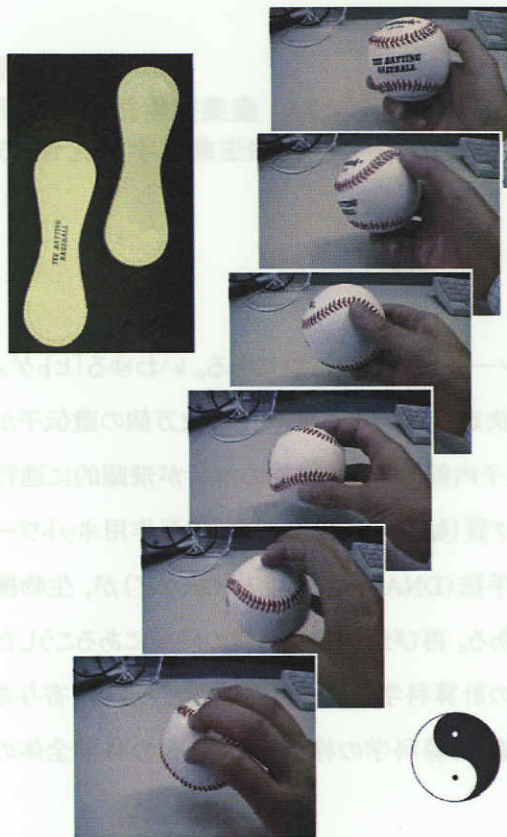


図 3: 野球のボールは、2枚の合同な布を縫い合わせて作られている。その縫い目は1本である。野球ボールは、図右下にある陰陽思想のシンボルマーク（その3次元拡張版）を連想させる。

90度、経度方向には270度の領域を抜き出したものである(図2の一番上)。これは球座標の一部なので当然直交系であり、格子間隔の極端な不均一性は持たないので計算効率が高い。この要素格子の全く同じものをもう一つ用意し(図2の上から二番目)、それを角度をずらして組み合わせたものが陰陽格子である(図2の一番下)。このような組み合わせ方は、野球のボールでも見られる(図3)。

格子の形状と、二つの要素格子の相補的な役割が中国の陰陽思想のシンボル(あるいはその3次元拡張版)を連想させるので、陰陽格子と名付けた。陰陽と書いて「インヤン」と読む。要素格子の「カド」の部分の少し削れば、重複面積を最小化させることは可能だが、今はベクトル・並列化の効率を優先させている。

上述のように、地球シミュレータセンターの固体地球シミュレーショングループでは、陰陽格子を使った地

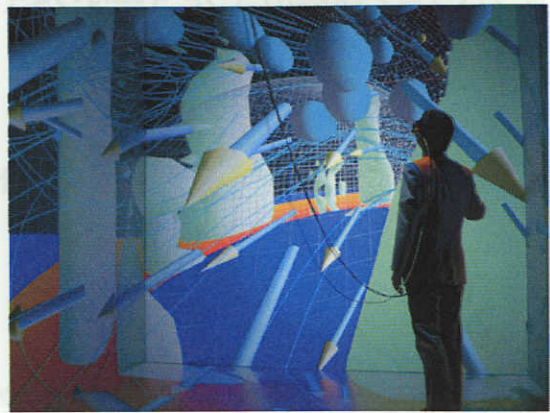


図 4: 陰陽格子によるコア対流のシミュレーション。地球シミュレータセンターのCAVEシステムBRAVEを使った解析の様子。

磁気ダイナモの3次元シミュレーションコード、及びマントル対流シミュレーションコードを開発している。図4は、陰陽格子で計算したコア内部の対流パターンを、地球シミュレータセンターのCAVE装置“BRAVE”で、VR可視化ソフトVFIVE[3]を用いて解析している様子である。また、地球シミュレータセンターの他のグループ(ホリスティックシミュレーショングループ)では、陰陽格子に基づいた大気・海洋シミュレーションコードを開発中である[4, 5, 6]。

参考文献

- [1] Kageyama, A. and Sato T.: Generation mechanism of the dipole field by a magnetohydrodynamic dynamo, *Phys. Rev. E*, Vol.55, pp.4617-4626 (1997)
- [2] 陰山 聡: 陰陽格子の開発, 第17回数値流体力学講演論文集, (2003), C8-1
- [3] Kageyama, A., Tamura, Y., and Sato, T.: Visualization of Vector Field by Virtual Reality, *Progress of Theoretical Physics Supplement*, Vol. 138, (2000), pp.665-673
- [4] 彭、肖、高橋: 球面上の高精度高効率移流計算, 第17回数値流体力学講演論文集, (2003), C6-1
- [5] 高橋、大平、陰山、渡邊: 陰陽格子上における浅水波方程式による力学的検証, 第17回数値流体力学講演論文集, (2003), C6-2
- [6] 小峯、高橋、陰山、渡邊: 陰陽格子法を用いた全球・非静力学大気モデルの開発, 第17回数値流体力学講演論文集, (2003), C6-3

タンパク質と核酸のコンピュータシミュレーション

館野 賢

独立行政法人 産業技術総合研究所
計算科学研究部門・年齢軸生命工学研究センタ

1. 序

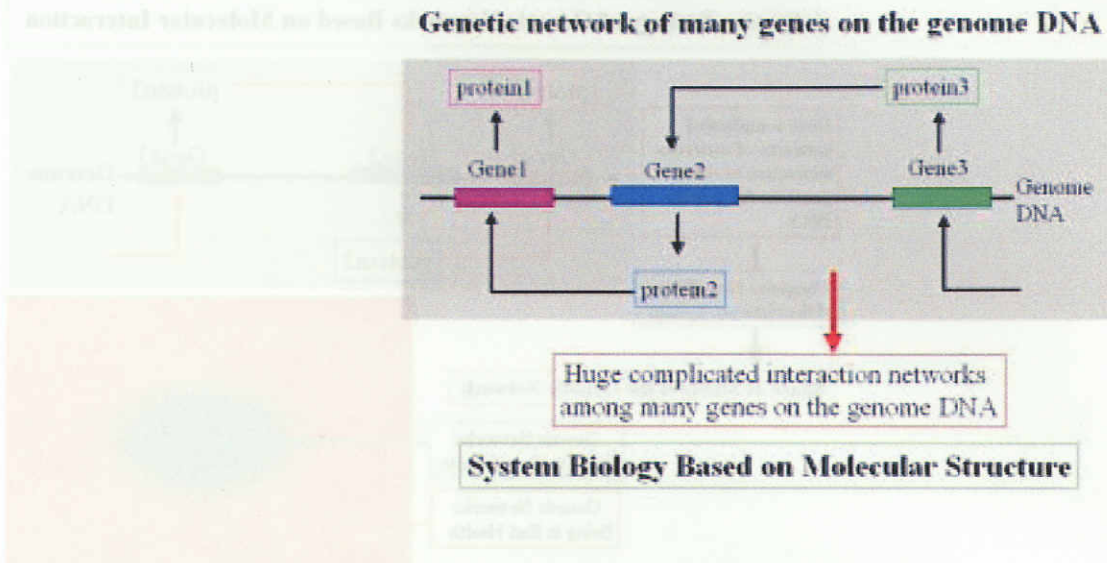
生命科学は、今また大きな変革の時(ポスト・ゲノムシーケンスの時代)にある。いわゆる「ヒトゲノム計画」(正確には、ヒトゲノム DNA の全塩基配列の決定)が終了し、我々ヒトは数万個の遺伝子から構成されることが明らかになると共に、それらの遺伝子内部の構造と機能の解析が飛躍的に進捗しつつある。さらには、これらの遺伝子(DNA)とタンパク質(転写因子)との間の「相互作用ネットワーク」を、組織的かつ網羅的に明らかにする新しい実験手法(DNA マイクロアレイ法など)が、生物機能に関連した様々な研究・開発に、広く応用されつつある。再び飛躍的な発展の段階にあるこうした生命科学において、コンピュータシミュレーションなどの計算科学的な解析手法がどのような寄与をなし得るのか、この問いを深く考えることは、実験・理論・計算科学の枠を超え、今後の科学全体の発展にも、大変重要な意味を擁するものと考えられる。

2. タンパク質(転写因子)および DNA(遺伝子)の相互作用ネットワークシステム

例えば、上述の遺伝子発現(転写)制御における「タンパク質・DNA 相互作用」のネットワークについて、そのシステムの「全体像」を定量的に明らかにすることは、長年、生体システムの本質(基礎)および様々な病因等(応用)の解明に必須であると考えられてきた。上記の技術的背景に基づけば、DNA・タンパク質分子の 10^8 通りに上る組み合わせ(単純に、 $\sim 10,000$ 個の遺伝子およびタンパク質同士の組み合わせを考える)を、組織的かつ網羅的に高効率で解析する研究にも、はじめて道を開きつつある。したがってこれは、生命科学を基礎とした関連領域である医・薬科学(様々な疾病の根本的な治療法・治療薬の開発等)、生命工学・食品工学(世界的な食料問題等への取り組みや高機能性食品の開発等)などにも、大きな影響を与えるものである。

例えば、糖尿病や肥満症など、現代社会において深刻な問題と認識されているこれらの疾病は、複雑なメカニズムで発症することが従来より知られていた。すなわち、特定の遺伝子1個の変異によって生じるものではなく、複数の遺伝子(DNA)およびタンパク質が関与し、遺伝子制御のネットワーク自体が変化することによって起こるものと考えられている。これは、DNA・タンパク質による相互作用ネットワークシステム自体の機能変化が、ある臨界点を超えた場合に、我々はこうした病気にかか

ることを意味している。実際、上述のような最先端の実験手法を駆使して、こうした疾病の原因を分子レベルで解析する試みが、現在世界的な規模で進行しつつあり、疾病の一因をなすと考えられる複数の遺伝子群が現実的に同定されてきている。



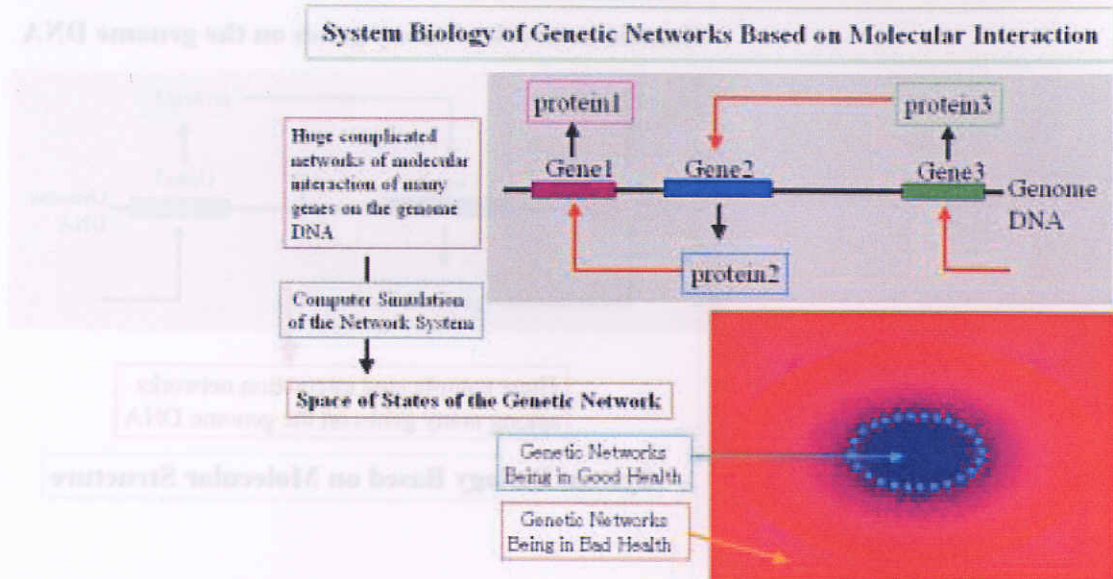
3. 実験手法における技術的困難の克服： 実験科学とシミュレーション科学との共同

しかし他方で、生体システム(DNA・タンパク質相互作用ネットワークシステム)の全体像を明らかにしようとする、こうした最新の実験手法にも、弱点が内在する。分子間相互作用のネットワークシステムを正確に記述するには、相互作用の認められる極めて多数の分子の組み合わせに対して、その結合の速度・安定性などの定量的な解析(速度論的解析)が不可欠である。しかし、現在のマイクロアレイ技術などにおいては、タンパク質(転写因子)と遺伝子(DNA)がどの程度の「強さ(速さ)」で結合するのか(安定性)を、定量的に高精度で求めることは非常に困難である。

そこでもし、タンパク質・DNA 間の相互作用を計算科学的な手法によって、理論的かつ定量的に高精度で評価することができるならば、この計算手法を可能な限り多くのタンパク質・DNA 系に対して組織的に応用することにより、相互作用ネットワークシステムを記述する基礎データが得られるであろう。さらには、そうしたシステム要素のパラメータを元にして、タンパク質・DNA による分子間ネットワークシステム全体をコンピュータ内に仮想的に構築し、その振舞いを「健康な状態」から「病気の状態」まで、定量的かつ詳細にシミュレートし予測すること(System Biology)が可能となるであろう。

これはまさに、複雑な原因による多くの疾病に対する、根本的な治療法・治療薬等を開発するためにも、貴重な情報を提供するシステムツールとなることが強く期待される。それこそが、生命(の一部)を仮想的(=コンピュータ内部)に現実化することの本質的な意義のひとつである。しかしそのために、分子間相互作用の様々なケース($\sim 10^8$ 通り!)について、定量的で詳細な実験をすべて行うことは、前述の通り、今日の最先端の実験技術をもってしても不可能である。さらには、遺伝子の任

意の位置に変異を与えた場合に、システム全体がどのような振舞いをするかについて、多くのケースを組織的かつ詳細に解析し、しかもリアルタイムに視覚化することもまた、実験手法のみに頼ってはいては不可能である。したがってそこでは、計算科学的手法の寄与が、自ずと重要になるのである。



4. DNA・タンパク質結合における自由エネルギー変化 ΔG_{bind}

このように、DNA・タンパク質相互作用ネットワークシステムの「全体像」を定量的に高精度でシミュレートすることは、生命科学における本質的な課題である。同時にまた、複雑な原因による多くの疾病の、根本的な治療法・治療薬等を開発するためにも、基盤技術となることが強く期待される。

そこで、これを実現するための、もっとも基礎的な物理量は何であるか？ 言うまでもなくそれは、タンパク質・DNA 結合における自由エネルギー変化(ΔG_{bind})であり、次のように定義することができる。

$$\Delta G_{bind} = G(\text{タンパク質} \cdot \text{DNA}) - (G(\text{タンパク質}) + G(\text{DNA}))$$

したがって、これを高精度で予測し求める計算手法の開発が、以上の研究におけるもっとも基本的な技術である。ここで、生命科学におけるこうした研究を推進する場合に、きわめて重要な留意点がある。

5. 分子生命科学において要求される定量的「精度」

ここで注意すべきことは、我々は ΔG_{bind} を“高精度で”求めなければならない点にある。高精度とはどの程度のレベルであるのか？ 実はこれは、生命科学における物理量の定量において、特に留意すべき重要な点であり、他の分子科学の問題で一般に要求される精度のレベルとは異なっている。

例えば、細胞内で今まさに特定の機能を発現しているタンパク質が、一定の3次元立体構造を保持していることについては、今日では一般にもよく知られている(注:タンパク質が機能を発現していない場合には、細胞内に存在する場合であっても、必ずしも一定の立体構造を保持しているわけではない。そのため、そうした機能構造を修正するための細胞内装置さえ、生体システムには用意されている)。その一方で、タンパク質のこうした構造安定性は、その化学構造の変異などに伴うわずかな(自由)エネルギー差によって、劇的に左右され得ることは必ずしも広く知られていない。すなわち、タンパク質 P のふたつの状態:

① 一定の3次元立体構造を保持している(Folded)状態: Pf

② 一定の3次元立体構造を保持していない(Unfolded)状態: Pu

における自由エネルギーの変化量

$$\Delta G(P) = G(Pf) - G(Pu)$$

で定義される利得($-\Delta G(P)$)は、通常、数kcal/molなのである! しかし他方で、このわずかな利得でも、Pf の存在確率に十分な物理的根拠を与え得ることは、それに対するボルツマンファクタを計算してみれば、一目瞭然である。生命はこのように、物理学の法則を巧妙に用いて、その存在を合理化しているように見えるのである。

6. DNA・タンパク質の結合反応における ΔG_{bind} の計算に要求される精度は?

翻って、DNA・タンパク質間相互作用における安定化の自由エネルギー ΔG_{bind} については、後述のように、 $O(-\Delta G_{bind}) \sim 10$ kcal/mol である。しかし、例えばタンパク質 P を工学的にデザインして P' とし、DNA との結合の安定性を人為的に変化させようとするような場合には、

$$\Delta\Delta G_{bind} = \Delta G_{bind}(P' \cdot \text{DNA}) - \Delta G_{bind}(P \cdot \text{DNA})$$

によって定義される利得($-\Delta\Delta G_{bind}$)に基づいて議論することになるが、この2次の自由エネルギー変化量の利得が、やはり ~ 1 kcal/mol 程度である。逆にいえば、自由エネルギーの変化量を ~ 1 kcal/mol 以下のオーダーで求められないのであれば、実験・理論を問わず、定量的には荒い解析(～定性的解析)といえるものである(例えば、精密な分子設計には使えない!)。

