

[特集・小特集]

分子動力学専用計算機を用いた 負温度点渦系の大規模シミュレーション

*静岡大学 教育学部 八柳 祐一†

Massive Numerical Simulation of Point-Vortex System at Negative Temperature Using Special-Purpose Supercomputer

Yuichi YATSUYANAGI, Faculty of Education, Shizuoka University

1 はじめに

本研究の原点は、京都大学際本グループで行われている非中性プラズマ実験である^{1,2)}。軸方向に一様な磁場

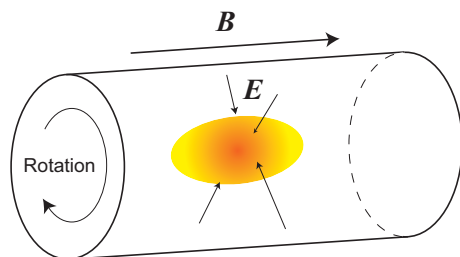


図1 軸方向に磁場 B がかけられた円筒容器内に閉じ込められた電子群は、壁との間の自己電場 E と軸方向磁場 B により、 $E \times B$ 方向にドリフト運動をする。

をかけ、円筒両端の(閉込め用)静電ポテンシャルを負とした円筒容器に電子を閉じ込めた系では、磁場に沿った方向の電子運動のタイムスケールは、磁場を横切る方向のタイムスケールよりはるかに短く、電子分布は円筒容器内で「金太郎飴」のようになる。さらに、磁場が十分強く、サイクロトロン半径も無視できる場合には、電子の運動は案内中心(サイクロトロン運動の回転中心)の運動で置き換えることができ、磁場に垂直な断面についての案内中心の2次元運動は、2次元非圧縮性流体の運動を記述するオイラー方程式で表現されることが示される(付録1参照)。

非中性プラズマを用いて渦実験をすることの意義は、電場と磁場により高度に制御された流体実験を行える

ことである。この実験から、背景分布により駆動される安定構造形成や³⁾、渦結晶配位の生成・緩和機構⁴⁾、いわゆる乱流的な統計法則⁵⁾などが報告されており、流体実験の道具としての有用性を示している。

2次元乱流に特徴的な振る舞いは、非中性プラズマでも観測され、磁場に垂直な2次元断面がドーナツ状の分布(図1で3次的に示すと“ちくわ”状)はディオコトロン(=ケルビン・ヘルムホルツ)不安定性によりいくつかの島状分布(クランプ)を形成し、最終的に中心にピークを持つ一山分布となる。これは、2次元乱流に特徴的なエネルギーの小大スケールへの輸送現象であり、この理解のために、長らく議論が続けられてきている^{6,7)}。1949年、Onsagerは、この問題の解決の糸口として、「負温度状態」を導入した。これは、点渦群の統計力学の枠組みで、大規模渦構造形成を特徴づけようとするもので、温度が負ならば Boltzmann 因子 $\exp(-\beta E)$ に従い、エネルギーがより高い状態が実現されやすくなる。すなわち、より大きなエネルギーを持つ大規模構造が実現されやすい。

この負温度状態について興味を持ち調べてみたところ、1970~80年代には活発な議論があり、理論的な研究がなされていたが、数値的な検証は当時のコンピュータの計算能力に大きく制限を受けた結果しか残されていないことが分かった。そもそも、Onsagerが提唱した絶対温度が負になる状態は、統計力学的に「形式的に」導入されたものであり、対応する熱力学的概念があるわけではない。しかし、2次元乱流では、多くのケースで小大スケールのエネルギー輸送と見なせる現象が観察されており、何らかの形で「負温度性」が現実の力学系に現れているはずである。そこで、筆者は、Onsager

*〒422-8529 静岡市駿河区大谷 836

†E-mail: eyyatsu@ipc.shizuoka.ac.jp

が提唱した負温度性に関して、非中性プラズマ実験と比肩できるレベルを最終的に目指した点渦系の大規模シミュレーション研究を行おうと思いついた⁸⁾。

点渦系のシミュレーションでは、点渦分布から流れ場を決定するピオサバル積分に、点渦数の2乗に比例した時間がかかる。ここ2~3年、PCの計算能力は劇的に向上したが、この計算能力を以てしても、なお時間がかかるシミュレーションとなるため、通常は、メッシュを切った空間に点渦を配置し、ピオサバル積分は点渦単位ではなくメッシュ単位で行う Vortex-In-Cell(VIC) 近似や、その他の高速アルゴリズムを使うのが一般的である。しかし、

- 円形境界を有する系の VIC 近似は、境界付近の点渦の扱いに注意が必要。
- コーディング時に頭を使わなくてはならない面倒なアルゴリズムは、後々のメンテナンスも面倒。
- せっかくならば、計算機の全リソースを1つのジョブに割り当てて最高速を味わってみたい。

という理由で、自分の手元に置いておけるスーパーコンピュータである分子動力学専用計算機を使って渦シミュレーションを行うことにした。

本解説では、Onsager 理論について筆者が行ってきたシミュレーションの、技術的な側面と結果について解説を行いたい。特に、学術的な色合いが薄いため通常の論文には掲載しにくい専用計算機を使用するための技法について、情報を多数載せた。以下、§2 で対象とする点渦系、及び Onsager が提唱した負温度の概念の導入を行い、§3 で専用計算機 MDGRAPE-3 の紹介、そして、§4 で負温度点渦系のシミュレーションから得られた知見に関する説明を行う。

2 負温度点渦系

2.1 点渦系

対象とする系は、 N 個の正の点渦と、 N 個の負の点渦が、半径 R の円形境界内に閉じ込められている2次元点渦系である。 i 番目の点渦 ($i = 1, 2, \dots, 2N$) の位置ベクトルを $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$ 、循環を Γ_i で表す。循環として取り得る値は Γ_0 および $-\Gamma_0$ (Γ_0 : 定数) の2種類に限定される。系の保存量は、エネルギー H と慣性モーメ