だからこそ生体システムの研究は困難なのであり、21 世紀の今日に至ってもなお、手付かずのままの領域が我々の眼前に広大に広がっている。生体システムは、それほど絶妙なバランスの元に構築されているのであり、この点はどんなに強調してもし過ぎることはない、生命科学におけるもっとも重要なポイントのひとつである。

7. DNA・タンパク質複合体における安定性を評価するための従来法

このように、DNA・タンパク質結合における自由エネルギーの変化量 ΔG_{bind} を、 ~ 1 kcal/mol 以下

の誤差精度で計算することが、現在の生命科学において非常に重要な研究課題である。そのために、従来よりよく用いられ成功している方法は、分子動力学(MD)シミュレーションによる free energy perturbation(自由エネルギー摂動法)や thermodynamic integration である(数学的には両者は同等)。これらの計算法では、 ΔG ではなく、2次の変化量 $\Delta\Delta G$ を求める。すなわち、あるタンパク質・DNA 複合体 Cwt において、部分的にその化学構造を変異させた複合体(ひとつのアミノ酸残基または塩基を置換する)を Cmt とすると、それらふたつ系の間の、自由エネルギーの変化量(ΔG)の差

$$\Delta\Delta G = \Delta G(\text{Cmt}) - \Delta G(\text{Cwt})$$

を求めるのである。

$\Delta\Delta G$ を求めるこの戦略であっても、実質的には問題はないのであるが、しかしこの計算法には、原理的に決定的な欠点がある。すなわち、上述の変異に伴って、系の電荷が変化する場合には、その計算結果に含まれる誤差は増大し、現実にはこの方法は役に立たなくなることが、よく知られている。一方で、系の化学構造の変異に伴う「電荷の変化」がもたらす構造安定性を調べる研究は、分子生命科学において大変重要な課題である。したがって生体高分子の研究において、free energy perturbation および thermodynamic integration が擁するこの欠点は、従来より非常に大きな制約となっていた。

8. DNA・タンパク質結合における ΔG_{bind} を記述する新しい汎関数の開発

そこで我々は、こうした欠点を克服するために、free energy perturbation や thermodynamic integration とは異なる高精度の計算アルゴリズムの開発を目指して、プリンストン大学の Novotny らと共同で研究を推進した。以下の2節において、その概要を述べる。

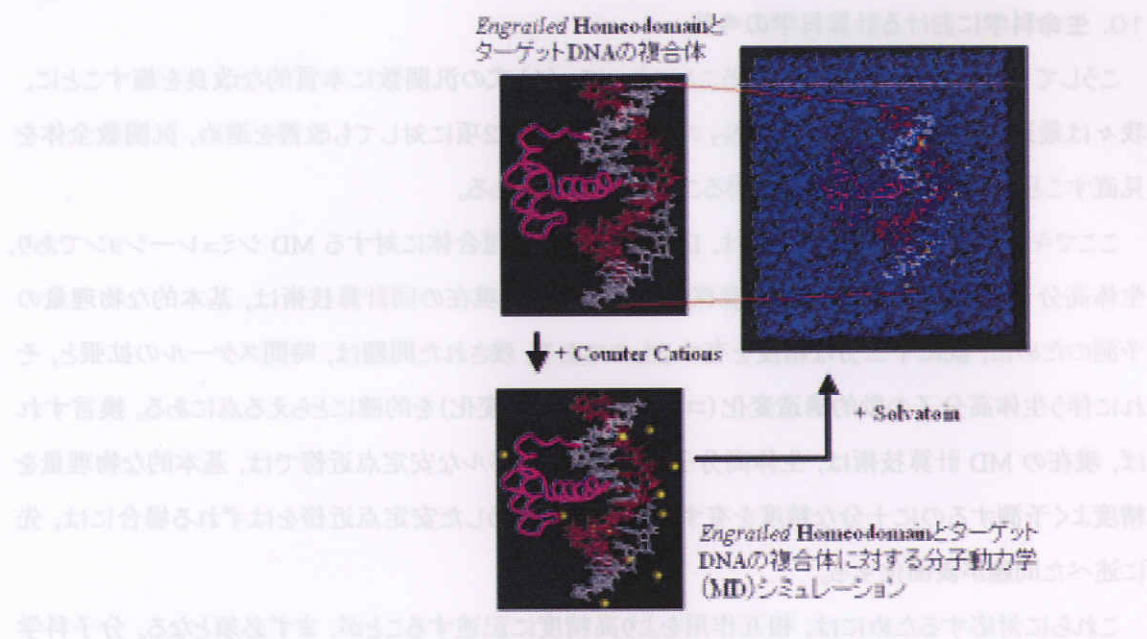
Novotny らは 1980 年代より 15 年以上に渡って、以下のような経験的な汎関数(functional)を用いて、タンパク質構造の安定性の変化(5節を参照)を自由エネルギーの変化(ΔG_{bind})として予測する研究を進めていた。

$$\Delta G = a \Delta G_{\text{Hb}} + b \Delta G_{\text{El}} + c T \Delta S_{\text{Cf}} \quad (1)$$

ここで、 ΔG_{Hb} は疎水性相互作用による寄与、 ΔG_{El} は静電相互作用からの寄与、 ΔS_{Cf} は結合に伴うエントロピー変化であり、 a, b, c は、最適化すべきパラメータである。

この方法を、DNA・タンパク質複合体の形成反応にも応用すれば、同様にその安定性を評価できるものと、彼らは考えた。そこで、*Engrailed Home domain* と呼ばれる、ヒトなどの高等真核生物の形態形成に必須の役割を果たすタンパク質(転写因子)を例に、DNA との複合体構造(X 線結晶構造)に対して、上記の理論的予測を試みた。ところが彼らの予想に反して、そうして求めた自由エネルギーの変化量(~ 30 kcal/mol)は、実験値(~ 10 kcal/mol)と比較して極めて大きな違いのあることが明

らかになった。しかしここで大事な点は、予測値が実験値に一致しない原因がどこにあるのかであり、彼らは(1)式における弱点を、同時に明らかにしたのである。すなわち、結合に伴うエントロピー変化 ΔS_{cf} 部分に、大きな誤差の重要な要因のあることが明らかになったのである。この項は、従来の計算アルゴリズムでは精度よく計算できない。そこで、このエントロピー変化項 ΔS_{cf} を改善した新しい汎関数を生成することが必要となった。



9. MD シミュレーションによって DNA・タンパク質結合に伴うエントロピー変化を求める

エントロピー変化項 ΔS_{cf} をできる限り精密に求めるためには、どのような計算方法を用いればよいか？ そのためには、予測アルゴリズム内に、従来は導入されていなかった、ふたつのファクタを露わに考慮することが必要であると考えられた。ひとつは溶媒水分子の効果であり、もうひとつは温度 (T) による熱揺らぎである。そこで彼らは、DNA・タンパク質複合体に対して、溶媒水分子を含むリアルな MD シミュレーションを実行することによって、その計算結果(トラジェクトリ)から統計的にこのファクタ (ΔS_{cf}) を求めることに思い至った。そのため筆者らと共同で、この研究プロジェクトを進めたい旨の提案が、3年程前になされた。

この共同研究の結果、Engrailed Homeodomain と DNA の複合体形成における自由エネルギー変化 (ΔG_{bind}) は、実験値と予測値の誤差を、従来の 22.43 kcal/mol から 0.59 kcal/mol にまで、文字通り劇的に小さくすることに成功した。しかしこの結果だけでは、計算結果が偶然実験値に一致したのではないかとも考えられる。そこで、Engrailed Homeodomain の Lys50 を、タンパク質工学的に別のアミノ酸 Gln に変換した変異体に対する実験データを用いて、予測値との比較を行った。理論的に変異体

タンパク質を構築するために、コンピュータ支援による構造モデリング技術も組み合わせて、エネルギー変化 (ΔG_{bind}) に関する同様の予測を我々は試みた。その結果、実験値と予測値の誤差は、従来の 22.21 kcal/mol から 0.13 kcal/mol と、同様に劇的に減少することが明らかになり、予測精度を飛躍的に上げることに成功した。

10. 生命科学における計算科学の今後

こうして MD 計算を組み合わせることによって、(1)式の汎関数に本質的な改良を施すことに、我々は最近成功した。実際には、 ΔS_{cf} のみならず、他の2項に対しても改善を進め、汎関数全体を見直すことによって、上記の結果を得ることができたのである。

ここでキーになった技術のひとつは、DNA・タンパク質複合体に対する MD シミュレーションであり、生体高分子を熟知した研究者が注意深くこれを行えば、現在の同計算技術は、基本的な物理量の予測のために、既に十二分な精度を有するものである。残された問題は、時間スケールの拡張と、それに伴う生体高分子の動的構造変化(コンフォメーション変化)を的確にとらえる点にある。換言すれば、現在の MD 計算技術は、生体高分子構造のグローバルな安定点近傍では、基本的な物理量を精度よく予測するのに十分な精度を有するが、他方でそうした安定点近傍をはずれる場合には、先に述べた問題が表面化する。

これらに対応するためには、相互作用をより高精度に記述することが、まず必須となる。分子科学における古典力学は、所詮量子力学の近似なのであるから、必ずその理論的な限界に直面するのは必至である。とはいっても、上記のような原子数・数万個の系に対して、その全体を第一原理に基づいて取り扱うことは、まだしばらく不可能である。仮に、全系を第一原理に基づいて計算したとしても(実際、 $\sim 1,000$ 個の原子よりなる生体高分子系では可能)、なおかつ第一原理計算の側にも、現在のレベルではその計算精度に深刻な問題が内在する(電子交換相関項の取り扱い、生体高分子において極めて重要)。したがって、古典および第一原理との補完的な適用こそが、今後の分子生命科学の理論研究におけるひとつのキーとなることは間違いない。

11. まとめ

最後に、忘れてはならない一点について言及する。分子生命科学においては、理論・計算科学のみが独走する研究は非常に危険である。「実際の生体システム内においては、この点は一体どうなっているのか？」という視点を常に保持することが極めて重要である。本稿全体のスタイルの中でもその点を明確に示すために、前半部分の多くを割いて、生命科学におけるタンパク質・核酸(DNA)のコンピュータ・シミュレーションの意義について述べた。

本稿では、スペースの関係で到底詳述できないが、実際に我々は従来より、生命科学において重要な因子(タンパク質や遺伝子)を自ら探し出し、さらにその立体構造を自ら高精度で決定し、それに基づいて新しい生命科学を創造することを常に心がけてきた。そうした過程では、実験科学・計算科学の区別は無意味である。両者が密接に共同して、ひとつの研究課題に向かって邁進してこそ始めて、真に新しい生命科学の創造が可能になると、我々は信じて疑わない。本稿の前半部分で述べたように、はからずも時代は、そうしたいわば科学全体に対する我々の提案を完全に肯定するかのようになり、進みつつある。その意味において、まさにこれから、生命科学におけるシミュレーションサイエンスの意義が、限りなく増大すると信じるものである。

謝辞

DNA・タンパク質複合体形成における自由エネルギー変化を記述する汎関数の開発は、プリンストン大学の Novotny 教授と Brown 君(大学院博士課程)、産総研の古明地氏らとの共同研究である。

散逸粒子動力学シミュレーションによる 両親媒性分子超分子構造の解明

核融合科学研究所 理論・シミュレーション研究センター 中村 浩章¹

1 はじめに

両親媒性分子の集合体構造の振舞いを調べるために、近年開発された散逸粒子動力学 (DPD) シミュレーション [1, 2, 3, 4, 5] を用いる。従来行われている全原子分子動力学 (all-atom MD) シミュレーションでの計算限界は 10 ns、10 nm である。しかし両親媒性分子の超分子構造のダイナミクスは、それらより大きな時空間での振舞いになるため、all-atom MD シミュレーションでは不十分である。そこで、MD の粗視化にあたる DPD シミュレーションを用いる。

この DPD シミュレーションを用いた両親媒性分子の超分子構造ダイナミクスの研究は、我が国でも行われている。例えば、溶媒中の理想化した両親媒性分子の集団は、ランダムもしくは 2 つの平面状の二分子膜状態を初期条件から、一つのベシクルを構成するようなシミュレーションが、山本達により行われている [6, 7]。これにより、超分子構造形成シナリオを調べることができるようになった。

本発表ではメソスケールでの両親媒性分子の超分子構造の振舞いとして古くから知られているヘキサエチレングリコールドデシルエーテル ($C_{12}E_6$) の相図 [8] の解明を行うため、DPD シミュレーションを用いて行う。この系の DPD シミュレーションは、Jury 達により行われており、実験で分かっている相図を部分的に再現をしている [9]。本発表では、DPD シミュレーションを用いて、相図のより広い部分の再現を目指す。

2 計算アルゴリズム

両親媒性分子を構成する原子、および、溶媒分子数個を一つの粒子として粗視化して扱う。この粗視化粒子は質量が同じであると仮定する。このように選んだ粒子の古典運動方程式を、速度ベレル法で数値積分し解いていく。粒子 i に働く力 \vec{f}_i を次のように仮定する。

$$\vec{f}_i = \sum_{j \neq i} (\vec{F}_{ij}^C + \vec{F}_{ij}^R + \vec{F}_{ij}^D + \vec{F}_{ij}^S), \quad (1)$$

ここで、 \vec{F}_{ij}^C は保存力、 \vec{F}_{ij}^R はランダム力、 \vec{F}_{ij}^D は散逸力を各々表す。これらは、粒子 i と粒子 j の二体間力であることが、特徴である。さて、さらにこれらの力は具体的には、以下のごとくかける。なお、 $\vec{r}_{ij} \equiv \vec{r}_i - \vec{r}_j$ 、さらに、 $r_{ij} \equiv |\vec{r}_{ij}|$ 、 $\vec{e}_{ij} \equiv \vec{r}_{ij}/r_{ij}$ と定義する。また、カットオフとして R_C を導入する。

$$\vec{F}_{ij}^C = \begin{cases} -a_{ij}(1 - r_{ij}/R_C)\vec{e}_{ij} & \text{if } r_{ij} < R_C, \\ 0 & \text{if } r_{ij} \geq R_C, \end{cases} \quad (2)$$

$$\vec{F}_{ij}^R = \sigma w(r_{ij})\vec{r}_{ij}\zeta/\sqrt{\delta t}, \quad (3)$$

$$\vec{F}_{ij}^D = -\frac{1}{2kT}\sigma^2 w(r_{ij})^2 (\vec{v}_{ij} \cdot \vec{r}_{ij}) \vec{r}_{ij}, \quad (4)$$

¹ E-mail: nakamura@tcsc.nifs.ac.jp

ここで、関数 $w(r)$ は以下の式で書ける。

$$w(r) = \begin{cases} (1-r) & \text{if } r < R_C, \\ 0 & \text{if } r \geq R_C, \end{cases} \quad (5)$$

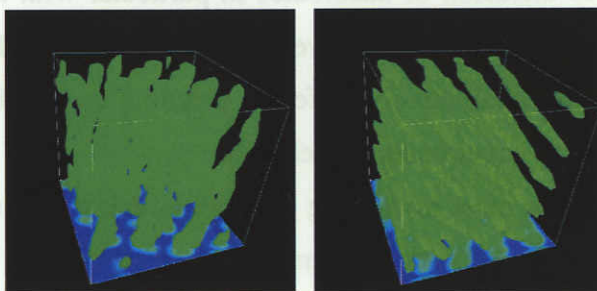
さらに、両親媒性分子内で、隣接粒子間には以下のような束縛力が働く。

$$\vec{F}_{ij}^S = a_k(r_{ij} - r_0)\vec{e}_{ij} \text{ if } i \text{ is connected to } j. \quad (6)$$

以上を用いて計算する。尚境界条件としては、周期境界を用いる。

3 計算結果

非イオン界面活性剤の $C_{12}E_6$ を、溶媒（水）中にランダムに配置した初期状態から計算を始める。また速度については、各粒子には、系の温度に相当するマクスウェル分布を満たすように与える。最終的に得られる系の超分子構造は、 $C_{12}E_6$ の濃度、そして系の温度に応じて、時間発展する。例えば $C_{12}E_6$ の濃度が 50 % の場合にはヘキサゴナル構造、65 % ではラメラ構造を得た（右図）。これは実験的に得られた相図と一致する。



図：モデル化した両親媒性分子 ($C_{12}E_6$) の濃度による形態（相）の変化溶媒と溶質の質料比が、50 %（左）の時ヘキサゴナル相になり、65 %（右）は、ラメラ相になる

謝辞

本研究をすすめるにあたり、東大生産研田中肇教授には、貴重なアドバイスを数多く頂きました感謝申し上げます。

参考文献

- [1] P. J. Hoogerbrugge and J. M. V. A. Koelman, Europhys. Lett. **19**(1992), 155.
- [2] J. M. V. A. Koelman and P. J. Hoogerbrugge, Europhys. Lett. **21**(1993), 363.
- [3] R. D. Groot and P. B. Warren, J. Chem. Phys. **107**(1997), 4423.
- [4] R. D. Groot and T. J. Madden, J. Chem. Phys. **108**(1998), 8713.
- [5] R. D. Groot and K. L. Rabone, Biophys. J. **81**(2001) 725.
- [6] S. Yamamoto, Y. Maruyama, and S. Hyodo, J. Chem. Phys. **116** (2002)5842.
- [7] Erratum: S. Yamamoto, Y. Maruyama, and S. Hyodo, J. Chem. Phys. **117** (2002)2990.
- [8] D. J. Mitchell, et al., J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1, **79** (1983)975.
- [9] S. Jury, et. al, Phys. Chem. Chem. Phys. **1**(1999),2051.