ント I である。

$$H = -\frac{1}{4\pi} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \Gamma_i \Gamma_j \ln |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| + \frac{1}{4\pi} \sum_i^N \sum_j^N \Gamma_i \Gamma_j \ln |\mathbf{r}_i - \bar{\mathbf{r}}_j| - \frac{1}{4\pi} \sum_i^N \sum_j^N \Gamma_i \Gamma_j \ln \frac{R}{|\mathbf{r}_j|}, \quad (1)$$

$$I = \sum_i^N \Gamma_i |\mathbf{r}_i|^2 \quad (2)$$

(1) 式の右辺第3項は、境界での流れ関数の値をゼロにするために導入した。

各点渦の運動方程式は、(1) 式を用いると、

$$\Gamma_i \frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial y_i}, \quad (3)$$

$$\Gamma_i \frac{dy_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} \quad (4)$$

または、具体的に書き下し、

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = -\frac{1}{2\pi} \sum_{j \neq i}^{2N} \Gamma_j \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \times \hat{z}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2} + \frac{1}{2\pi} \sum_j^{2N} \Gamma_j \frac{(\mathbf{r}_i - \bar{\mathbf{r}}_j) \times \hat{z}}{|\mathbf{r}_i - \bar{\mathbf{r}}_j|^2} \quad (5)$$

と表される。ここで、 \hat{z} は、 z 方向の単位ベクトルである。(5) 式右辺は、離散点渦系に対する2次元ピオサバル積分である。境界からの寄与は、(5) 式右辺第2項に含まれる $\bar{\mathbf{r}}_i = R^2 \mathbf{r}_i / |\mathbf{r}_i|^2$ に置かれた鏡像渦により表現される。

2.2 負温度の導入

系の逆温度 β は、統計力学的に

$$\beta = \frac{dS}{dE} = \frac{d \ln W(E)}{dE} \quad (6)$$

と定義される。ここで、 $W(E)$ は状態密度、 E はエネルギーである。通常、状態密度はエネルギーの上昇とともに単調増加するため β が負となることはない(図2)。ここで、全相空間体積が有限という条件を与える。すると、 $E \rightarrow \infty$ の極限で $W \rightarrow 0$ とならなければならない。すなわち、状態密度は、ある E_0 でピークとなり、 $E > E_0$ で $d \ln W / dE < 0$ となる(図3)。ただし、状態密度が最大となるエネルギーは一つと仮定した。このような系では、 $E > E_0$ において、系の温度は負となる。エネルギーが上がるほど状態数が少なくなるような系、例えば、エネルギーが最大となる唯一無二の状態が存在するような系には、負温度状態が現れる。

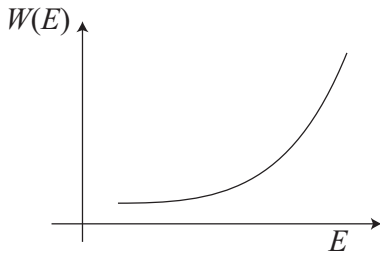


図2 状態密度とエネルギーの関係

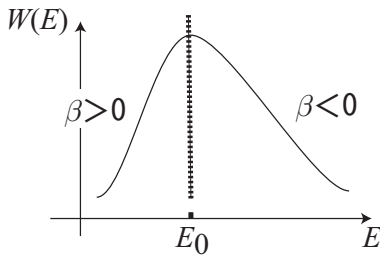


図3 負温度状態がある場合の状態密度とエネルギーの関係

上記で説明した負温度状態が有限領域に閉じ込められた点渦系に現れうることを初めて指摘したのは Onsager である^{9,10}。点渦系の運動方程式を、点渦系のハミルトニアンを用いて表すと、(3)、(4) 式のような形式で表現できる。Onsager は、いわゆるハミルトン方程式との類推から、点渦系の相空間は配位空間と一致すると考えた。ここで、点渦系が閉じ込められている領域が面積 A の領域に限定されたとすると、

$$d\Omega = dx_1 dy_1 \cdots dx_{2N} dy_{2N} \quad (7)$$

より、相空間体積は、

$$\int d\Omega = \left(\int dx dy \right)^{2N} = A^{2N} \quad (8)$$

となり、確かに有限となる。よって、ある有限領域に閉じ込められた点渦系は、相空間体積が有限、つまり全状態数は有限となり、前段落で述べた負温度が現れうる事がわかる。

Onsager が提唱した負温度点渦系については、理論的にも、数値的にも、精力的に調べられてきた。矩形の平衡分布に関する議論は、Joyce らの結果が有名である。矩形領域について数値的に平衡分布を求め、同符号点渦が凝集する様子を示している。また、理論的な考察から、平衡分布は、sinh-Poisson 方程式

$$\nabla^2 \psi = \lambda \sinh(\beta \psi) \quad (9)$$

に従うことを予言した^{11,12}。ここで、 λ は、最も確かな平衡分布を求める際のラグランジュの未定乗数から決まる値、 ψ は流れ関数である。ほかにも、円形境界系の

軸対称平衡解¹³、非軸対称平衡解¹⁴、点渦系の状態密度の直接サンプリング^{15,16}、乱流的な視点での統計性質^{17,18}などの結果がある。

しかし、数値的な結果を見てみると、計算パワーの限界から、あまり大規模な計算は行われてこなかったことが読み取れる。そこで、我々は、分子動力学専用計算機を用いて、点渦系の大規模シミュレーションを始めるに至った。