Arrhenius diffusivity and intra-well temperature in power-law correlated cluster surface diffusion.

Yutaka Maruyama

*National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST),
2266-98 Anagahora, Shimo-shidami, Moriyama-ku, Nagoya 463-8560, Japan*

Surface diffusion of adsorbates in particular with many internal degrees of freedom has been intensely studied over the past few years. This is because they interact with surfaces via qualitatively different potential energy from that for single adatoms and often exhibit novel complex behavior.

One of the most interesting findings is that the experimentally observed fast surface diffusion of gold nanoclusters on graphite[1] is a "Levy-walk"[2] more strictly, a "truncated Levy-walk,"[3] in which sticking durations (periods of time which the cluster spends in oscillating before escaping from a potential well) and jump durations (periods of time between two successive stickings) both obey power-law distributions, having no characteristic time scale. The power-law nature of the diffusion implies the presence of nonexponentially correlated activation-relaxation processes, which contrasts markedly with the appearance of exponentially correlated thermal activation-relaxation processes in the majority of systems. Long(-lived) jumps as well as short stickings conflict with the widely accepted hypothesis of local-equilibrium within a potential well. Hence, the applicability of equilibrium rate theory such as transition state theory (TST), in which jump frequency can be generally understood, at least except for very high temperatures, in terms of the Arrhenius form, $\exp(-E/k_B T)$ (k_B is Boltzmann's constant), seems to be questionable. However, experimentally, the temperature dependence of diffusion coefficients was found to be an Arrhenius-type, confusing us.

My question is whether the power-law correlated activation-relaxation dynamics can actually accord with Arrhenius behavior? Computationally, temperature dependence of the power-law diffusion dynamics as well as that of diffusion coefficients has not been examined yet because the absence of characteristic time scales makes the convergence of diffusivities and statistics remarkably slow, requiring extremely long ($> \mu$ s) MD

runs[3]. Here I therefore study the temperature dependence in the range of 200-670 K by performing extremely long ($10 \mu s$) MD simulations with a Langevin-thermostated two-dimensional Frenkel-Kontrova(FK)-type[4] cluster-surface model[3] (see Fig.1).

Here in this wok[5] we observe Arrhenius behavior in diffusivity; however, it originates mainly from the temperature dependence of the mean square jump length but not from that of the mean jump frequency. Intra-well temperature of the cluster as a whole, which is defined as the mean kinetic energy in sticking states, is lower than substrate temperature. This conflicts with the widely accepted hypothesis of local-equilibrium within a potential well.

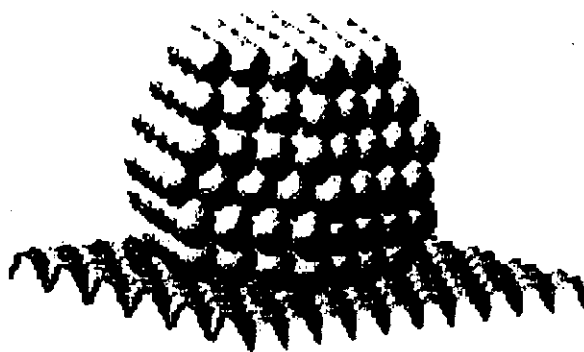


Fig.1 Snapshot of a gold nanocluster (Au_{245}) on graphite (two-dimensional potential surface).

- [1] L. Bardotti et al., Surf. Sci. 367, 276 (1996) and references therein.
- [2] W. D. Luedtke and U. Landman, Phys. Rev. Lett. 82, 3835 (1999).
- [3] Y. Maruyama and J. Murakami, Phys. Rev. B 67, 085406 (2003).
- [4] The classical standard Frenkel-Kontorova model represents an infinitely long one-dimensional chain of particles harmonically coupled with their neighbors and subjected to an incommensurate sinusoidal potential.
- [5] Y. Maruyama, in preparation.

2次元電磁流体での渦法 ～電流・渦法～

京都大学人間環境学研究所 八柳祐一

概要

2次元非圧縮性理想電磁流体に適用可能な渦法(電流・渦法)についての研究である。渦法では、渦フィラメントの運動を追跡することにより、流体系の時間発展を追跡する。一方、本モデルでは、渦フィラメントの中に電流が同軸状に流れる“電流・渦フィラメント”の運動を追跡することにより、電磁流体系の時間発展を追跡する。電流・渦法を用いたシミュレーションでは、ピオサバル積分を多用する。ピオサバル積分は、時間計算量が粒子数(メッシュ数)の2乗に比例する計算なので、この部分が高速化できれば、シミュレーション時間を大幅に短縮することが可能となる。我々は、この目的のために、分子動力学専用計算機 MDGRAPE-2 を用い、シミュレーション時間を短縮することに成功した。また、分子動力学専用計算機と電流・渦法を用いて得られた結果は、汎用スーパーコンピュータと通常の MHD コードを用いて得られた結果と定性的に一致することが確認できている。

1. 初めに

渦法は、流体力学の数値解析技法として有名である [1]。我々は今回、渦法を電流と渦がともに存在する 2次元電磁流体系に適用できるよう拡張を行った [2]。渦法では、渦フィラメント(2次元平面上では点渦)の動きを追跡することにより、流体系の時間発展を追跡する。一方、我々が今回扱う「電流・渦法」では、渦フィラメントではなく、電流・渦フィラメント [3] の時間発展を追跡する。電流・渦フィラメントは、渦フィラメントと電流フィラメントが同軸状に共存する構造である。電流と渦は、常にフィラメント内に閉じこめられており、それらが時間発展の途中で離れていくことはない。

電流・渦法では、電流分布と渦度分布は、2次元平面上の点渦、点電流の和で表される。また、磁場、速度場は、ピオサバル積分により求めることが可能である。粒子的なイメージがかなり強い電流・渦法は、高磁気レイノルズ数の系のシミュレーション向いている。これは、空間メッシュが必要ないことに由来する特長である。しかし、磁場、速度場を決定するために用いるピオサバル積分には、粒子数の2乗に比例した計算時間が必要なので、マシブなシミュレーションを行う場合には、この時間を減らす工夫が重要となる。我々は、この目的のために、分子動力学専用計算機 MDGRAPE-2 を用いた。

MDGRAPE-2 は、重力多体専用計算機 GRAPE から派生した計算加速用ハードウェア [4] であり、分子動力学シミュレーションに必要なファン・デル・ワールス力やクーロン力を高速化できる。また、ポアソン方程式に対するグリーン関数をソフトウェア的に入替え可能なので、3次元系だけでなく、2次元系の計算も可能である。今回の計算では、MDGRAPE-2 を、ピオサバル積分を高速化するために用いている。シミュレーション時間は、使用する MDGRAPE-2 ボードの枚数やシミュレーションで扱う粒子数に依存するため、単純には比較できないが、電流・渦法と4枚の MDGRAPE-2 を用いると、電磁流体方程式を差分法で解くコードと汎用スーパーコンピュータ (FUJITSU VPP700E) 4 PE を用いた場合に比べて、おおむね3倍程度の高速化が行えた。また、これら2種類のシミュレーションで得られた結果は、定性的に同じ傾向を示すことが確認できている。

以下、第2章では電流・渦法について、第3章では分子動力学専用計算機 MDGRAPE-2 について、第4章では MDGRAPE-2 と電流・渦法を用いた場合と一般的な MHD コードと汎用スーパーコンピュータを用いた場合のシミュレーション結果の比較について、第5章では結論と今後の課題について述べる。

2. 電流・渦法

基礎方程式を以下に示す。

$$\frac{\partial \omega_z(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -(\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla) \omega_z(\mathbf{r}, t) + (\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla) j_z(\mathbf{r}, t) \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial A_z(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -(\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla) A_z(\mathbf{r}, t) \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.3)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.4)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = -\hat{z} \times \nabla A_z(\mathbf{r}, t) \quad (2.5)$$

$$\omega_z(\mathbf{r}, t) = \hat{z} \cdot \nabla \times \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \quad (2.6)$$

$$j_z(\mathbf{r}, t) = \frac{\hat{z}}{\mu_0} \cdot \nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \quad (2.7)$$

$\omega_z(\mathbf{r}, t)$, $j_z(\mathbf{r}, t)$, $A_z(\mathbf{r}, t)$ は 2次元平面に垂直な方向 (z 方向) を向く渦度, 電流, ベクトルポテンシャル, $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ は 2次元平面内の速度場, 電場, 磁場である。次に, 電流と渦度が電流・渦フィラメントとして離散的に存在していることを表すために, 次のようにベクトルポテンシャル $A_z(\mathbf{r}, t)$ と流れ関数 $\psi_z(\mathbf{r}, t)$ を定義する。

$$A_z(\mathbf{r}, t) = \sum_i J_i(t) G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \quad (2.8)$$

$$\psi_z(\mathbf{r}, t) = \sum_i \Omega_i(t) G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \quad (2.9)$$

$J_i(t)$, $\Omega_i(t)$ は, それぞれ i 番目のフィラメントの電流と循環, $G(\mathbf{r})$ はポアソン方程式に対するグリーン関数を表す。 $\mathbf{r}_i(t)$ は, i 番目のフィラメントの位置を示す位置ベクトルである。 $J_i(t)$, $\Omega_i(t)$ の意味は, $A_z(\mathbf{r}, t)$, $\psi_z(\mathbf{r}, t)$ から求められた電流分布 $j_z(\mathbf{r}, t)$ と渦度分布 $\omega_z(\mathbf{r}, t)$ が次の形になることを見ると, よりはっきりするだろう。

$$j_z(\mathbf{r}, t) = -\nabla^2 A_z(\mathbf{r}, t) = \sum_i J_i(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \quad (2.10)$$

$$\omega_z(\mathbf{r}, t) = -\nabla^2 \psi_z(\mathbf{r}, t) = \sum_i \Omega_i(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \quad (2.11)$$

$\delta(\mathbf{r})$ は 2次元でのディラックのデルタ関数である。さらに, 磁場 $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ と速度場 $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ は, 次式により求められる。

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = -\hat{z} \times \nabla A_z(\mathbf{r}, t) = \sum_i J_i(t) \nabla G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \times \hat{z} \quad (2.12)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = -\hat{z} \times \nabla \psi_z(\mathbf{r}, t) = \sum_i \Omega_i(t) \nabla G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \times \hat{z} \quad (2.13)$$

式 (2.12), (2.13) の右辺はビオサバル積分を表す。

以上の表式 (2.8) ~ (2.13) を用いて, 渦度方程式 (2.1) と磁場の誘導方程式 (2.2) を書き換える。まず, 渦度方程式に電流・渦フィラメントの表式を代入する。

$$\sum_i \frac{d\Omega_i(t)}{dt} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) - \sum_i \Omega_i(t) \nabla \cdot [\mathbf{U}_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)] = 0 \quad (2.14)$$

$$\text{ただし, } \mathbf{U}_i = \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} - \mathbf{u}(\mathbf{r}_i, t) + \frac{J_i(t)}{\Omega_i(t)} \mathbf{B}(\mathbf{r}_i, t) \quad (2.15)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}_i, t) = \sum_{i \neq j} \Omega_j(t) \nabla G(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j(t)) \times \hat{z} \quad (2.16)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1} J_i(t) \nabla G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \times \hat{\mathbf{z}} \quad (2.17)$$

式 (2.14) からある特定の k 番目のフィラメントに対する方程式を取り出すため、 k 番目のフィラメントの周りで半径 ε の面積積分を行う。

$$\frac{d\Omega_k(t)}{dt} - \Omega_k(t) \int_{\Sigma} \nabla \cdot [U_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)] d^2r = 0 \quad (2.18)$$

この式を偶関数部分と奇関数部分に分けて評価すると、次の二つの式が解として得られる。

$$\frac{d\Omega_k(t)}{dt} = 0 \quad (2.19)$$

$$\frac{d\mathbf{r}_k}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{r}_k, t) - \frac{J_k(t)}{\Omega_k(t)} \mathbf{B}(\mathbf{r}_k, t) \quad (2.20)$$

式 (2.19) は循環の保存則、式 (2.20) は k 番目のフィラメントの位置に対する時間発展方程式である。同様に、磁場の誘導方程式 (2.2) を書き直す。

$$\sum_i \frac{dJ_i(t)}{dt} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) - \sum_i J_i(t) \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} \cdot \nabla G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = - \sum_i J_i(t) (\mathbf{u} \cdot \nabla) G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (2.21)$$

k 番目のフィラメントの周りで半径 ε の面積積分を行い、 $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限をとると、次の式が解として得られる。

$$\frac{dJ_k(t)}{dt} = 0 \quad (2.22)$$

これは、電流の保存則を表す。

以上で得られた式 (2.19), (2.20), (2.22) が、電流・渦法の式となる。また、式 (2.20) での位置 \mathbf{r}_k での磁場と流速を求める式は、 $i = k$ としたビオサバル積分 (2.16), (2.17) である。

3. 分子動力学専用計算機 MDGRAPE-2

式 (2.16), (2.17) に現れるビオサバル積分は、計算時間が粒子数の 2 乗に比例し、全シミュレーション時間に対する割合も高くなりがちである。そこで、通常は、この部分を効率よく計算する工夫をする。たとえば、速い計算手法 (アルゴリズム) を用いることは、工夫の一つの例である。しかし、高速なアルゴリズムは実装が複雑で、コードのメンテナンスおよび拡張が行いにくいという欠点もある。すると、素直なアルゴリズム、単純なコードで速いコンピュータを使うというのが、非常に魅力的な方法に思えてくる。我々は、この最も単純な方法を採用し、ビオサバル積分を高速化するために分子動力学専用計算機 MDGRAPE-2 を用いた。

MDGRAPE-2 の写真を図 1 に示す。

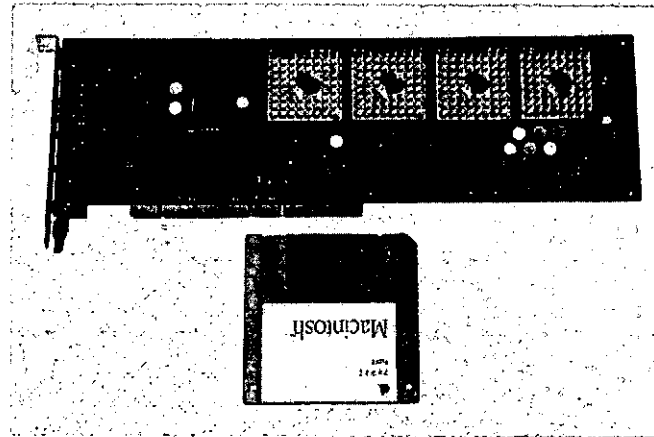


図 1 MDGRAPE-2

MDGRAPE-2は、64ビットPCIボードとして実装され、PCやワークステーションに挿して使用することができる。サポートOSは、RedHat Linux, Solaris, AIXなどであり、サポート言語は、FortranとCである。MDGRAPE-2は、プログラム中でライブラリ関数を呼び出す形で使用する。MDGRAPE-2を使用したクーロン多体系のプログラムの処理の流れを図2に示す。すなわち、MDGRAPE-2をプログラムで使用するためには、粒子の座標と各粒子の電荷を格納する配列と各粒子の位置での電場を格納する配列を用意し、ライブラリ関数を呼び出すだけでよい。

```

・MDGRAPE-2の初期化
・配列1に全 $R_i$  ( $i=1\sim 1000$ )を格納
・配列2に全 $Q_i$  ( $i=1\sim 1000$ )を格納
・各 $R_i$ での電場を格納するために、配列3を準備
do T=1, 10000 ←時間発展ループ
  ・配列1(粒子の座標)をMDGRAPE-2に渡す …①
  ・配列2(各粒子の電荷)をMDGRAPE-2に渡す …②
  ・配列1(電場を計算すべき位置 $R_i$ )と電場を格納するための配列3をMDGRAPE-2に渡し、MDGRAPE-2で電場の計算を開始。計算終了とともにプログラムの次の行へ処理が移る …③
  ・配列3に電場が求められているので、その電場に従って配列1の値、すなわち位置座標 $R_i$  ( $i=1\sim 1000$ )を更新 …④
end do
終了処理

```

図2 擬似コード

同じく、クーロン多体系で粒子数とボードの枚数を変化させた場合の計算速度を図3に示す。“Fastest Supercomputer”と書いてあるのは、このグラフを作成した当時、1PEで世界最高速を誇ったHITACHI SR8000シリーズの理論ピーク性能である。その他のグラフはMDGRAPE-2(Booster card 併用)とPentium3 PCを用いて実測したものである。粒子数が少ないところでボードの枚数が多い方が遅い場合があるが、これはPCIバス経由で各ボードに粒子の座標データなどを送る時間が計算時間に比べて長いためである。また、粒子数が多くなってくると計算速度が一定値に漸近していく傾向があるが、これも各ボードとの通信時間が計算時間に比べて長くなった結果である。すなわち、MDGRAPE-2を使用する場合には、シミュレーション規模に応じて使用する枚数をうまく選ぶ必要があることがわかる。

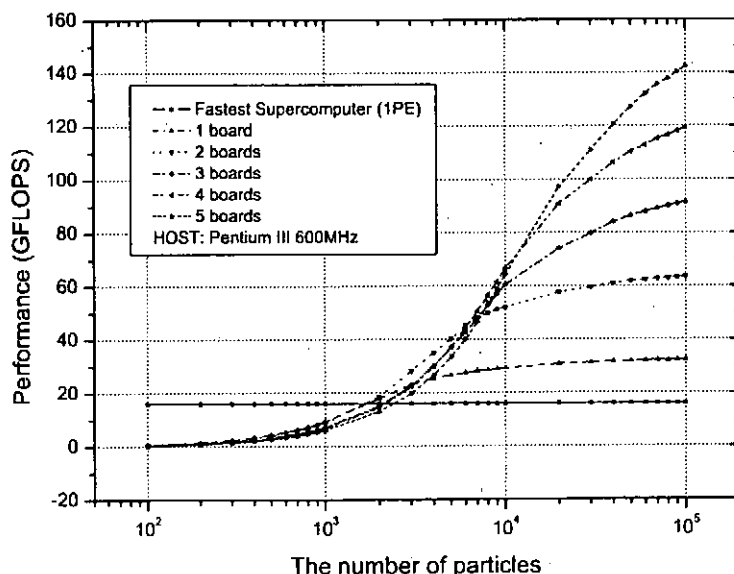


図3 計算速度

4. シミュレーション結果

ここでは、電流・渦法と MDGRAPE-2 を用いて計算した結果 (図 4) と、通常の MHD コードと汎用スーパーコンピュータを用いて計算した結果 (図 5) を比較する。シミュレーション領域内には、1つの長い電流シートと3つの小さい渦シートが共存しており、ちょうど、電流シートの中に3つの渦シートがある状態になっている。これらは相互作用をしながら時間発展をしていく。図 4, 5 では、電流シートと渦シートそれぞれの時間発展の様子をプロットしてある。時間の単位はこの系のアルベン時間である。シート以外の部分には、電流、渦度ともに存在しない。図でのシートがある以外の場所での灰色がゼロレベルを表す。その灰色に対して黒側はプラス、白側はマイナスの分布を意味している。

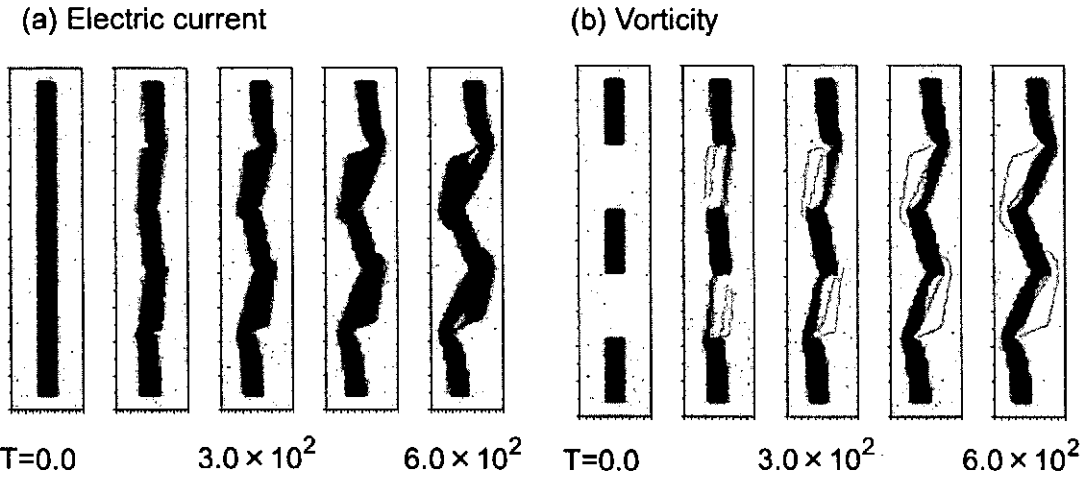


図 4 電流・渦法による結果

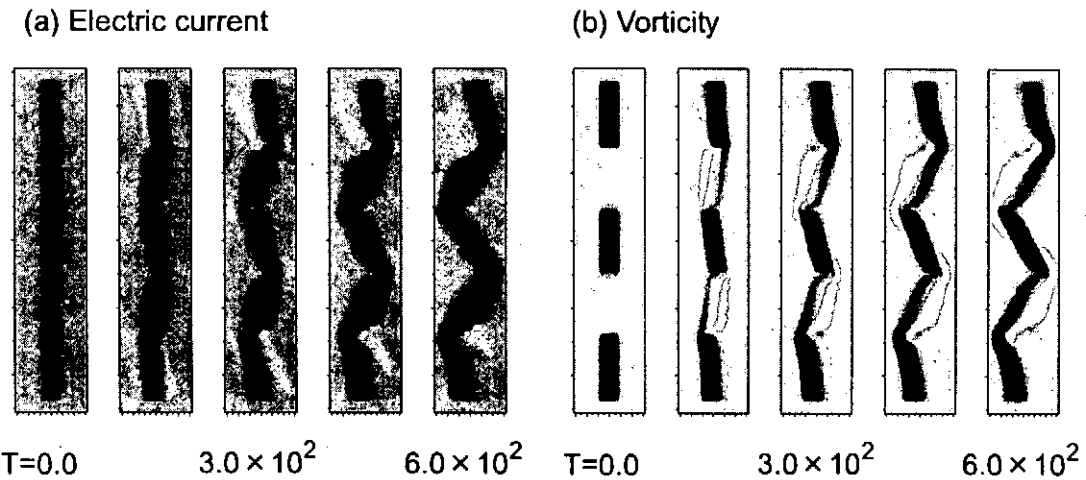


図 5 通常の MHD コードによる結果

図 4 の結果では、 10^5 個の電流・渦フィラメントと MDGRAPE-2 ボード 4 枚を用いた。一方、図 5 の結果は、 3.3×10^4 個の正方メッシュと FUJITSU VPP700E 4PE を用いた。シミュレーション結果では、渦度分布に従って電流分布がフィラメント化されていく様子が示されている。なお、シミュレーション結果の詳細は、文献 5 を参照してほしい。どちらの方法を用いても、定性的に同等の結果が得られることが、図 4, 5 より読み取れる。単純な比較は難しいが、計算時間は図 4 の場合で約 110 分、図 5 の場合で約 350 分であり、かなり高速な計算が可能である。電流・渦法は形式的には渦法とまったく同様なので、渦法のシミュレーションに MDGRAPE-2 を用いても同様な高速化が十分期待でき、実際に、非中性プラズマでの渦現象に関するシミュレーションに応用した例がある [6]。

5. 結論と今後の課題

粒子的な描像で電磁流体シミュレーションを行うための方法、電流・渦法に関する報告である。本モデルは、その性質上、高レイノルズ数の系のシミュレーションに向いている。また、ピオサバール積分をMDGRAPE-2で行うことにより、計算量が多い電流・渦法でも実用的な時間でシミュレーションを完了することができる。

しかし、電流・渦法は渦法と全く同様の問題も抱えている。すなわち、現象を再現する最も少ない数の粒子で行ったシミュレーションが、もっともよい結果を与えるということだ。粒子数をあげていくと、明らかに粒子同士の衝突に由来する粘性効果が働き、タイムスケールが異なってくるのである。この現象について、現在、定量的な評価をする方法について研究を進めている。

謝辞

本研究は、理化学研究所 基礎科学特別研究員制度、および日本学術振興会 特別研究員制度の支援を受けて行われました。理論モデルに関する議論をしていただいた羽鳥尹承教授(神奈川大学)、加藤剛一教授(早稲田大学)、そして、シミュレーション・モデルに関する議論をしていただいた戎崎俊一郎長(理化学研究所)に、深く感謝を致します。

References

- [1] A. Leonard: *J. Comput. Phys.* **37** (1980) 289.
- [2] Y. Yatsuyanagi, T. Ebisuzaki, T. Hatori and T. Kato: *Phys. Plasmas* **10** (2003) 3181.
- [3] Y. Yatsuyanagi, T. Hatori and T. Kato: *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** (1996) 745.
- [4] R. Susukita, T. Ebisuzaki, B. G. Elmegreen, H. Furusawa, K. Kato, A. Kawai, Y. Kobayashi, T. Koishi, G. D. McNiven, T. Narumi, K. Yasuoka: *Comput. Phys. Commun.* **155** (2003) 115.
- [5] Y. Yatsuyanagi, T. Ebisuzaki, T. Hatori and T. Kato: *Phys. Plasmas* **9** (2002) 446.
- [6] Y. Yatsuyanagi, T. Ebisuzaki, T. Hatori and T. Kato: *Phys. Plasmas* **10** (2003) 3188.

階層連結モデルによる 相対論プラズマのシミュレーションとレーザー核融合

坂上 仁志, 長友 英夫*, 城崎 知至*, 三間 罔興*

姫路工業大学大学院工学研究科

*大阪大学レーザー核融合研究センター

1. はじめに

超高強度レーザーを発生させる各種技術の進展によって相対論プラズマの実験が可能となり、レーザー核融合、レーザー加速器、レーザープラズマX線源等への応用分野が急速に広がっている。そのため、相対論的なレーザープラズマの相互作用と高エネルギー電子やイオンの生成、その高エネルギー粒子の輸送と高密度プラズマとの相互作用等は、高速点火核融合、コンパクトレーザー加速器によるイオンビーム生成と医療応用、高エネルギー加速器等の分野では、重要な研究テーマである。この分野では、今までに多くの理論的および実験的研究成果が蓄積されており、体系的に現象の理解を深めることで更なる研究の展開が期待されている。そのためには、現在までの知見を一貫して記述しうる統合シミュレーション技術確立し、相対論レーザープラズマの諸現象を統一的に理解することが急務となっている。

相対論レーザープラズマでは図1に示すように、プラズマ電磁現象、量子電磁力学的現象、原子・分子や原子核過程が複雑に絡み合った様々な現象が数十ミクロンの非常に狭い領域で発生する。これまで、これらの諸現象は、マイクロ領域、マクロ領域においてそれぞれ個別に取り扱われていたが、知見の体系化のためにはそれらを統合して扱う大規模シミュレーションが不可欠である。

超高強度レーザープラズマの特性を明らかにするためには、電磁粒子シミュレーションやフォッカープランクシミュレーションが必要であり、時間・空間についてレーザーの波長や周期を捕らえることのできる分解能が求められる。一方、発生するγ線や電子線のエネルギーは高いので、飛程が固体中でもミリメートルのオーダーになるため、数ミリメートルの空間スケールのシステムをナノ秒にわたり追跡することが必要になる。このような現象を単一のシミュレーションコードで計算することは、世界最大のコンピューターをもってしても不可能であり、階層的に積み上げられた各種のシミュレーションコードからなる統合されたシミュレーションシステムの構築が必然である。

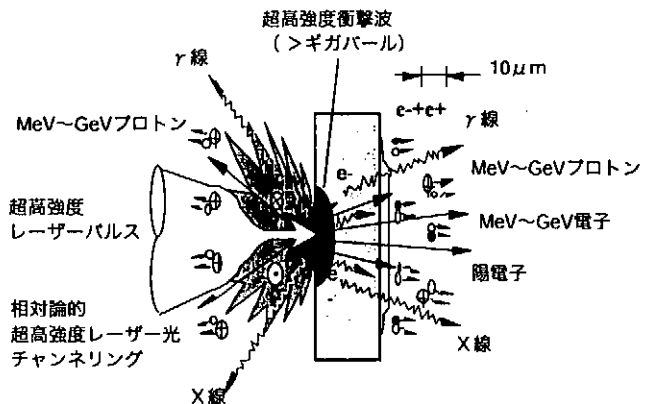


図1：相対論レーザープラズマ

2. 高速点火

従来の爆縮によってターゲット中心にホットスポットを生成し、自然点火により核融合反応を引き起こす方式では、流体力学的不安定性による均一圧縮の阻害を避けるため、ターゲットそのものの加工球対称性およびドライバの照射均一性について強い制約がある。また、爆縮に多くのドライバエネルギーが費やされるため、エネルギーの利用効率が低く大きな利得を得ることは難しいと考えられている。そこで、爆縮と点火をまったく別のステップで実現する高速点火の概念が考案されている[1]。高速点火とは、比較的長いパルスのレーザーによって低温で高密度に圧縮されたターゲットに超高強度の短パルスレーザーを打ち込んで点火

を行う方式である。この方式では、従来のホットスポット自然点火方式よりも高利得が期待でき、点火に必要なドライバエネルギーの大幅な低減が期待されている。この高速点火の中でも、点火用超高強度レーザーを爆縮された燃料中心に容易に導けるよう、金コーンを付加したターゲットを用いる方式が脚光を集めており、実験が進められている[2,3]。この金コーン付きターゲットを用いた高速点火の物理を総合的に理解するためには、ミクロな現象とマクロな現象が相互に入り組んで絡み合った複雑現象を解明することが必要であり、階層的な大規模計算機シミュレーションによる研究が重要だと考えられている。この階層化を高速点火に当てはめると、以下に示す3つの物理現象が考えられる。

- 1) 爆縮用レーザーの吸収と爆縮によるオーバーオールな流体運動
- 2) 点火用超高強度レーザーの吸収と高速電子の生成
- 3) 高速電子の伝播とエネルギー緩和および原子核反応

まず、オーバーオールな流体運動は、物質の空間スケールと形状が大きく変化することを考慮してALE(Arbitrary Lagrangian Eulerian)流体コードを用いる[4]。次の超高強度レーザーとプラズマの相互作用は、現象を忠実に記述できる相対論的集合型粒子コードを用いる[5]。最後の高速電子のエネルギー緩和については、フォッカープランクコードにより精密に計算する[6]。以上述べた3つのコードがそれぞれ受け持つ計算領域の模式図を生成されるプラズマの密度プロファイルと共に図2に示す。

この3つの独立したコードをデータ交換しながら協調動作をさせて、統合的にシミュレーションできるシステムを目指している。各コードを独立としたことで開発や保守が容易になり、コード毎に計算方法や計算粒度に適したベクトル型計算機または並列計算機を適材適所を選ぶことが可能になる。協調動作の際に3つのコード間でやり取りすべきデータを結合ダイヤグラムとして図3に示す。コードの実行時間スケールを考慮すると粒子コードおよびフォッカープランクコードのシミュレーション結果がALE流体コードの実行状態に大きな影響を与えないと考えられるので、統合化の最初の段階では、黒矢印で示す一方向のデータ交換のみを考えている。つまり、ALE流体コードから粒子コードとフォッカープランクコードに爆縮過程で生成されるプラズマの密度プロファイルを渡す。そして、粒子コードを用いてレーザー・プラズマの相互作用をシミュレーションし、発生する高速電子の分布関数をフォッカープランクコードに渡すことを考えている。このため、データ交換にはシステム上のフィードバックがなく、データ交換に伴う数値的な不安定性は発生しない。ただし、統合化の次段階では、双方向性のデータ交換を計画しており、より長時間スケールの現象を扱う予定である。即ち、粒子コードでシミュレーションされた点火用レーザーによるポンドラモーティブ力を圧力項としてALE流体コードにフィードバックする。また、フォッカープランクコードによってシミュレーションされたリターン電子の分布を粒子コードの背景電子として反映する。更に、ターゲットコア中で起

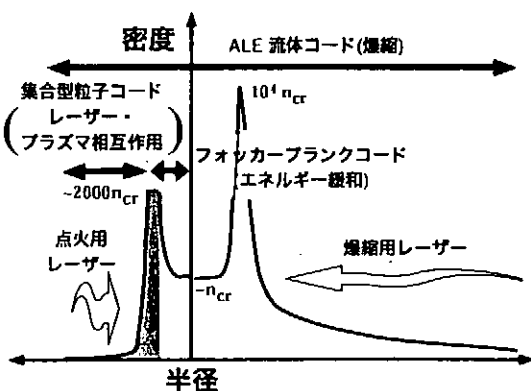


図2：密度プロファイルと計算領域

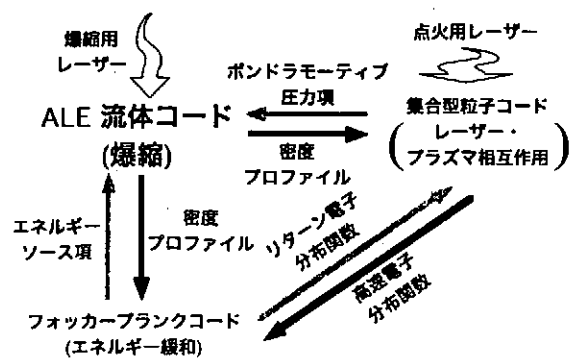


図3：コードの結合ダイヤグラム

この原子核反応をフォックープランクコードで計算することによって、その効果をエネルギーのソース項としてALE流体コードにフィードバックし、流体運動を補正する。

3. コード間連携プロトコル

この統合シミュレーションシステムのコード間通信は単機能であることを考慮して、TCP/IP ベースの軽装な専用プロトコル Distributed Computing Collaboration Protocol (DCCP) を設計・開発・実装し、高速IPネットワークを介しての複数コードの同時協調実行を可能にする[7]。このプロトコルを TCP/IP の上位プロトコルとすることで、サイト内では通常のLANが利用でき、サイト間ではインターネットを利用できるため、適用範囲は非常に広い。