3 分子動力学専用計算機を用いた点渦シミュレーション

3.1 専用計算機

専用計算機とは、ある特定の計算のみが行える計算機を表す。ある特定の計算しか行えないので、通常は PC などの、一般的な計算が行える汎用計算機に接続して使う。

これまでに開発された専用計算機の中で、特に有名なものは、東大(当時。現国立天文台)の牧野らが中心となって開発をした重力多体専用計算機 GRAPE シリーズであろう¹⁹。GRAPE シリーズでは、星の座標と質量を渡すことにより各星にかかる重力を高速に計算する。この GRAPE シリーズから分子動力学シミュレーション用の専用計算機として派生したものが MDGRAPE シリーズで、派生後第 2 世代の MDGRAPE-2 を理研の戒崎グループ²⁰、第 3 世代の MDGRAPE-3 を同じく理研の泰地グループが開発をした。MDGRAPE シリーズでは、重力と同種の計算であるクーロン力の他、ファンデルワールス力の計算なども行える。現行機種である MDGRAPE-3 は、理研ベンチャーの高速計算機研究所から購入することができる²¹。筆者が使用している MDGRAPE-3 は、PCI-X スロットに挿入するカードタイプのものであり、ほかにはラックにマウントするタイプも販売されている。



図4 MDGRAPE-3 ボード(理研提供)。

一般的に，MDGRAPE シリーズで計算可能な式は，

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}_i) = \sum_{j \neq i} q_j g(|\mathbf{r}_{ij}|^2) \mathbf{r}_{ij}, \quad (10)$$

$$\psi(\mathbf{r}_i) = \sum_{j \neq i} q_j h(|\mathbf{r}_{ij}|^2), \quad (11)$$

$$\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j \quad (12)$$

である。クーロン多体系であれば， q_j は位置 \mathbf{r}_j にある電荷となり，

$$g(|\mathbf{r}_{ij}|^2) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{(|\mathbf{r}_{ij}|^2)^{3/2}} \quad (13)$$

とするとクーロン力，

$$h(|\mathbf{r}_{ij}|^2) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{(|\mathbf{r}_{ij}|^2)^{1/2}} \quad (14)$$

とすると静電ポテンシャルを計算できる。MDGRAPE シリーズの GRAPE シリーズに対する最大の利点は，上記式中の関数 $g(|\mathbf{r}_{ij}|^2)$ ，及び $h(|\mathbf{r}_{ij}|^2)$ を，ユーザが自由に定義できる点である。上記の二つの関数を

$$g(|\mathbf{r}_{ij}|^2) = \frac{1}{2\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\mathbf{r}_{ij}|^2}, \quad (15)$$

$$h(|\mathbf{r}_{ij}|^2) = -\frac{1}{2\pi\epsilon_0} \log(|\mathbf{r}_{ij}|^2)^{1/2} \quad (16)$$

とすると，2次元問題の計算が可能となる。

専用計算機という，“ポアソンソルバー”というイメージが強いが，実はビオサバール積分も計算できる。3次元の場合は，渦が細い管上に局在した渦フィラメント構造を仮定する。フィラメント内の循環は Γ_0 で一定とすると，この渦フィラメントが誘起する速度場は，フィラメントに沿った線積分で表現できる。

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = -\frac{\Gamma_0}{4\pi} \int \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \times d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \quad (17)$$

これをフィラメントの軸方向に沿って離散化すると，

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{r}) &= -\frac{\Gamma_0}{4\pi} \sum_i \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \times d\mathbf{r}_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^3} \\ &= -\frac{\Gamma_0}{4\pi} \sum_i \begin{pmatrix} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)_y d\mathbf{r}_{iz} - (\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)_z d\mathbf{r}_{iy}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^3} \\ \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)_z d\mathbf{r}_{ix} - (\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)_x d\mathbf{r}_{iz}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^3} \\ \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)_x d\mathbf{r}_{iy} - (\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)_y d\mathbf{r}_{ix}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^3} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (18)$$

となる。2行目は，成分で書き下した。2行目の成分をよく見てみると，

$$\mathbf{u}_1(\mathbf{r}) = -\frac{\Gamma_0}{4\pi} \sum_i d\mathbf{r}_{ix} \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^3}, \quad (19)$$

$$\mathbf{u}_2(\mathbf{r}) = -\frac{\Gamma_0}{4\pi} \sum_i d\mathbf{r}_{iy} \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^3}, \quad (20)$$

$$\mathbf{u}_3(\mathbf{r}) = -\frac{\Gamma_0}{4\pi} \sum_i d\mathbf{r}_{iz} \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_i}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^3} \quad (21)$$

という三つの積分を行うと，(18)式に必要な成分は全て揃うことが分かる。すなわち， $d\mathbf{r}_{ix}$ ， $d\mathbf{r}_{iy}$ ， $d\mathbf{r}_{iz}$ がそれぞれ電荷であるかのように見なした (19)~(21) 式を計算すれば，専用計算機により3次元ビオサバール積分を計算できる。なお，言わずもがなであるが，1回速度場を求める毎に3回積分を行わなくてはならないため，計算速度は多少犠牲になる。

一方，2次元の点渦モデルの場合の離散化されたビオサバール積分は，

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = -\frac{1}{2\pi} \sum_{j \neq i}^N \Gamma_j \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \times \hat{z}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2} \quad (22)$$

となる。この場合は，

$$\mathbf{u}_1 = -\frac{1}{2\pi} \sum_{j \neq i}^N \Gamma_j \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2} \quad (23)$$

を専用計算機で計算し，

$$\frac{d\mathbf{r}_{ix}}{dt} = u_{1y}, \quad (24)$$

$$\frac{d\mathbf{r}_{iy}}{dt} = -u_{1x} \quad (25)$$

とすればよい。3次元の場合と異なり，2次元の場合には1回速度場を求める毎に1回の積分で済むので，速度的な犠牲はない。

次に，速いと言われている専用計算機が，どの程度速いのか，実機で行ったベンチマーク結果を元に説明する。図5を見て欲しい。ここで使用した機材のスペックは，表1に示してある。これは，円形境界に閉じこめ