手続き不要なシステムとし、ユーザにとって容易なプログラミング・インターフェイスを提供するため、このプロトコルは、統合して動作する複数のコードを実行管理するためのアービトレータと各コード間での通信を実際に行うコミュニケータで実装する。本プロトコルの制御用およびデータ転送には、通常の TCP/IP プロトコルを用いる。DCCP を用いたコード間における実際の通信の様子を図4に示す。DCCP では、各コードはそれが属するコミュニケータと通信するだけで、コード間では直接通信しない。コミュニケータ情報およびそのコミュニケータに属するコードの情報は、アービトレータが一括管理しており、ユーザはどのコードがどの計算機で起動しているか等について特別な配慮をしなくても、送信側のコミュニケータが受信すべき相手側のコミュニケータをアービトレータに照会し、適切なコミュニケータ間で自動的にデータ通信が行われる。その結果、コミュニケータを介して、コード間の通信が実現できている。また、DCCP は、非同期通信をサポートしており、送受信を行うコードは、同時に起動していなくてもかまわない。データを受信すべきコードがまだ起動していない場合でも、送信されたデータはコミュニケータのハードディスク上にいったん保存され、送信側コードは正常に送信処理を終了する。その後、受信側のコードが起動すると、アービトレータはデータを保存していたコミュニケータにデータ送信を依頼し、データはハードディスクから復元されて、自動的にコミュニケータを介して受信側のコードに転送される。更に、昨今セキュリティ対策のためにファイアウォールを設置することが多いことを考慮して、DCCP の通信をファイアウォール越しでも可能とするための中継システムも併せて導入した。この機能はトランスポンダを用いて実装され、アービトレータとコミュニケータ間および異なるコミュニケータ間での通信を中継する。また、トランスポンダは多階層の中継を可能としており、複数のファイアウォールを越えることも可能である。

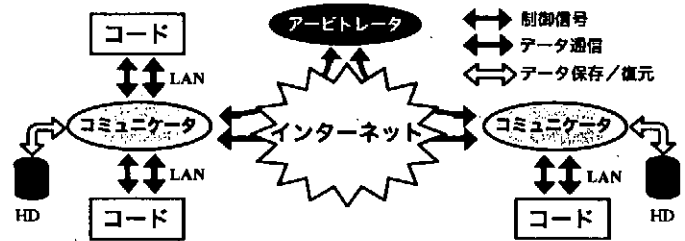


図4：DCCPの構成

DCCPを利用するためにユーザが呼び出すべき FORTRAN サブルーチンは以下の4つであり、ユーザプログラミングは非常に容易である。

```
call DCCP_INITIALIZE ( CodeName, RunName, Cnd )
call DCCP_SEND ( N, Type, Data, DstCode, DstRun, Tag, Cnd )
call DCCP_RECEIVE ( N, Type, Data, SrcCode, SrcRun, Tag, Timeout, Cnd )
call DCCP_FINALIZE ( Cnd )
```

まず、各コードは、自分を管理するコミュニケータに対して初期化を要求し、初期化を依頼されたコミュニケータは、コード情報をアービトレータに転送する。この結果、どのコードがどのコミュニケータ配下に

あるのがアービトラータによって把握され、以降のコード間通信が可能となる。通信すべきデータは、コード固有の名前であるコード名 (CodeName)、同一のコードで実行される異なったシミュレーションパラメータを区別するためのラン名 (RunName) および実行中の時間ステップ等を区別するためのタグ (Tag) で指定する。このデータの3レベル指定により、コード間の柔軟なデータ通信が可能になる。

4. コード統合

コード統合を検証するため、まず、ALE 流体コードから粒子コードに密度プロファイルを渡してシミュレーションを行った。つまり、ALE 流体コードは爆縮過程をシミュレーションし、最大圧縮近傍の密度プロファイルを保存する。そして、粒子コードは、そのプロファイルを読み込んで初期プラズマとし、レーザー・プラズマの相互作用をシミュレーションする。この結果、現実的なプラズマプロファイルと線形勾配のような便宜的なプラズマプロファイルでは、超高強度レーザーとプラズマの相互作用は大きく異なることがわかった[8]。このため、ALE 流体コードから粒子コードに密度プロファイルを渡すコード結合は、高速点火を詳細にシミュレーションするためには極めて重要であり、本統合システムの必然性を示唆している。

次に、粒子コードからフォッカー・プランクコードに高速電子の分布関数を渡し、実際の条件下でのターゲットコアの加熱を評価した。つまり、粒子コードはレーザー・プラズマ相互作用をシミュレーションし、高速電子の分布関数を定期的に保存する。そして、フォッカー・プランクコードは、その分布関数を読み込んで高速電子の時間依存性のあるソース項として扱い、同時に背景プロファイルを ALE 流体コードから得てエネルギー緩和をシミュレーションする。テストケースとして統合シミュレーションした結果得られた、ターゲットコアの加熱の様子を図5に示す。

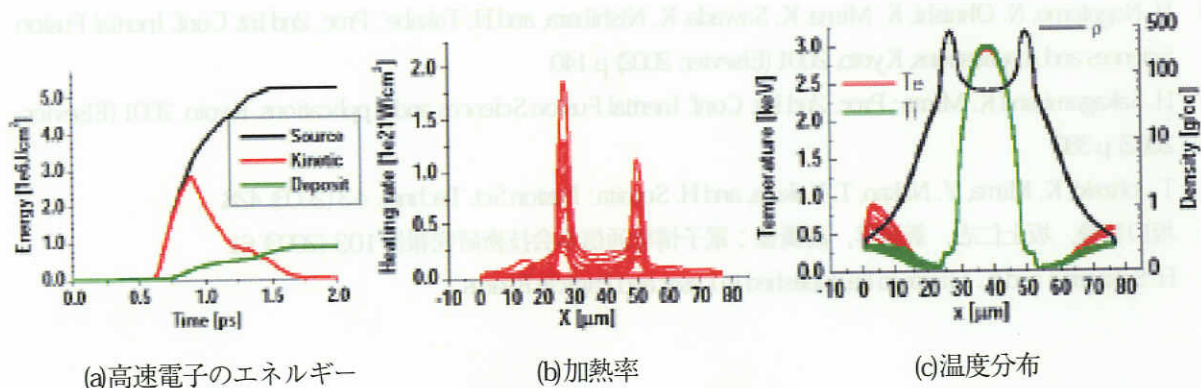


図5：統合シミュレーションの結果

図5(a)は、粒子コードからフォッカー・プランクコードに渡された高速電子エネルギーと吸収されたエネルギーの時間変化である。高速電子エネルギーの約20%がコア加熱に寄与したことがわかる。図5(b)は、高速電子による加熱率である。ターゲットの高密度部で加熱率が大きいことがわかる。図5(c)は、ターゲットの温度分布である。入射した点火用レーザーの総エネルギーが小さいことと、高速電子が高エネルギーのため平均自由行程が長く効率良くコア近傍でエネルギー付与が起こらなかったため、あまりイオンの温度上昇は観測できなかった。

5. まとめ

多くの研究分野において、ミクロな現象とマクロな現象が相互に入り組んで絡み合った複雑現象の全体的な理解が強く求められており、大規模計算機シミュレーションシステムは、そのための有効なツールと考えられている。しかし、時間スケールや空間スケールがそれぞれ大きく異なる現象を、単一コードでシミュレーションすることは不可能であり、現象を別々のコードでシミュレーションし、お互いにデータ交換しながら

ら協調動作をさせ、統合的にシミュレーションできるシステムが必要となる。このようなシステムでは、コード間の通信に複雑な処理は必要ないので、この通信を実現するための軽装な専用プロトコル Distributed Computing Collaboration Protocol を提案した。この結果、ユーザは簡単なプログラミングだけでコード間連携を実装できる。そして、高速点火を例として、複数のシミュレーションコードを階層的に積み上げて統合することにより、直接実験結果と比較できうる現実的な条件下でのシミュレーションが可能になることを示すことができた。

なお、現在は、このコード結合のためのデータの受け渡しはファイル転送を介してのオフライン結合であるが、これをDCCPを用いたオンライン結合で実証実験する予定である。

参考文献

- [1] M. Tabak, J. Hammer, M. E. Glinsky, W. L. Kruer, S. C. Wilks, J. Woodworth, E. M. Campbell, M. D. Perry, and R. J. Mason: *Phys. Plasmas* 1 (1994) 1626
- [2] R. Kodama, P. A. Norreys, K. Mima, A. E. Dangor, R. G. Evans, H. Fujita, Y. Kitagawa, K. Krushelnick, T. Miyakoshi, N. Miyanaga, T. Norimatsu, S. J. Rose, T. Shozaki, K. Shigemori, A. Sunahara, M. Tampono, K. A. Tanaka, Y. Toyama, T. Yamanaka, and M. Zepf: *Nature* 412(2001) 798
- [3] R. Kodama, H. Shiraga, K. Shigemori, Y. Toyama, S. Fujioka, H. Azechi, H. Fujita, H. Habara, T. Hall, Y. Izawa, T. Jitsuno, Y. Kitagawa, K. M. Krushelnick, K. L. Lancaster, K. Mima, K. Nagai, M. Nakai, H. Nishimura, T. Norimatsu, P. A. Norreys, S. Sakabe, K. A. Tanaka, A. Youssef, M. Zepf, and T. Yamanaka: *Nature* 418(2002) 933
- [4] H. Nagatomo, N. Ohnishi, K. Mima, K. Sawada, K. Nishihara, and H. Takabe: *Proc. 2nd Int. Conf. Inertial Fusion Sciences and Applications, Kyoto, 2001* (Elsevier, 2002) p.140
- [5] H. Sakagami and K. Mima: *Proc. 2nd Int. Conf. Inertial Fusion Sciences and Applications, Kyoto, 2001* (Elsevier, 2002) p.380
- [6] T. Johzaki, K. Mima, Y. Nakao, T. Yokota, and H. Sumita: *Fusion Sci. Technol.* 43(2003) 428
- [7] 坂口智哉, 坂上仁志, 新居学, 高橋豊: *電子情報通信学会技術研究報告* 103 (2003) 61.
- [8] H. Sakagami and K. Mima: to be published in *Laser and Particle Beams*.

電位構造形成の粒子シミュレーション

核融合科学研究所

理論・シミュレーション研究センター

石黒静児

1. はじめに

プラズマ中の静電電位構造は、磁気閉じこめ核融合研究装置のダイバータ領域などでの粒子輸送、熱輸送などに対して大きな影響を与えるばかりでなく、スペースプラズマでの荷電粒子の加速機構として重要な役割を担っている[1-3]。プラズマは導電性が非常によいので磁力線に平行方向の電場は生成されにくく、たとえ生成されても維持されにくい。そのため、その生成機構ならびに維持機構の解明は基礎的なプラズマ物理の研究対象としても興味深いものとなっている。プラズマ粒子シミュレーションは、現実的な初期条件、境界条件における静電電位構造の形成過程などを詳細に明らかにするための強力な研究手段となっている。これまで粒子シミュレーションで明らかになってきた沿磁力線電場を伴う電位構造形成の機構としては(1)電流駆動不安定性[4-6]、(2)磁場の不均一性と粒子速度分布の異方性[7-9]、(3)異種プラズマの接触[10]、(4)プラズマへの不純物の局所導入[11]、等がある。本稿ではこれらのうち(1)、(2)の典型例について紹介する。

2. 電流駆動不安定性による電位構造形成

電流駆動不安定性による電位構造形成としては、Buneman 不安定性、イオン音波不安定性などによる電気二重層（ダブルレイヤー）がよく知られている。オーロラ電子の加速を担う電位構造形成機構の候補としてはイオン音波不安定性、静電イオンサイクロトロン不安定性がある。イオン音波ダブルレイヤーは Sato and Okuda によって 1980 年、大規模長時間の粒子シミュレーションを実行することにより発見された[5]。ここで観測されたダブルレイヤーを横切る電位差は $T_e/e \sim 1(T_e/e)$ (T_e : 電子温度、 e : 電子の電荷)であるが、それが連なって形成されればオーロラ電子の加速に十分な電位差が得られるとした。その後、境界からフレッシュな電子を注入する自己無撞着開境界粒子シミュレーションモデルでのシミュレーションによりイオン音波不安定性領域においても非常に大きい電位差をもつダブルレイヤー（スーパーイオン音波ダブルレイヤー）が生成されることが新たに見いだされた[12]。

オーロラ電子加速を担う電位構造形成機構のもう一つの有力な候補として電流駆動静電イオンサイクロトロン不安定性がある。静電イオンサイクロトロン波は磁場とほぼ垂直に

伝播する波で、その周波数はイオンサイクロトロン周波数近傍及びその整数倍近傍となる。磁場に沿った方向にドリフトする電子によって不安定化され、広いパラメータ領域でイオン音波よりも小さい電子ドリフト速度で不安定となる[13]。また、衛星による観測では、イオンサイクロトロン周波数近傍の信号とともに V 字型電位構造の存在を示唆する結果が得られている[14]。このような背景の基に、室内実験及びシミュレーションでイオンサイクロトロン振動と V 字型電位構造の関連を解明するための研究が多数行われた。しかしながら、電流駆動静電イオンサイクロトロン不安定性による V 字型電位構造形成を実証することには長年成功しなかった。

電流駆動静電イオンサイクロトロン不安定性による V 字型静電電位構造形成は、新たに開発された二次元自己無撞着開放系粒子シミュレーションコードによる大規模シミュレーションによって初めて実証された[6]。図 1 は二次元開放系粒子シミュレーション、及びシミュレーション配位をしめしており、図 2 は電位構造形成の時間発展を示している。磁力線方向の電位差は不安定性に伴う異常抵抗により、磁力線を横切る方向の電位差は磁場を横切るイオン輸送によって形成されていると考えられている。

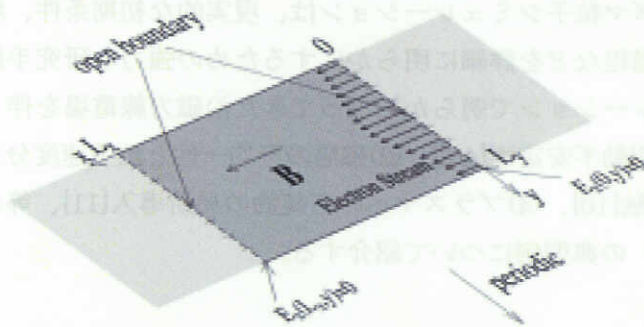


図 1. 二次元自己無撞着開放系粒子シミュレーションモデル。

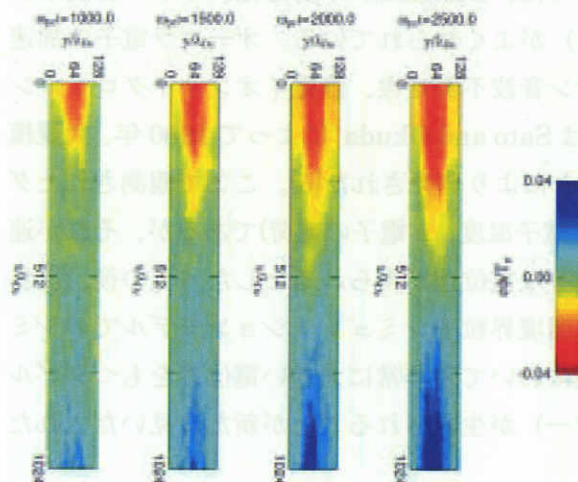


図 2. 静電イオンサイクロトロン不安定性に伴う V 字型電位構造形成。

3. 磁場の不均一性と粒子速度分布の異方性による電位構造形成

不均一磁場中でイオンと電子のピッチ角分布が異なる場合、沿磁力線電位差が形成しうる[15]。磁気圏尾部での磁場再結合によって生成された高速プラズマ流が極域上層に侵入し電位差が形成され、その電位差がオーロラ電子を生成しうる[16,17]。収束磁場に高速プラズマ流を入射するとイオンの方が電子に比べて強磁場領域に深く侵入しうるため電荷分離が生じ、電位差が作られる。この機構による電位差形成は、最初に、粒子の磁気モーメント保存を仮定した一次元粒子シミュレーションにより実証され[7]、さらに、Q マシン実験により実験的に検証された[18]。しかしながら、実験において形成される電位差のパラメータ依存性などには理論的予想と不一致があった。実験条件を考慮した2次元の粒子シミュレーションはこの実験結果をよく説明すると同時に二次元分布についてもよく一致する結果をえた[8]。図3は形成された二次元電位構造である。磁力線に沿って高磁場領域が高電位になっているのがわかる。それと同時に、磁場の収束領域でプラズマ流の境界領域に電位の山が形成されている。