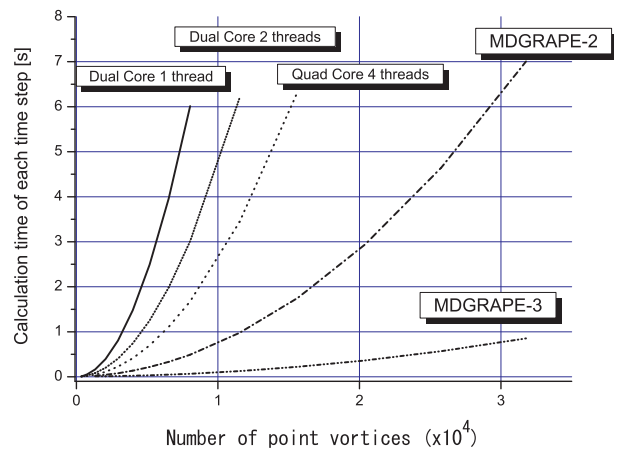


図5 円形境界に閉じこめられた点渦系の時間発展シミュレーションを元にしたベンチマーク結果。個数には鏡像渦の個数は含まれていないので，実際には 10^4 個ならば 2×10^4 個の点渦の積分を行う。実機スペックは，表1参照。

られた点渦系の時間発展シミュレーションを元にしたベンチマーク結果で，時間発展には4次のルンゲクッタ法

表 1 ベンチマークに使用した機材のスペック一覧

名称	CPU	Memory	FSB Clock
Dual Core	Core 2 Duo E6750 (2.66GHz)	DDR2 800 4GB	1333MHz
Quad Core	Core 2 Quad Q6600 (2.4GHz)	DDR2 800 4GB	1066MHz
MDGRAPE-2	Pentium4 2.4GHz	DDR 266 512MB	533MHz
MDGRAPE-3	Pentium4 660 (3.6GHz)	DDR2 667 2GB	800MHz

を用いている。すなわち、1ステップ時間発展を行うためには、ピオサバル積分を4回行わなくてはならない。2スレッドと4スレッドの結果は、コンパイラの自動並列化を用いて得た。

点渦数が8036個の場合、1スレッド~4スレッド、及びMDGRAPE-2/3での計算時間は、それぞれ6.01秒、3.01秒、1.67秒、0.491秒、0.0679秒であり、Dual Core 1スレッドの場合の計算速度(計算時間の逆数)を1とすると、それぞれ、1、1.99、3.59、12.2、88.5となる。Quad Core 1スレッドでの計算時間(6.67秒)を基準にしたQuad Core 4スレッドでの計算速度は3.99となり、Dual Core、Quad Coreともに、スケーラブルとなっていることがわかる。これは、データが効率よくキャッシュからCPUに供給されており、FSBがボトルネックとならないためと思われる。一方、MDGRAPE-2は、1スレッドの場合に比べ、12.2倍の性能を持つ。既に旧式になったとは言え、Dual Core 1スレッドで2週間かかる計算を1日強で終わらせる能力がある。さらに、現行機種種のMDGRAPE-3では、速度比は88.5に達し、8036個(鏡像渦を含めると16072個)の点渦系であれば、1日で130万ステップ程度のシミュレーションを終わらせる能力を有する。Dual Core 1スレッドで3ヶ月弱かかる計算が1日で終わると言っても良い。

3.2 専用計算機の使い方

読者にとっては、実際に、自分のシミュレーションに専用計算機が組み込めるか否かが気になると思うので、擬似的なプログラムで、クーロン多体問題を解く場合を念頭に置いたシミュレーションの流れを示す。

1000個の荷電粒子を考える。粒子 $i(i=1\cdots 1000)$ の電荷は Q_i である。 Q_i の値は、粒子ごとに異なっても構わない。粒子 i の位置を R_i 、電場を計算する位置を r_i 、その位置での電場を $E(r_i)$ で表す。今の例では、粒子がいる位置での電場を計算したいので $R_i=r_i$ を仮定するが、一般的には R_i と r_i は全く異なる位置を指すベクトル群で構わない。また、粒子数と電場を計算する位置の数も異なっていて構わない。図6における時間発展を計算するループでは、大きく分けて(a)~(d)の四つの処理が行われている。このうち、(a)~(c)の処理は、

```

・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 $r_i(=R_i)$ 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 …(a)
  ・配列2(各粒子の電荷)をMDGRAPE-2に渡す …(b)
  ・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 …(c)
  ・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 …(d)
end do
終了処理
    
```

図 6 MDGRAPE-3 を用いたシミュレーションの擬似コード

	配列要素 (1)	配列要素 (2)	配列要素 (3)	配列要素 (4)	配列要素 (5)	配列要素 (6)	
配列1	粒子1の x座標 R_{1x}	粒子1の y座標 R_{1y}	粒子1の z座標 R_{1z}	粒子2の x座標 R_{2x}	粒子2の y座標 R_{2y}	粒子2の z座標 R_{2z}	……
配列2	粒子1の 電荷 Q_1	粒子2の 電荷 Q_2	粒子3の 電荷 Q_3	粒子4の 電荷 Q_4	粒子5の 電荷 Q_5	粒子6の 電荷 Q_6	……
配列3	R_1 での電場 x成分 $E_x(R_1)$	R_1 での電場 y成分 $E_y(R_1)$	R_1 での電場 z成分 $E_z(R_1)$	R_2 での電場 x成分 $E_x(R_2)$	R_2 での電場 y成分 $E_y(R_2)$	R_2 での電場 z成分 $E_z(R_2)$	……

図 7 配列形式

MDGRAPE-3 側で用意された機能呼び出す処理であり、実際のプログラムではライブラリ関数(サブルーチン)を呼び出す処理に書き換えられる。すなわち、時間発展ループ内で行わなくてはならないことは、(a)~(c)のライブラリ関数を呼び出すことと、MDGRAPE-3 が計算した電場から、粒子の座標 R_i を運動方程式に従って更新することである。ここの処理の書き方を変えると、2次や4次のルンゲクッタ法を用いて時間発展を行うことも、もちろん可能である。

電場の計算は $O(N^2)$ (N :全粒子数)であるのに対し、粒子の座標の更新は $O(N)$ なので、 $O(N^2)$ の計算をMDGRAPE-3 で加速することにより、ふつうのPCをベースとしたシステムでも、すばらしいパフォーマンスを獲得することができる。

4 温度をパラメタとした点渦系の特徴付け

この章では、温度(エネルギー)をパラメタとして、点渦系がどのように特徴づけられるのか、シミュレーションから得た結果について説明をする。

4.1 状態密度

対象とする点渦系に負温度状態があり得るか否かを調べるためには、状態密度を数値的に求め、あるエネルギーでピークが現れるか否かを調べれば良い。そこで、系の保存量であるエネルギー E と慣性モーメント I をパラメタとして、ミクロカノニカル統計に従ったランダムサンプリングを行った。すなわち、 N 個の正の点渦、及び N 個の負の点渦をランダムに円形境界内に配置し、点渦分布から E, I を求め、度数分布を作成する。ここでの点渦数は、鏡像点渦を含めて $6724 \times 2 = 13448$ 個 ($N = 3362$) である。結果を、図 8, 9 に示す。図 8

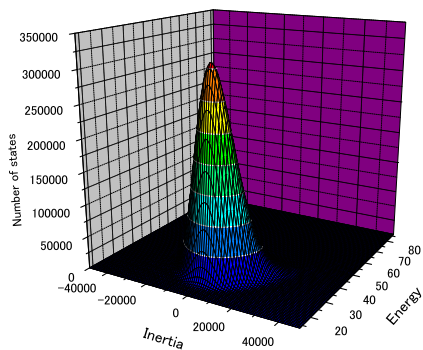


図 8 E, I をパラメタとした状態密度のプロット。

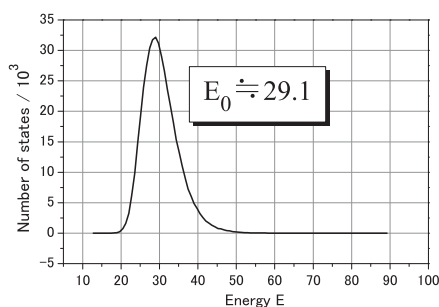


図 9 $I = 0$ の面で切り取った状態密度のプロット。

を見ると、確かにあるエネルギーにピークが現れている。今考えている系では、正の点渦と負の点渦の個数が等しいので、 $I = 0$ に関して状態密度は対称的となり、ここが峰となる。ピークとなるエネルギーを求めると、 $E_0 = 29.1, I = 0.0$ となった。つまり、この系は、 $E > 29.1$ で温度が負となる。この値は、粒子数などに依存して変化し、粒子数を増やすと E_0 の値はゼロに近

づきつつ、ピークが鋭くなる傾向があることもわかった⁸⁾。

4.2 時間漸近的平衡分布

次に、系の温度をパラメタとした平衡分布の分類を行った。点渦系の初期配置を決めるとエネルギー、すなわち温度が決まる。今、考えている点渦系は、エネルギー保存系なので、様々な温度の初期配置を用意し、それぞれ長時間に渡り時間発展を行うことにより、様々な温度での平衡分布を時間漸近的に得ることができる。結果を、図 10 に示す。縦線が記入してある位置が、 $E = E_0$ に対応する。これよりも左は低エネルギー側で温度は正、右は高エネルギー側で温度は負である。この図より、温度が正の状態では、正負点渦は円形境界内に様に分布するのに対して、負の状態では同符号点渦で小さい渦クラumpを形成し始め、よりエネルギーが高い状態では正負それぞれ一つずつの大きな渦クラumpを形成することがわかる。さらにエネルギーが高くなると、渦クラumpはより凝集する。この状態を突き詰めると、ある 1 点に正の全点渦、別のある 1 点に負の全点渦が凝集した状態となり、これがこの系での唯一無二の「最高エネルギー状態」となる。これは、系が負温度状態を有することの根拠でもある。

なお、系のエネルギーが保存されつつ、エネルギーが高いクラumpが形成可能なのは、背景渦があるからである。すなわち、クラumpを形成する点渦群は背景へ散らばる点渦群からエネルギーをもらい、クラumpを形成する。

4.3 2体相関

ここでの 2 体相関とは、配位空間上での点渦間距離の分布のことで、ある点渦を基準とした他の点渦の存在確率を、点渦間の距離をパラメタとしてプロットしたものである。これを、全点渦対全点渦、正の点渦対正の点渦、正の点渦対負の点渦について調べた。結果を、図 11 に示す。グラフの中には 3 本の線が記入されており、それぞれ、全点渦対全点渦、正の点渦対正の点渦、正の点渦対負の点渦に関する確率分布を表す。負温度の場合、左側のピークは同符号の渦クラump、右側のピークは反対符号の渦クラumpの分布に由来する。一方、正温度の場合、正の点渦対正の点渦、正の点渦対負の点渦のグラフは重なって 1 本になっており、どちらの符号の点渦から見ても分布は同じ、すなわち一樣であることを表している。

4.4 エネルギースペクトル

波数をパラメタにしたエネルギースペクトル (k スペクトル) について述べる。円形境界を有する点渦系のエ

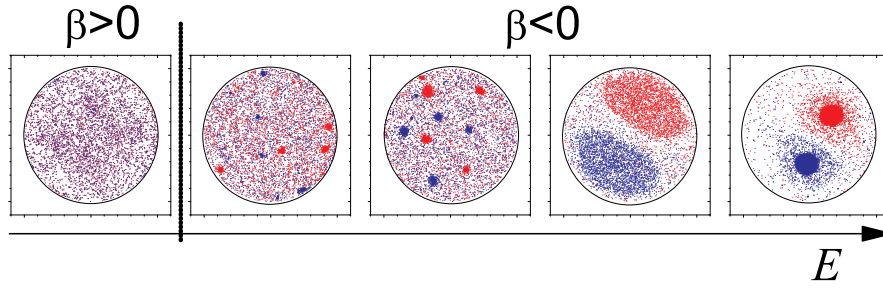


図 10 時間漸近的に得た平衡状態分布をエネルギー別にプロットしたもの。左から右に行くに従ってエネルギーが上がる。エネルギーが大きい側の分布に見られる二つの渦クランプは、右上が正、左下が負の点渦で構成されている。