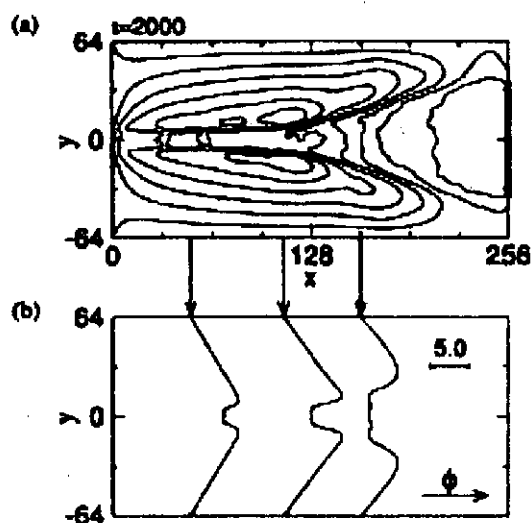


図3. 収束磁場への高速プラズマ流入射に伴う電位構造形成。

粒子の速度分布の異方性を作りうる機構として ECR 加熱がある。不均一磁場中で ECR 加熱をおこなうと電子のピッチ角が大きくなり、弱磁場領域に閉じこめられやすくなる。図4に示したような井戸型磁場配位のもとにプラズマ流を流し、弱磁場領域で ECR 加熱をおこなうと、電子は弱磁場領域に補足される。一方、イオンは下流域に流れていくため電荷分離が生じ、サーマルバリア付きプラグ電位型の電位構造が形成される(図5)[9]。電位のくぼみは電子を反射し、電位の山はイオンを反射する役目を果たす。この電位の山の大きさは図6に示したようにイオンの入射エネルギーとともに増えているのがわかる。粒子シミュレーションでは、実験結果[19]をよく説明するばかりでなく、実験では制御することが困難なパラメータ領域でのシミュレーションを行うことによって形成機構の詳細を明

らかにすることができた。

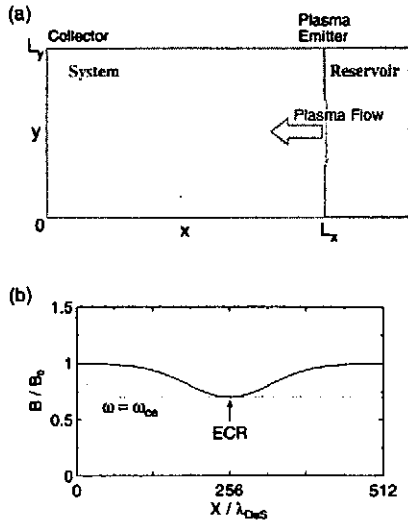


図 4. 井戸型磁場配位 ECR 加熱。

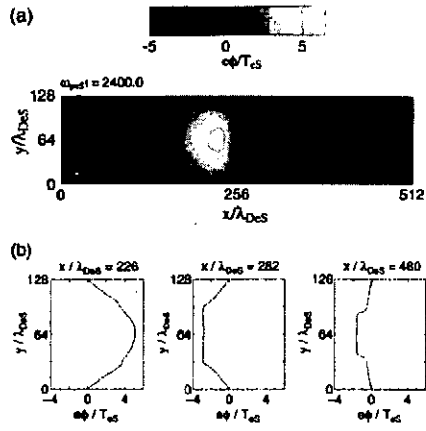


図 5. ECR 加熱による電位構造形成

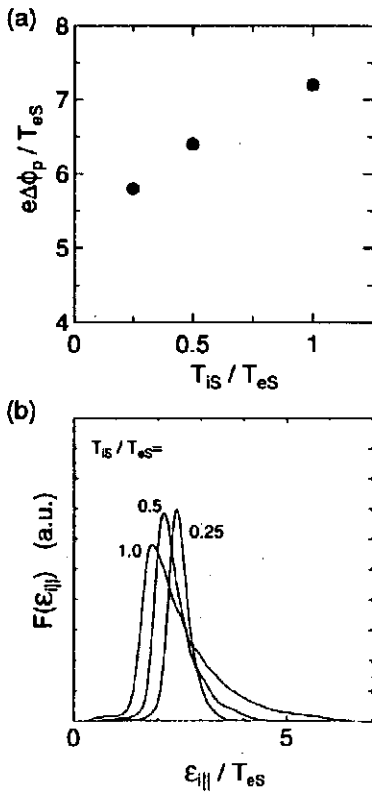


図 6. 流入イオンのエネルギーと形成される電位差。

4. おわりに

電位構造形成の粒子シミュレーション研究の典型例について述べた。ここで述べたシミュレーションは二次元配位のものであった。しかしながら二次元的な電位構造に対しても三次元的要因、すなわち二次元面を横切る方向に伝播する波動の不安定性などが関与する可能性があり、三次元シミュレーションが必要となっている。平成 15 年 1 月に更新された核融合科学研究所「大型シミュレーション研究用解析装置」は 1280GBytes の主記憶容量、1412GFLOPS の総合演算性能を有し、高精度大規模三次元粒子シミュレーションが可能となった。現在、HPF により分散並列した 3 次元粒子シミュレーションコードを開発し、それをを用いた粒子シミュレーション研究が進行中である。

参考文献

- [1] C.-G. Falthammar, *Rev. Geophys. Space Phys.* 15, 457 (1977).
- [2] D. E. Baldwin and B. G. Logan, *Phys. Rev. Lett.* 43, 1318 (1979).
- [3] L. P. Block, *Cosmical Electrodyn.* 3, 349 (1972).
- [4] J. S. DeGroot, et al., *Phys. Rev. Lett.* 40, 1283 (1977).
- [5] T. Sato and H. Okuda, *Phys. Rev. Lett.* 17, 740 (1980).
- [6] S. Ishiguro et al., *Phys. Rev. Lett.* 78, 4761 (1997).
- [7] Y. Serizawa and T. Sato, *Phys. Fluids* 29, 2753 (1986).
- [8] S. Ishiguro, Y. Kishi, and N. Sato, *Phys. Plasmas* 2, 3271 (1995).
- [9] T. Kaneko et al., *Phys. Plasmas* 9, 1271 (2002).
- [10] S. Ishiguro, T. Kamimura, and T. Sato, *Phys. Fluids* 28, 2100 (1985).
- [11] W. Oohara et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* 71, 373 (2002).
- [12] T. Sato et al., *Phys. Plasmas* 2, 3609 (1995).
- [13] J. M. Kindel and C. F. Kennel, *J. Geophys. Res.* 76, 3055 (1971).
- [14] F. S. Mozer et al., *Phys. Rev. Lett.* 38, 292 (1977).
- [15] H. Alfvén and C.-G. Falthammar, *Cosmical Electrodynamics* (Oxford University Press, London, 1963), p. 162.
- [16] Y. Serizawa and T. Sato, *Geophys. Res. Lett.* 11, 595 (1984).
- [17] H. Washimi and I. Katanuma, *Geophys. Res. Lett.* 13, 897 (1986).
- [18] N. Sato et al. *Phys. Rev. Lett.* 61, 1615 (1988).
- [19] T. Kaneko, et al. *Phys. Rev. Lett.* 80, 2602 (1998).

ジャイロ運動論的トロイダル粒子コードによる トカマク中の微視的不安定性のシミュレーション

井戸村 泰宏 (日本原子力研究所那珂研究所炉心プラズマ研究部)

1. はじめに

日本原子力研究所那珂研究所では、大規模シミュレーションにより核融合プラズマ中で展開している複雑現象を再現し、その定量的評価および物理的解明を図ることを目的として、平成8年度より数値トカマク(NEXT)研究を推進している[1]。本研究における主なターゲット問題としては、炉心プラズマからの粒子・熱の散逸を引き起こすプラズマ乱流輸送現象、閉じ込め磁場構造を乱す磁気流体不安定性、閉じ込め領域と装置壁の境界層プラズマ現象が挙げられ、これまでに様々な粒子コード、流体コード、粒子・流体ハイブリッドコード、モンテカルロコードが開発されてきた。本稿では、プラズマ乱流輸送現象[2]の解析を目指して開発を進めているジャイロ運動論的トロイダル粒子コードGT3D (Gyrokinetic Toroidal particle code for 3D turbulence simulation)[3]によるトカマクプラズマ中の微視的不安定性、およびそれにより生じるプラズマ乱流のシミュレーションについて紹介する。

2. ジャイロ運動論方程式

トカマクプラズマ中の乱流輸送を引き起こす代表的な微視的不安定性としてドリフト波不安定性が挙げられるが、その不安定化機構としては波・粒子共鳴や粒子軌道効果といった運動論的な効果が本質的である。核融合プラズマのような高温プラズマでは、ドリフト波の特徴的な時間スケールで無衝突近似が成り立つため、ブラゾフ方程式(無衝突ボルツマン方程式)によりプラズマの運動論的な記述が与えられる。しかしながら、ブラゾフ方程式はサイクロトロン波のような高周波の現象まで自動的に含んでいるため、ブラゾフ方程式をドリフト波や磁気流体不安定性といった低周波現象の解析およびシミュレーションに直接適用することが難しい。このため、これらの低周波現象の解析に適した運動論方程式としてジャイロ運動論[4]が開発された。ジャイロ運動論では、トカマクのような強磁場中の荷電粒子運動において磁力線のまわりの速い旋回運動とゆっくりした案内中心(旋回中心)運動の間で時間スケールを分離できることに着目し、永年摂動理論を適用して速い時間スケールの現象を方程式系から消去している。この結果、ジャイロ運動論方程式系にはサイクロトロン周波数より低周波の現象しか含まれず、ドリフト波のような低周波現象を解析することが解析的にも計算コスト的にも格段に容易になっている。以下に静電近似におけるジャイロ運動論方程式系を示す。

$$\frac{dF_s}{dt} = \frac{\partial F_s}{\partial t} + \frac{d\mathbf{R}}{dt} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} F_s + \frac{dv_{\parallel}}{dt} \frac{\partial F_s}{\partial v_{\parallel}} = 0 \quad (1a)$$

$$\frac{d\mathbf{R}}{dt} = v_{\parallel} \mathbf{b} + \frac{c}{q_s B_{\parallel}} \mathbf{b} \times (q_s \nabla_{\mathbf{R}} \langle \phi \rangle_{\alpha} + m_s v_{\parallel}^2 \mathbf{b} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} \mathbf{b} + \mu B \nabla_{\mathbf{R}} \ln B) \quad (1b)$$

$$\frac{dv_{\parallel}}{dt} = -\frac{\mathbf{B} \cdot \dot{\mathbf{R}}}{m_s B_{\parallel}} \cdot (q_s \nabla_{\mathbf{R}} \langle \phi \rangle_{\alpha} + m_s v_{\parallel}^2 \mathbf{b} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} \mathbf{b} + \mu B \nabla_{\mathbf{R}} \ln B) \quad (1c)$$

$$-\nabla^2\phi = 4\pi \sum_{s=e,i} q_s n_s(\mathbf{x}) \quad (1d)$$

$$n_s(\mathbf{x}) \equiv \int F_s \delta([\mathbf{R} + \boldsymbol{\rho}] - \mathbf{x}) \frac{|q_s| m_s B_{\parallel}^*}{c} d^6\mathbf{Z} - \frac{n_{s0} q_s}{T_s} \sum_{\mathbf{k}} \left[1 - I_0(k_{\perp}^2 \rho_s^2) e^{-k_{\perp}^2 \rho_s^2} \right] \phi_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (1e)$$

ここで、 $\mathbf{B}^* = \mathbf{B} + m_s c v_{\parallel} / q_s \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{b}$ 、 $\langle \phi \rangle_{\alpha}$ は旋回軌道に沿って平均したポテンシャル、 n_s 、 F_s は粒子種 s の粒子密度と案内中心分布、 \mathbf{R} は案内中心位置、 ρ は旋回半径、 v_{\parallel} は磁力線方向の速度、 μ は磁気モーメント、 I_0 は 0 次変形ベッセル関数、 c は光速、 q_s 、 m_s 、 T_s は粒子種 s の電荷、質量および温度を示す。式(1e)の第 2 項は案内中心密度(第 1 項)と粒子密度のずれを与えるイオン分極効果を表す。

3. ジャイロ運動論的粒子コード

本研究ではトカマクにおけるプラズマ乱流輸送現象の解析を目的として GT3D[3]の開発を進めてきた。GT3D ではジャイロ運動論方程式系(1a)-(1e)を初期値問題として非線形 δf 法により解き進める。非線形 δf 法は案内中心分布 F を平衡分布 F_0 と摂動分布 δf に分離し、位相空間にばら撒いた多数のマーカー粒子(モンテカルロサンプリング点)の摂動粒子軌道として得られる非線形の特性曲線に沿って δf を解き進める特性曲線法であり、 $\delta n/n_0 \sim 1\%$ と非常に振幅の小さいトカマクプラズマの微視的不安定性を精度良く再現するのに有効な手法である。このようにして求められた摂動分布に対して場の方程式(1d)-(1e)を課して摂動電場を求めた後に次のタイムステップの摂動粒子軌道を追跡する。通常の PIC(Particle-In-Cell)法では式(1e)のモーメントの計算は配位空間のグリッドに粒子を割り付ける事により行われるが、GT3D で採用している有限要素 PIC 法[5]では複雑な形状の取り扱いが容易な有限要素近似を場の量に適用しており、粒子は各有限要素に割り付けられる。GT3D のその他の主な特徴として以下が挙げられる。①軸対称トロイダル系であるトカマク配位における 3 つの運動の恒量、正準トロイダル角運動量 P_{ϕ} 、エネルギー ϵ 、磁気モーメント μ により定義される正準マックスウェル分布 $F_{\text{CM}}(P_{\phi}, \epsilon, \mu)$ を平衡分布とする新しい計算手法[3]により $n=0$ の軸対称モードの応答を正しく計算できる(4 節参照)。②最適化粒子配分法[6]を採用することにより非線形 δf 法におけるモンテカルロサンプリングの精度が格段に向上している。③場の表現方法として準バレーニング展開[7]を用いることにより高 m 、 n モードの非線形シミュレーションを低い計算コストで可能にしている。ここで、 m 、 n はそれぞれポロイダル方向、トロイダル方向のモード数を示す。④コードはスカラーおよびベクトル超並列計算機に対して最適化されており、原研 Origin3800 システムおよび地球シミュレータ上でそれぞれ $\sim 40\%$ および $\sim 25\%$ という高い実効処理性能で 512 プロセッサまで良いスケーラビリティを発揮する。

現在、世界中でジャイロ運動論的シミュレーションの開発競争が繰り広げられているが、完全トラス配位を扱えるグローバルコードとしては、プリンストンプラズマ物理研究所とカリフォルニア大学アーバイン校で共同開発された GTC コード[8]と並んで GT3D は代表的なコードの一つとなっており、2 つのコード間での共同ベンチマーク計画が進行中である。[9]

4. イオン温度勾配駆動乱流における $E \times B$ 帯状流のダイナミクス

ここではイオン系乱流熱輸送を引き起こす主な原因と考えられている ITG(イオン温度勾配駆動)モード[10]のシミュレーションを示す。図1はシミュレーションにおける静電ポテンシャルの時間発展の様子を示している。線形成長フェーズではトロイダル幾何効果によりトーラスの外側に局在したバルーニング構造が現れる[10,11]。非線形飽和フェーズでは波数空間におけるエネルギーの逆カスケード、あるいは、変調不安定性により $(m,n)=(0,0)$ の径電場が形成され、その径電場による $E \times B$ シア流によってバルーニング構造が壊れていく[8]。非線形発展後の準定常フェーズではこの $E \times B$ シア流は図1(c)における矢印に示されるように空間的に速度が反転した構造を持ち、 $E \times B$ 帯状流と呼ばれる。

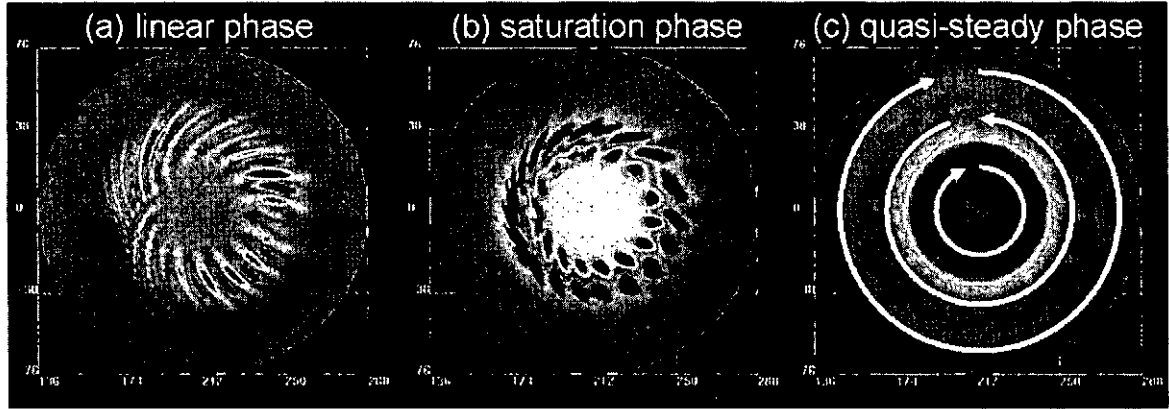


図1: サイクロンパラメータ[12]を用いた ITG 乱流シミュレーションにおける(a)線形成長フェーズ、(b)非線形飽和フェーズ、(c)準定常フェーズにおける静電ポテンシャルのポロイダル断面構造。