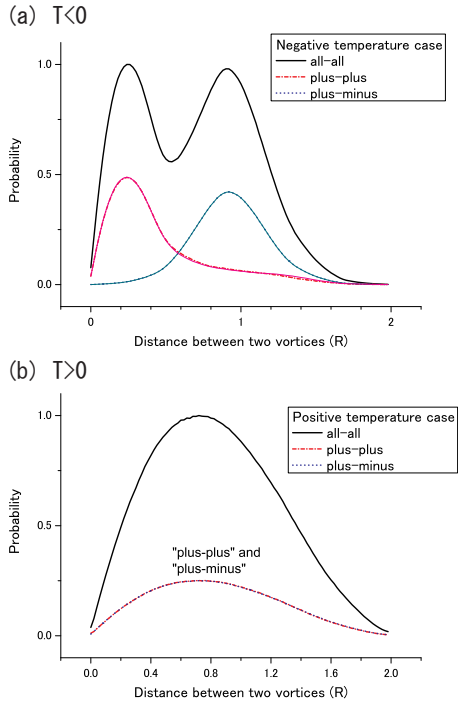


図 11 (a) 負温度の場合と (b) 正温度の場合の 2 体相関。

エネルギースペクトルは、解析的に求められている^{22,23)}。

$$\begin{aligned}
 E(k) = & \frac{1}{4\pi k} \sum_i^N \Gamma_i^2 \\
 & + \frac{1}{4\pi k} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \Gamma_i \Gamma_j J_0(k|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \\
 & - \frac{1}{2\pi k} \sum_i^N \sum_j^N \Gamma_i \Gamma_j \sum_{\ell=0}^{\infty} \epsilon_{\ell} \left(\frac{|\mathbf{r}_j|}{R} \right)^{\ell} \\
 & \quad \times J_{\ell}(kR) J_{\ell}(k|\mathbf{r}_i|) \cos(\ell(\varphi_i - \varphi_j)) \\
 & + \frac{1}{2\pi k} \sum_i^N \sum_j^N \Gamma_i \Gamma_j \sum_{\ell=0}^{\infty} \epsilon_{\ell} \left(\frac{|\mathbf{r}_j|}{R} \right)^{\ell} \\
 & \quad \times J_{\ell}^2(kR) \cos(\ell(\varphi_i - \varphi_j)) \quad (26)
 \end{aligned}$$

$$\epsilon_{\ell} = \begin{cases} 1 & \ell = 0 \\ 2 & \ell \geq 1 \end{cases} \quad (27)$$

$$x_i = |\mathbf{r}_i| \cos(\varphi_i) \quad (28)$$

$$y_i = |\mathbf{r}_i| \sin(\varphi_i) \quad (29)$$

この式は、第 1, 2 項が Novikov によって求められた境界無しの場合の表式で、それに吉田らが求めた第 3, 4 項が境界の効果として加わった形になっている。この式を様々なエネルギーの平衡分布に適用し、エネルギースペクトルを求めた。結果を、図 12 に示す。この図から、

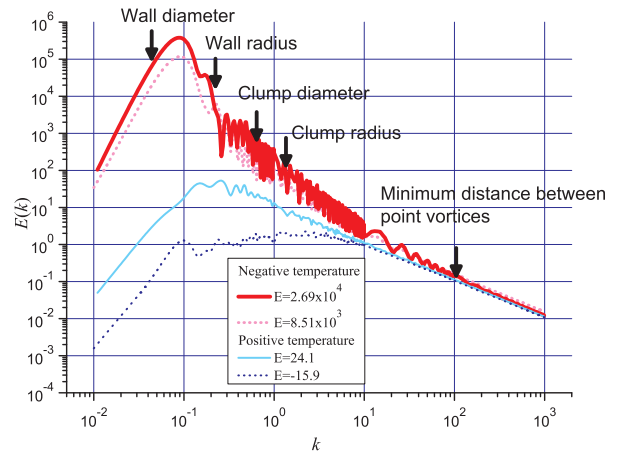


図 12 エネルギー (温度) をパラメタとしたスペクトルの分類。中波数領域の傾きに温度依存性が表れる。

エネルギースペクトルの中波数領域に、温度依存性が表れ、エネルギーが高くなるにつれて、傾きは大きくなっていることがわかる。また、低波数側は境界の直径のスケールから、高波数側は最小点渦間距離から制限を受ける。

温度をパラメタにして、中波数領域の傾きをプロットしたものを図 13 に示す。低エネルギー側では比較的綺麗な温度依存性が見えているが、高エネルギー側には、温度依存性が見えずユニバーサルに見える部分がある。ただし、高エネルギー側で時間発展シミュレーションの

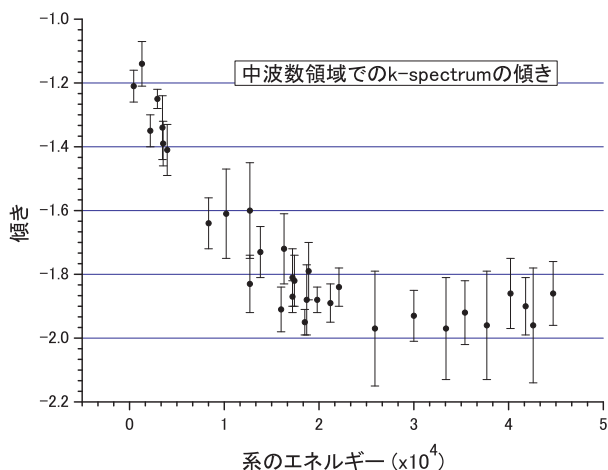


図 13 中波数領域の傾きをエネルギーをパラメタとしてプロット。温度依存性が見られる領域と見られない領域が見られる。

精度が足りていない可能性もあり、現在、この部分について、検証を進めている。

(26) 式において、正の点渦と負の点渦が一樣に分布していると仮定すると、第 1 項の寄与のみが残り、ベキは -1 となる。図 12 の下側の 2 本の線は、正温度に対応したものであり、点渦群は一樣に分布しているはずなので、ベキは -1 になると予想される。しかし、傾きが -1 になっていないものが、図には含まれている。正温度の二つの平衡分布をプロットすると、図 14 のようになり、具体的に指摘できるような違いは見あたらない。そこで、正温度側にも、一樣分布以外の平衡分布が存