上記のように、ITG 乱流シミュレーションにおいては径電場および $E \times B$ シア流を正確に再現することが極めて重要である。これを可能にするために GT3D では正準マックスウェル分布 $F_{CM}(P_\phi, \epsilon, \mu)$ を平衡分布として用いる新しい手法を開発した。この手法の重要性を理解するために、厳密な平衡解である $F_{CM}(P_\phi, \epsilon, \mu)$ を用いて得られる線形ジャイロ運動論方程式を以下に示す。

$$\frac{d}{dt} \Big|_0 \delta f = q \frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial \phi} \frac{\partial F_{CM}}{\partial P_\phi} - q \frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial t} \frac{\partial F_{CM}}{\partial \epsilon} \quad (2)$$

ここで、第1項は圧力勾配の駆動項を示し、第2項はマックスウェル分布のプラズマでは安定化項となっている。式(2)において第1項の駆動項は $n=0$ の軸対称モードに対して0となることから、軸対称トロイダル系では軸対称モードは線形安定であるという結論が得られる。一方、式(2)の $F_{CM}(P_\phi, \epsilon, \mu)$ を従来のシミュレーションで用いられてきた近似的な平衡解である局所マックスウェル分布 $F_{LM}(\psi(P_\phi, \theta, \epsilon), P_\phi, \epsilon, \mu)$ で置き換えると次式を得る。

$$\frac{d}{dt} \Big|_0 \delta f = \left[q \frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial \phi} \frac{\partial \psi}{\partial P_\phi} - q \frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial t} \frac{\partial \psi}{\partial \epsilon} \right] \frac{\partial F_{LM}}{\partial \psi} - q \frac{\partial \langle \phi \rangle}{\partial t} \frac{\partial F_{LM}}{\partial \epsilon} \quad (3)$$

ここで、第2項は F_{LM} が厳密な平衡解でないために現れるにせの駆動項である。この項は、近似的な運動の恒量 ψ と厳密な運動の恒量 P_ϕ のずれによって生じ、 n が有限の微視的不安定性を解析するときには第1項の主要項に比べて無視できる高次項である。このため、微視的不安定性の線形理論は局所マクスウェル分布 $F_{LM}(\psi(P_\phi, \theta, \epsilon), P_\phi, \epsilon, \mu)$ に基づいてこれまで開発されてきた。しかしながら、最近の非線形シミュレーションによりその重要性が明らかになってきた径電場、あるいは、軸対称モードを解析する場合には主要項が消失するのでにせの駆動項の影響を無視できない。

にせの駆動項が ITG 乱流シミュレーションに与える影響を調べるために、 F_{LM} および F_{CM} に基づく2つのコードを用いて ITG モードの線形解析および $E \times B$ シア流の線形減衰テスト[13]を行い結果を比較した。図2は ITG モードの固有周波数スペクトルを示しているが、上で予測したように有限 n の線形安定性に関してはどちらのシミュレーションもほぼ同様の結果を示している。一方、図3に示す $E \times B$ シア流の線形減衰テストでは、 F_{CM} コードでは初期に与えた径電場は減衰し理論的に予測される線形応答レベル[13]でほぼ一定になるのに対し、 F_{LM} コードでは径電場の振幅は増大していく。

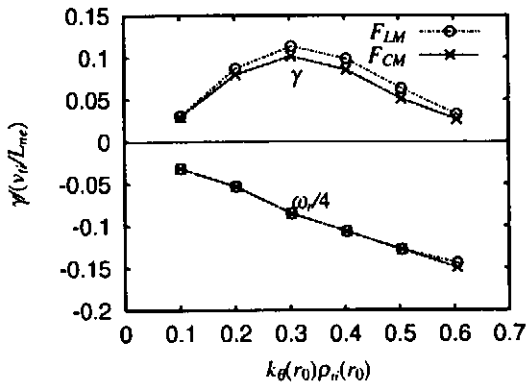


図2: サイクロンパラメータを用いた線形解析により得られた ITG モードの線形固有周波数スペクトル。

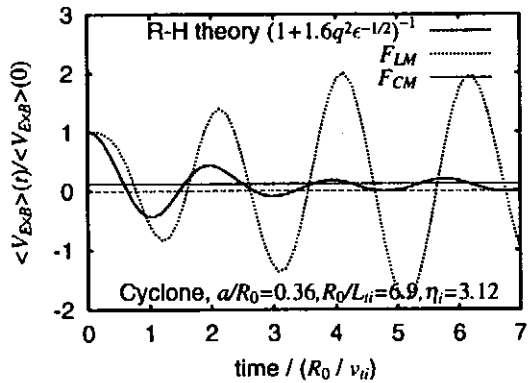


図3: サイクロンパラメータにおける $E \times B$ シア流の線形減衰テスト。 F_{LM} コードでは径電場が成長する。

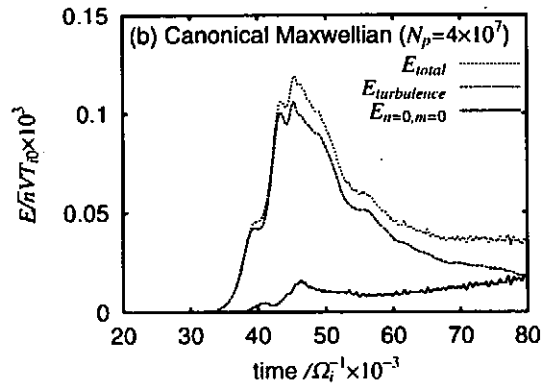
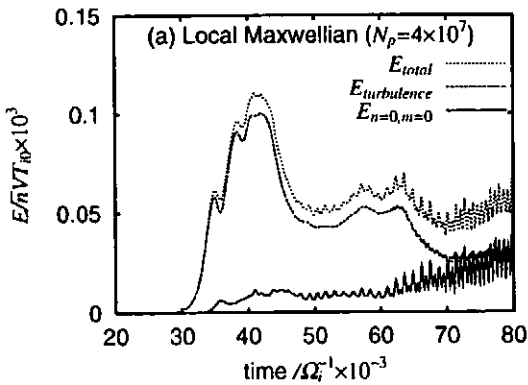


図4: サイクロンパラメータを用いた(a)局所マクスウェル分布 F_{LM} および(b)正準マクスウェル分布 F_{CM} に基づく ITG 乱流シミュレーションにおける揺らぎのエネルギーの時間発展。(a)では非線形飽和後に径電場($E_{n=0, m=0}$)が急速に成長するのに対し、(b)では径電場は準定常なレベルを保つ。

図4では2つのコードを用いて行ったITG乱流シミュレーションにおける揺らぎのエネルギーの時間発展を示している。どちらのシミュレーションもほぼ等しい初期飽和レベルを与えるが、非線形飽和後に生成される径電場の時間発展の傾向は大きく異なる。 F_{CM} コードでは径電場レベルは準定常状態にあるのに対し、 F_{LM} コードでは非線形飽和後に径電場が急速に成長していく。初期飽和フェーズにおいてはどちらのシミュレーションでもほぼ同様の揺動スペクトルを示しており、非線形結合による径電場駆動効果にそれほど違いはないと考えられるため、 F_{LM} コードにおける径電場の成長は局所マックスウェル分布におけるにせの線形駆動効果によるものと考えられる。

5. まとめ

本稿では、NEXT研究においてプラズマ乱流輸送現象の解析を目指して開発を進めているジャイロ運動論的トロイダル粒子コードGT3Dについて概説し、ITG乱流シミュレーションにおける最近のトピックの一つである径電場および $E \times B$ シア流の取り扱いに関してGT3Dにおいて開発した新しい手法の有効性を示した。4節に示したように、従来の局所マックスウェル分布 F_{LM} に基づくコードには軸対称モードに対するにせの線形駆動効果が存在するため径電場を正しく取り扱うことが難しい。このため、 $E \times B$ シア流が重要な飽和機構として考えられるITG乱流シミュレーションにおいては正準マックスウェル分布 F_{CM} に基づく新しい手法を用いることが重要である。

今回は電子断熱応答(ボルツマン分布)を仮定したITG乱流シミュレーションを示したが、このようなイオン系乱流シミュレーションにおいては電子系熱輸送、粒子輸送の原因と考えられているTEM(捕捉電子モード)乱流が考慮されていなかった。このため、TEM乱流を記述するのに必要な運動論的電子効果の拡張が進行中である。今後、この新しいコードを用いたITG-TEM乱流シミュレーションにより、実験データとの比較も視野に入れた包括的な乱流輸送の議論が可能になると期待される。

- [1] 日本原子力研究所那珂研究所 NEXT ホームページ <http://www-jt60.naka.jaeri.go.jp/HOME-J.html>
- [2] 岸本泰明、プラズマ・核融合学会誌 **76**, 1280 (2000)、矢木雅敏、井戸村泰宏、渡邊智彦、プラズマ・核融合学会誌 **77**, 525 (2001).
- [3] Y. Idomura et al., Nucl. Fusion **43**, 234 (2003).
- [4] T. S. Hahm, Phys. Fluids **31**, 2670 (1988)、洲鎌英雄、プラズマ・核融合学会誌 **79**, 107 (2003).
- [5] M. Fivaz et al., Comput. Phys. Commun. **111**, 27 (1998).
- [6] R. Hatzky et al., Phys. Plasmas **9**, 898(2002).
- [7] R. Gruber et al., Comput. Phys. Commun. **24**, 363 (1981).
- [8] Z. Lin et al., Science **281**, 1835 (1998).
- [9] G. Rewoldt et al., in Plasma Microturbulence Project Workshop, (2003), in 45th APS annual meeting (2003).
- [10] 洲鎌英雄、矢木雅敏、プラズマ・核融合学会誌 **76**, 1007 (2000).
- [11] Y. Idomura et al., New J. Phys. **4**, 101.1-101.13 (2002).
- [12] A. M. Dimits et al., Phys. Plasmas **7**, 969 (2000).
- [13] M. N. Rosenbluth et al., Phys. Rev. Lett. **80**, 724 (1999).

Collisionless reconnection in a three-dimensional open system

Ritoku Horiuchi^{1,2}

¹*National Institute for Fusion Science, Toki 509-5292, Japan.*

²*The Graduate University for Advanced Studies, Toki 509-5292, Japan*

abstract

Plasma instabilities and collisionless driven reconnection in an open system are investigated by means of electromagnetic particle simulations. Two-dimensional simulation in a long time scale reveals that there are two evolving regimes in the temporal behavior of current layer structure, dependently on the spatial size of plasma inflow through the upstream boundary, i.e., a steady regime and an intermittent regime. In a three-dimensional open system collisionless driven reconnection evolves dynamically under the influence of external driving flow and three different types of plasma instabilities excited in a thin current sheet.

1 Introduction

Self-organization phenomena have attracted many scientists in the wide academic fields to the study of the underlying universal rules [1]. Plasma is a typical example in which self-organization phenomena are often observed in spite of its complex natures [2]. Thus, many efforts have been made to understand the spontaneous formation of structures by the plasma itself and to improve plasma confinement in a fusion device by taking optimal advantage of this self-organization. There are four key factors to make the behavior of plasmas complex, i.e., 1) a hierarchy consisting of micro-scale physics through macro-scale physics, 2) non-linearity, 3) non-equilibrium, and 4) an open system. In this paper we investigate the role of these factors in the self-organization by examining the structure formation process and dynamical behavior of kinetic plasmas in an open system, where energy inflow and outflow exist through the boundary. Especially, we focus on the physics of magnetic reconnection because it is a fundamental mechanism to control the structure formation process of magnetized plasmas in the complex open system.

There are two key issues in considering magnetic reconnection. One is a local or microscopic

issue. The excitation of magnetic reconnection needs a microscopic process, which leads to the generation of electric resistivity, such as wave-particle interaction, binary collisions, and so on. The other issue is a global or macroscopic issue. Magnetic reconnection results in global plasma transport and global change of field topology. The problem is how to solve both microscopic physics and macroscopic physics consistently and simultaneously. It is impossible to solve numerically the dynamical evolution of the whole system consisting from the microscopic process through macroscopic process by using only equations based on the first principle (equations of motion for particles and the Maxwell equations) due to the power limitation of presently existing computers.

Instead, we propose two approaches to attack this problem. The first approach is to use an open model, in which the information of physics in the external (surrounding) system is introduced as a boundary condition, and only a local reconnection system is solved under a given boundary condition. Thus, there is an energy flow through the boundary in this approach. The second approach is to construct the cross-hierarchy model connecting the microscopic physics and macroscopic physics. Microscopic physics is solved

by kinetic model, while macroscopic physics is solved by MHD model. In this approach, both models are coupled by taking in the information from each other and their dynamical evolutions are solved simultaneously. In this paper we discuss the model and the simulation results in the first approach.

2 Open boundary model

A local reconnection system is solved by means of an explicit electromagnetic particle simulation [3]. As an initial condition we adopt a one-dimensional equilibrium with the Harris-type anti-parallel magnetic configuration as

$$\mathbf{B}(y) = (B_x(y), 0, 0), \quad (1)$$

$$B_x(y) = B_0 \tanh(y/L), \quad (2)$$

$$P(y) = B_0^2/8\pi \operatorname{sech}^2(y/L), \quad (3)$$

where B_0 is a constant and L is the scale height along the y -axis. There is a magnetically neutral sheet at $y = 0$ in the initial equilibrium. The initial particle distribution is assumed to be a shifted Maxwellian with spatially constant temperature and average particle velocity, which is equal to the diamagnetic drift velocity.

In order to study the dynamical evolution of the reconnection system mutually interacting with surroundings we have developed a new open boundary model, in which a free condition is used at the downstream boundary ($x = \pm x_b$) and an input condition is used at the upstream boundary ($y = \pm y_b$) [4,5,6]. The plasma inflows are symmetrically driven from two upstream boundaries by the external electric field imposed in the z direction. Figure 1 shows the spatial profiles of the driving electric field imposed at the upstream boundary at five different time periods [5]. The amplitude of driving field $E_{zd}(x, t)$ is initialized to zero at $t=0$, and increases with time while keeping a bell-shaped profile near the center and a flat profile in the periphery for an initial short time. After then a constant profile is kept with maximum flux input rate E_0 . The spatial size of initial bell-shaped profile x_d is named input window size, because the inflow velocity is locally enhanced within this

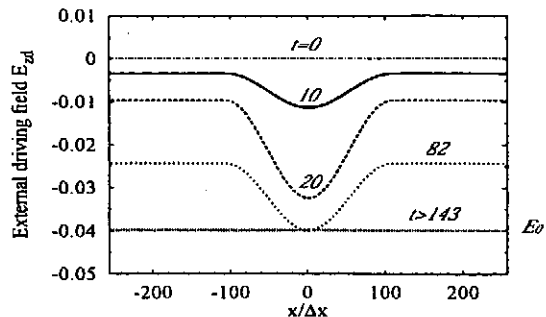


Figure 1: Spatial profiles of the driving electric field imposed at the upstream boundary at five different time periods in the case of $x_d = 0.84x_b$ and $E_0 = -0.04B_0$, where the time unit is ω_{ce}^{-1} .

region. The parameters E_0 and x_d control the openness of system. The distribution function of incoming particles at the input boundary is assumed to be a shifted Maxwellian with a constant temperature and the average velocity equal to the $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ drift velocity.

Field quantities E_x , E_y and $\partial E_z/\partial x$ are assumed to be continuous at the downstream boundary ($x = \pm x_b$). The condition $\partial E_z/\partial x = \text{finite}$ allows the change in the y -component of magnetic field which is the necessary condition for a magnetic island to go freely through the boundary. The boundary condition for particles is determined so that charge neutrality is maintained and the net number flux of particles at the boundary is equal to that associated with the fluid velocity in the vicinity of the downstream boundary. That is, there exist both outgoing particles and incoming particles through the downstream boundary in this model, and their difference gives the net number flux. We know the number flux of outgoing particles by observing them directly at the boundary. Under the assumptions that the net number flux of ions is the same as that of electrons, and the incoming particles satisfy the same distribution function as that just inside the boundary, we can calculate the number fluxes of incoming ions and electrons, and get their velocities and positions. Thus, the total number of particles is a function of time in this open model.



Figure 2: Spatiotemporal structure of off-plane electric field $-E_z(t, y)$ for the narrow input window

3 Dynamical behavior of collisionless reconnection

We examine the relationship between the dynamical behavior of kinetic plasmas and the openness of system by carrying out several simulation runs with different values of the input window size x_d and the flux input rate E_0 . As a result, it is found from the two-dimensional particle simulations that there are two evolving regimes in the temporal behavior of collisionless reconnection, which is strongly dependent on the value of x_d , but insensitive to the value of E_0 [4,5]. The steady collisionless reconnection is realized when the input window size is small, while an intermittent regime appears as the window size increases. In the followings we discuss the simulation results in two typical cases, i.e., the narrow input window case ($E_0 = -0.04B_0$, $x_d = 18\rho_i$, $m_i/m_e = 25$) and the wide input window case ($E_0 = -0.04B_0$, $x_d = 36\rho_i$, $m_i/m_e = 25$).

First, let us consider the case of the narrow input window ($x_d = 18\rho_i$) [4,5,6]. Figure 2 shows the perspective view of spatiotemporal structure of the off-plane electric field E_z in the t - y plane where the reconnection point is located at the mid y -axis. After experiencing the initial transient phase, the system relaxes into a steady state in which the off-plane electric field becomes uniform in space and constant in time, and thus must be equal to the external driving field E_0 at the upstream boundary. In other words, the reconnection rate is balanced with the flux input rate at the upstream boundary in the steady state.

When the input window size x_d increases twofold ($x_d = 36\rho_i$), the system reveals a quite differ-

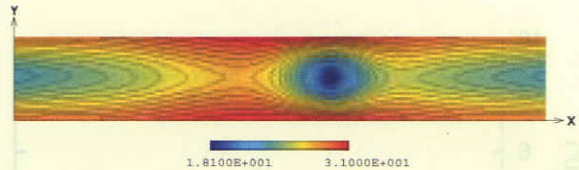


Figure 3: Contour plots of vector potential $A_z(x, y)$ at $\omega_{ce}t = 755$ for the wide input window.

ent behavior from the narrow input window case ($x_d = 18\rho_i$) [4,5]. An elongated current sheet along the x -axis is created as a result of the plasma compression over a relatively long range in the wide window case. The length of the current sheet is roughly estimated as $L_{cs} \approx 10\rho_i$, which means that the current sheet becomes unstable against a collisionless tearing instability. Magnetic islands are frequently created in the central region of the current sheet through the tearing instability, as is shown in Fig. 3. Consequently, the system never reaches steady state with a single reconnection point and a constant reconnection rate in the wide input window case. Furthermore, it is also found that the growth of magnetic islands is caused by the increase of electron current density through the electron trapping inside magnetic islands.

4 Structure formation of kinetic plasmas

The dissipation region has a two-scale structure underlying the quite different characteristic scale lengths of electron and ion dynamics [6,7]. The ion motion decouples from the magnetic field due to the inertia effect within the region of $|y| < c/\omega_{pi}$, while the electrons remain to be frozen in the magnetic field until they enter the region of c/ω_{pe} which is slightly larger than an electron thermal scale [6]. Figure 4 shows the spatial profiles of current density for $m_i/m_e = 200$ (solid) and $m_i/m_e = 25$ (dashed) in the steady state, where $E_0 = -0.04B_0$, and $x_d = 18\rho_i$. In the case of $m_i/m_e = 25$, the current density profile has the same scale as the ion thermal scale, which is given by the average orbit amplitude of me-

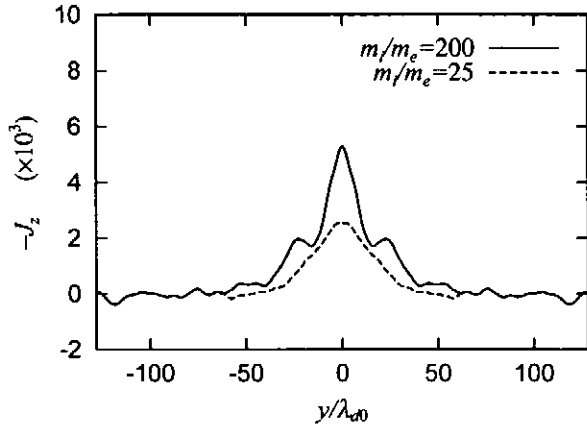


Figure 4: Spatial profile of current density in the steady state where the solid and dashed lines represent the profiles along the y -axis for $m_i/m_e = 200$ and $m_i/m_e = 25$, respectively.

andering ions in the vicinity of neutral sheet [7]. When the mass ratio increases to 200, a two-scale structure of the current density profile becomes visible, i.e., a large spatial structure (a low shoulder) in the ion thermal scale and a small spatial structure (a central peak) near the center in the electron inertia scale. Figure 5 displays the time evolution of the reconnection electric field in the case of $m_i/m_e = 200$, where $E_0 = -0.04B_0$ and $x_d = 18\rho_i$. It is noteworthy in this figure that the steady state is realized regardless of mass ratio when the window size is small ($x_d = 18\rho_i$).

In three-dimensional case the spatial structure of current sheet is dynamically modified by plasma instabilities excited through wave-particle interaction. In the absence of an external driving source the lower hybrid drift instability (LHDI) [8,9] is observed to grow in the periphery of current layer in an early period, while a drift-kink instability (DKI) [10,11] is triggered at the neutral sheet as a second instability after the current sheet is modified through nonlinear evolution of the LHDI and its width becomes less than ion Larmor radius [4,12]. In this way, the LHDI is not a direct cause of an anomalous resistivity at the neutral sheet, but collisionless reconnection is triggered by the DKI in the non-driven case.

How does an external driving flow affect col-

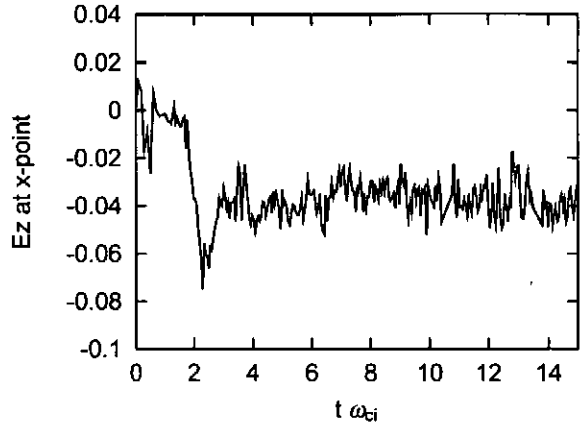


Figure 5: Temporal evolution of the reconnection electric field at the X-point for the narrow input window, where $m_i/m_e = 200$.

lisionless reconnection in three dimensions? Figure 6 illustrates the spatiotemporal structure of the $n = 8$ mode of the electric field E_z in the case of the driving field $E_0 = -0.02B_0$, where n is the Fourier mode number in the z -direction, the neutral sheet is located at the mid-point of y -axis at the initial stage, $x_d/2x_b = 0.42$, and $m_i/m_e = 100$. The LHDI is excited in the periphery at the relatively early period. This mode has an electromagnetic feature as well as an electrostatic feature [13]. The driving electric field imposed at the upstream boundary carries the plasma towards the current sheet and compresses it. The anomalous resistivity generated through the interaction between particles and the LHD wave leads to the penetration of the driving electric field into the current sheet. Figure 6 indicates that the LHD wave itself propagates towards the center of the current sheet together with the driving field. When the electric field reaches the neutral sheet, collisionless reconnection is triggered and the generated fast reconnection flow carries the magnetic flux towards the downstream region.

The excitation of magnetic reconnection changes the spatial structure of the current sheet. Figure 7 illustrates the perspective view of magnetic field strength ($B_x^2 + B_y^2$) in case of $E_0 = -0.04B_0$ and $m_i/m_e = 64$, when magnetic reconnection fully develops ($\omega_{ce}t = 244$). The current sheet is

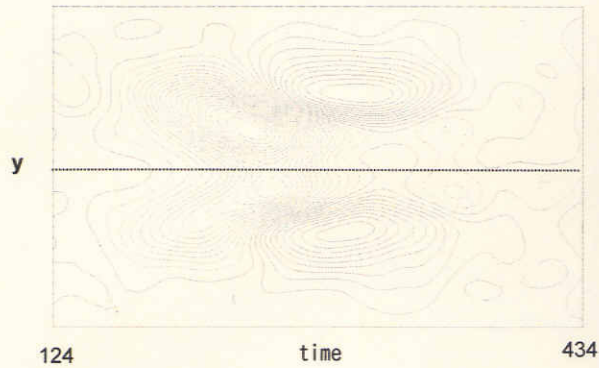


Figure 6: Spatiotemporal structure of the $n = 8$ mode of the electric field E_z in the narrow window case of $x_d/2x_b = 0.42$.

split into five pieces, i.e., a small island at the center, two large islands in the downstream, and two pieces near the boundary. The reconnected magnetic flux accumulates inside the magnetic islands and increases the current density there. When the current density exceeds some critical value, a kink-like instability is triggered resulting in the destruction of the island structures. In the case of Fig. 7 the kink-like instability occurs at the small middle island first and then at two islands in the downstream region. It is found that the DKI excited in the middle island can be a cause of anomalous resistivity.

5 Summary

Structure formation and dynamical behavior of kinetic plasmas controlled by magnetic reconnection is investigated by using newly developed electromagnetic particle simulation codes [4,5,6]. Two-dimensional simulation in a long time scale reveals that there are two evolving regimes in the temporal behavior of current sheet structure, dependently on the spatial size of plasma inflow through the upstream boundary, i.e., a steady regime and an intermittent regime. The steady collisionless reconnection is realized in the case of small input window size, in which the reconnection rate is balanced with the flux input rate at the upstream boundary. As the window size increases, the current sheet becomes longer, which

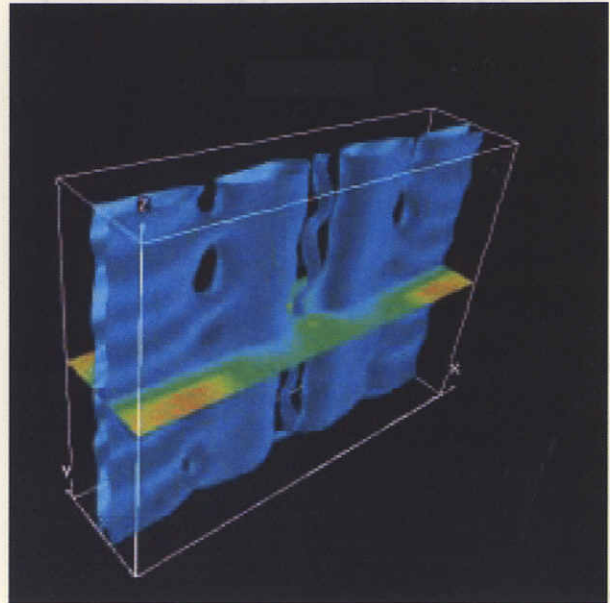


Figure 7: Perspective view of magnetic field strength ($B_x^2 + B_y^2$) in three dimensions at $\omega_{cet} = 244$, where $E_0 = -0.04B_0$, $m_i/m_e = 64$, and the weak field region is plotted by an isosurface in blue.

is favorable to the excitation of a collisionless electron tearing instability. In this case the system evolves toward the intermittent regime, in which magnetic islands are frequently generated in the current sheet. The current density profile has a two-scale structure underlying the quite different characteristic scale lengths of electron and ion dynamics, i.e., a large spatial structure in the ion thermal scale and a small spatial structure near the center in the electron inertia scale.

In the three-dimensional case the spatial structure of current sheet is dynamically modified by plasma instabilities excited through wave-particle interaction. In the presence of an external driving source the driving electric field imposed at the boundary penetrates into the current sheet in accordance with the propagation of the lower hybrid drift wave excited in the periphery. When the electric field reaches the neutral sheet, collisionless reconnection is triggered. Small islands are generated in the current sheet as a result of collisionless reconnection. The accumulation of current density inside the islands leads to the ex-

citation of the kink-like instability leading to the destruction of the island structure.

References

- [1] A. Hasegawa, *Adv. Phys.*, **34**,1 (1985).
- [2] J. B. Taylor, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 1139(1974).
- [3] C. K. Birdsall and A. B. Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation* (McGraw-Hill, New York, 1985).
- [4] R. Horiuchi, W. Pei and T. Sato, *Earth Planets Space*, **53**, 439-445 (2001).
- [5] W. Pei, R. Horiuchi and T. Sato, *Phys. Plasmas*, **8**, 3251-3257 (2001).
- [6] W. Pei, R. Horiuchi and T. Sato, *Phys. Rev.Lett.*, **87**, 235003-1-235003-4 (2001).
- [7] R. Horiuchi and T. Sato, *Phys. Plasmas*, **1**, 3587-3597, 1994.
- [8] N. A. Krall and P. C. Liewer, *Phys. Rev.*, **4**, 2094-2103, 1971.
- [9] R. C. Davidson and N. T. Gladd, *Phys. Fluids* **18**, 1327(1975).
- [10] M. Ozaki, T. Sato, R. Horiuchi, and the Complex Simulation Group, *Phys. Plasmas* **3**, 2265-2274, 1996.
- [11] Z. Zhu and R. M. Winglee, *J. Geophys. Res.* **101**, 4885(1996).
- [12] R. Horiuchi and T. Sato, *Phys. Plasmas*, **6**, 4565-4574, 1999.
- [13] W. Daughton, *Phys. Plasmas*, **10**, 3103-3119, 2003.

Recent Issues of NIFS-PROC Series

- NIFS-PROC-38 (Eds.) Y. Tomita, Y. Nakamura and T. Hayashi,
Proceedings of the Second Asian Pacific Plasma Theory Conference APPTC '97, January 26-28, 1998, Kyoto: Aug. 1998
- NIFS-PROC-39 (Ed.) K. Hirano,
Production, Diagnostics and Application of High Energy Density Plasmas: Dec. 1998
- NIFS-PROC-40 研究代表者 加古 孝 (電気通信大学)
所内世話人 渡辺 二太
平成 10 年度核融合科学研究所共同研究 研究会「プラズマ閉じ込めに関連する数値計算手法の研究」
Ed. by T. Kako and T. Watanabe
Proceeding of 1998-Workshop on MHD Computations "Study on Numerical Methods Related to Plasma Confinement Apr. 1999
- NIFS-PROC-41 (Eds.) S. Goto and S. Yoshimura,
Proceedings of The US-Japan Workshop and The Satellite Meeting of ITC-9 on Physics of High Beta Plasma Confinement in Innovative Fusion System, Dec. 14-15, 1998, NIFS, Toki: Apr. 1999
- NIFS-PROC-42 (Eds.) H. Akiyama and S. Katsuki,
Physics and Applications of High Temperature and Dense Plasmas Produced by Pulsed Power: Aug. 1999
- NIFS-PROC-43 (Ed.) M. Tanaka,
Structure Formation and Function of Gaseous, Biological and Strongly Coupled Plasmas: Sep. 1999
- NIFS-PROC-44 (Ed.) T. Kato and I. Murakami,
Proceedings of the International Seminar on Atomic Processes in Plasmas, July 29-30, 1999, Toki, Japan: Jan. 2000
- NIFS-PROC-45 (Eds.) K. Yatsui and W. Jiang,
Physics and Applications of Extreme Energy-Density State, Nov. 25-26, 1999, NIFS: Mar. 2000
- NIFS-PROC-46 研究代表者 加古 孝 (電気通信大学)
所内世話人 渡辺 二太
平成 11 年度核融合科学研究所共同研究 研究会「プラズマ閉じ込めに関連する数値計算手法の研究」
Ed. by T. Kako and T. Watanabe
Proceeding of 1999-Workshop on MHD Computations "Study on Numerical Methods Related to Plasma Confinement June. 2000
- NIFS-PROC-47 岡本正雄、村上定義、中島徳嘉、汪衛生
プラズマ物理におけるモンテカルロシミュレーション
Watanabe M., Okamoto, S., Murakami, N., Nakajima, W. X., Wang,
Monte Carlo Simulations for Plasma Physics: July 2000
- NIFS-PROC-48 K. Miyamoto,
Fundamentals of Plasma Physics and Controlled Fusion: Oct. 2000
- NIFS-PROC-49 (Ed.) K. Kawahata,
Proceeding of the 5th International Workshop on Reflectometry, 5-7 march, 2001: May 2001
- NIFS-PROC-50 (Ed.) S. Ishii Workshop on Extremely High Energy Density Plasmas and Their Diagnostics, Mar. 8-9, 2001, National Institute for Fusion Science, Toki, Japan: Sep. 2001
- NIFS-PROC-51 (Ed.) K. Horioka,
Physics and Applications of High Energy Density Plasmas -Extreme state driven by pulsed electromagnetic energy, Dec.20-21, 2001, National Institute for Fusion Science: June 2002
- NIFS-PROC-52 第 6 回「シミュレーション・サイエンス・シンポジウム」及び核融合科学研究所共同研究「大型シミュレーション研究」
合同研究会 集録
Proceedings of Joint Meeting of the 6th Simulation Science Symposium and the NIFS Collaboration Research "Large Scale Computer Simulation":
Mar. 2003
- NIFS-PROC-53 研究代表者 渡邊二太 LHD型磁場配位を用いたICRF支援 水素・硼素核融合の理論的研究ー平成14年度核融合科学研究所共同研究ー
(Ed.) T. Watanabe
Theoretical Study for ICRF Sustained LHD Type-p-¹¹B Reactor: Apr. 2003
- NIFS-PROC-54 (Ed.) K. Masugata
Physics and Applications of Micro and Fast Z-Pinch Plasmas (Dec. 5-6, 2002, NIFS): July 2003
- NIFS-PROC-55 シミュレーション科学教育講座 2003 テキスト
Text of Simulation Science Open Lecture 2003: Apr. 2004
- NIFS-PROC-56 第 6 回「シミュレーション・サイエンス・シンポジウム」及び 核融合科学研究所共同研究「大型シミュレーション研究」合同研究会
集録
Proceedings of Joint Meeting of the 6th Simulation Science Symposium and the NIFS Collaboration Research "Large Scale Computer Simulation": Apr. 2004
- NIFS-PROC-57 (Ed.) T. Fujimoto, P. Beiersdorfer
Proceedings of The Japan-US Workshop on Plasma Polarization Spectroscopy and The Fourth International Symposium on Plasma Polarization Spectroscopy: July 2004
- NIFS-PROC-58 第 7 回「シミュレーション・サイエンス・シンポジウム」集録
Proceedings of the 7th Simulation Science Symposium: July 2004