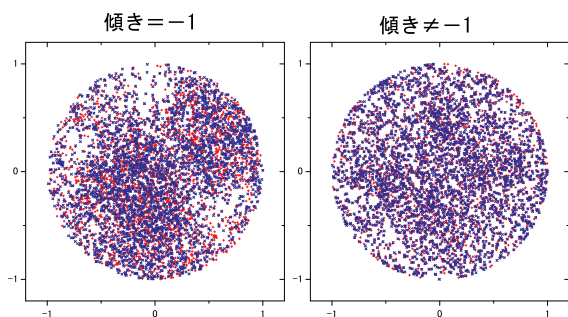


図 14 正温度側の二つの平衡分布。

在するものと予想し、2 体相関を改めて調べてみたところ、図 15 のようになった。二つの分布の 2 体相関の違いは、距離ゼロの近辺に現れる。ベキが -1 になるケースでは、正の点渦の周りの正の点渦の分布、および正の点渦の周りの負の点渦の分布とともに、距離ゼロ付近でゼロになる。一方、ベキが -1 にならないケースでは、正の点渦の周りの正の点渦の分布は距離ゼロでゼロとなるが、正の点渦の周りの負の点渦の分布は距離ゼロでゼ

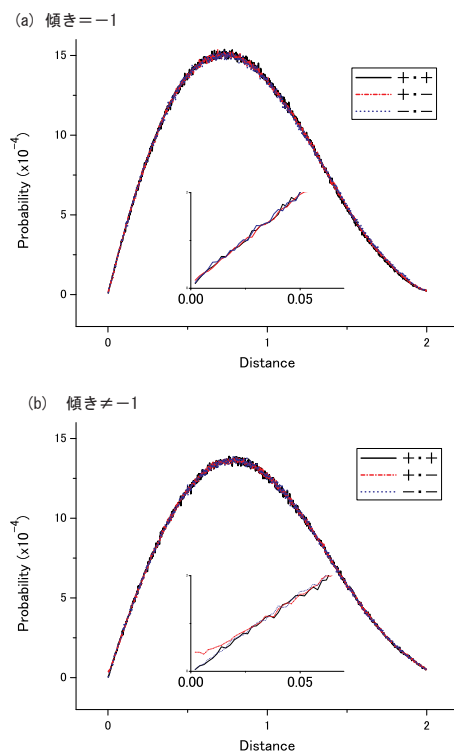


図 15 正温度側の二つの平衡分布に対応した、2 種類の 2 体相関。

ロとならずに有限のまま留まる。このことから、正温度側には、図 16 に示したような少なくとも二つの平衡分布が存在することがわかる。

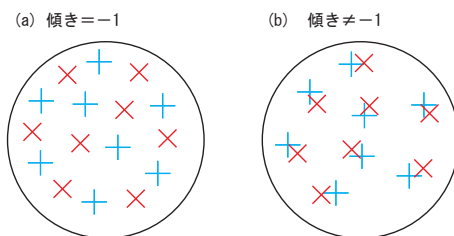


図 16 正温度側の二つの平衡分布の概念図。2 体相関の形から、このような分布であることが予想される。

5 まとめ

本解説では、Onsager 理論について、主に筆者が行ってきたシミュレーション研究でのシミュレーション技法と結果について解説を行った。

今後数年間は、CPU コアの個数を増やす方向で PC の高速化が行われていく。ただし、 n コアの場合に速度が 1 コアの n 倍となるようなスケラブルなコードを書くのは容易ではなく、今後しばらくは、かつてのベクトル計算機と似た使い勝手を提供できる専用計算機が優位に立つものと思われる。また、最近、新たに開発された

GRAPE-7では、FPGA(ハードウェア定義言語により再構成可能な半導体製品)をメインチップに用いることにより、ユーザ自らが自分専用の専用計算機を設計できるといったソリューションも提供されるようになっており²⁴⁾、「専用」とは言いながら、その応用範囲は確実に広がりがつつある。

Onsager が提唱した負温度状態については、高レイノルズ数の Navier-Stokes 系でも、平衡状態分布は sinh-Poisson 方程式の解となることが指摘されているなど²⁵⁾、点渦系から離れた所での議論もある。また、本稿ではほとんど触れることができなかったが、渦結晶についてもエントロピー最大化やエンストロフィ最小化といった法則性がいろいろ指摘されているが、決定打となるものはいまだ存在せず、目が離せない。

謝辞：本研究は、戎崎俊一氏(理研主任研究員)、泰地真弘人氏(理研チームリーダー)、成見哲氏(慶應義塾大学理工学部講師)から専用計算機について支援を受け実施されています。際本泰士氏(京都大学教授)、富田博之氏(京都大学名誉教授)、佐野光貞氏(京都大学助手)には、ポストドク時代から議論のため多くの時間を割いていただきました。また、並列化・最適化について、堀越将司氏(インテル株式会社)から、貴重な助言をいただきました。みなさまに感謝いたします。

付録 1 非中性プラズマと 2 次元オイラー流体とのアナロジー

詳しくは、文献 1 等を参照してもらいたいが、ここでは読者の利便性を考え、簡単に非中性プラズマと 2 次元オイラー流体とのアナロジーについて説明する。

円筒容器の軸方向を z 軸とする。容器には、一様強磁場

$$\mathbf{B} = B_0 \hat{z} \quad (30)$$

がかけられている (\hat{z} : z 方向の単位ベクトル)。案内中心のドリフト速度は、1 電子の運動方程式

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (31)$$

(ただし、 $-e$: 電荷、 \mathbf{E} : 電場、 \mathbf{B} : 磁場)をサイクロトロン運動 1 周期について平均化し左辺をゼロとした上で、右辺を \mathbf{v} について整理した

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{|\mathbf{B}|^2} \quad (32)$$

で与えられる。(32) 式を、(30) 式と自己電場の静電ポテンシャル

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi \quad (33)$$

を使って書き表すと、

$$\mathbf{v} = \frac{1}{B_0} \hat{z} \times \nabla\phi \quad (34)$$

となり、静電ポテンシャルが流れ関数のように振る舞うことがわかる。この式の回転を求めると、それが渦度となり、

$$\begin{aligned} \omega_z \hat{z} &= \nabla \times \mathbf{v} = \frac{\hat{z}}{B_0} \nabla^2 \phi \\ &= \frac{en}{\epsilon_0 B_0} \hat{z} \end{aligned} \quad (35)$$

が得られる。最後の式変形でポアソン方程式

$$\nabla^2 \phi = \frac{en}{\epsilon_0} \quad (36)$$

を使った。(35) 式は、純電子プラズマの数密度 n が渦度に比例することを表している。また、(34) 式の発散を求めると、

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (37)$$

となり、純電子プラズマの流れは非圧縮であることがわかる。

引用文献

- 1) 際本泰士: 非中性プラズマ中の渦運動, 日本物理学会誌, **56** (2001) 253–261.
- 2) Y. Yatsuyanagi, Y. Kiwamoto, T. Ebisuzaki, T. Hatori, and T. Kato: Simulations of diocotron instability using a special-purpose computer, mdgrape-2, Phys. Plasmas, **10** (2003) 3188–3195.
- 3) Y. Kiwamoto, K. Ito, A. Sanpei, and A. Mohri: Dynamics of electron-plasma vortex in background vorticity distribution, Phys. Rev. Lett., **85** (2000) 3173–3176.
- 4) Y. Kawai, Y. Kiwamoto, Y. Soga, and J. Aoki: Turbulent cascade in vortex dynamics of magnetized pure electron plasmas, Phys. Rev. E, **75** (2007) 066404–1–6.
- 5) Y. Kiwamoto, N. Hashizume, Y. Soga, J. Aoki, and Y. Kawai: Formation and relaxation of two-dimensional vortex crystals in a magnetized pure electron plasma, Phys. Rev. Lett. **99** (2007) 115002–1–4.
- 6) J. Sommeria (M. Lesieur, A. Yaglom, and F. David, editors): Two-dimensional turbulence, New Trends in Turbulence, (Springer-Verlag, 2002) Chap. 8,
- 7) P. Tabeling: Two-dimensional turbulence: a physicist approach, Phys. Rep. **362** (2002) 1–62.
- 8) Y. Yatsuyanagi, Y. Kiwamoto, H. Tomita, M. M. Sano, T. Yoshida, and T. Ebisuzaki: Dynamics of two-sign point vortices in positive and negative temperature states, Phys. Rev. Lett. **94** (2005) 054502–1–4.
- 9) L. Onsager: Statistical hydrodynamics, Nuovo Cimento Suppl. **6** (1949) 279–287.
- 10) G. L. Eyink and K. R. Sreenivasan: Onsager and the theory of hydrodynamic turbulence, Rev. Mod. Phys. **78** (2006) 87–135.

- 11) G. Joyce and D. Montgomery: Negative temperature states for the two-dimensional guiding-center plasma, *J. Plasma Phys.* **10** (1973) 107–121.
- 12) D. Montgomery and G. Joyce: Statistical mechanics of negative temperature states, *Phys. Fluids* **17** (1974) 1139–1145.
- 13) S. Kida: Statistics of the system of line vortices, *J. Phys. Soc. Jpn.* **39** (1975) 1395–1404.
- 14) R. A. Smith and T. M. O’Neil: Nonaxisymmetric thermal equilibria of a cylindrically bounded guiding-center plasma or discrete vortex system, *Phys. Fluids B* **2** (1990) 2961–2975.
- 15) D. J. Johnson: Density of states of inviscid incompressible two-dimensional fluid unit disk vortex system, *Phys. Fluids*, **31** (1988) 1856–1861.
- 16) O. Bühler: Statistical mechanics of strong and weak point vortices in a cylinder, *Phys. Fluids* **14** (2002) 2139–2149.
- 17) T. S. Lundgren and Y. B. Pointin: Statistical mechanics of two-dimensional vortices, *J. Stat. Phys.* **17** (1977) 323–355.
- 18) Y. B. Pointin and T. S. Lundgren: Statistical mechanics of two-dimensional vortices in a bounded container, *Phys. Fluids* **19** (1976) 1459–1470.
- 19) T. Ito, J. Makino, T. Ebisuzaki, and D. Sugimoto: A special-purpose n-body machine GRAPE-1, *Comput. Phys. Comm.* **60** (1990) 187–194.
- 20) R. Susukita, T. Ebisuzaki, B. G. Elmegreen, H. Furusawa, K. Kato, A. Kawai, Y. Kobayashi, T. Koishi, G. D. McNiven, T. Narumi, and K. Yasuoka: Hardware accelerator for molecular dynamics: MDGRAPE-2, *Comput. Phys. Comm.* **155** (2003) 115–131.
- 21) <http://www.peta.co.jp/>.
- 22) T. Yoshida and M. M. Sano: Numerical simulation of vortex crystals and merging in n-point vortex systems with circular boundary, *J. Phys. Soc. Jpn.* **74** (2005) 587–598.
- 23) E. A. Novikov: Dynamics and statistics of a system of vortices, *Sov. Phys. JETP*, **41** (1975) 937–943.
- 24) <http://www.kfcr.jp/>.
- 25) D. Montgomery, W. H. Matthaeus, W. T. Stribling, D. Martinez, and S. Oughton: Relaxation in two dimensions and the sinh-poisson equation, *Phys. Fluids A* **4** (1992) 3–6.