

第2章 1次元電磁粒子シミュレーション法

ここでは、宇宙プラズマを構成する電子、イオンを粒子として扱う電磁粒子シミュレーション手法について概説する。

2.1 基礎方程式

本シミュレーションコードで用いる基礎方程式は衝突項を含まない粒子の運動方程式 (式 (1.1)) および以下に示した Maxwell の電磁方程式である。

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_o \mathbf{J} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (2.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.4)$$

ここで、 c , $\mathbf{J}$, ρ はそれぞれ、光速、電流密度ベクトル、電荷密度を示す。

Maxwell 方程式のうち、式 (2.3), 式 (2.4) は時間 $t=0$ で満足されておれば、それ以後の時間においては自動的に満足されるので、基本的には式 (2.1), 式 (2.2) だけ解けばよい。すなわち、シミュレーションシステム内の電界の初期値を求めるためには式 (2.3) のポアソン式を解く必要がある。また、式 (2.4) より、1次元シミュレーション方向での磁場の変動は常にゼロである。

2.2 粒子モデルの基本概念

前述のテスト粒子解析とは違い、粒子シミュレーションでは、粒子更新による電流や電荷の変化が電磁界に影響を与え、その影響が粒子にフィードバックされる。すなわち、粒子シミュレーションにおいて、プラズマや電磁界の時間空間発展は粒子の運動方程式と Maxwell 方程式を互いに解き進めることによって得られるわけである。運動方程式と Maxwell 方程式を繋げる物理量は電流密度 $\mathbf{j}$ と電荷密度 ρ であり、これらはプラズマ各粒子の運動を決定する速度 $\mathbf{v}$, $\mathbf{r}$ で表される。しかし、現実のプラズマは、たとえば、デバイ長を単位とする立方体内に非常に多数の粒子が含まれるため、(e.g., 磁気圏プラズマにおいては $n\lambda_D \sim 10^9$ 程度)、粒子一つ一つの運動をすべて追跡することは計算機資源から見ても非現実的であ

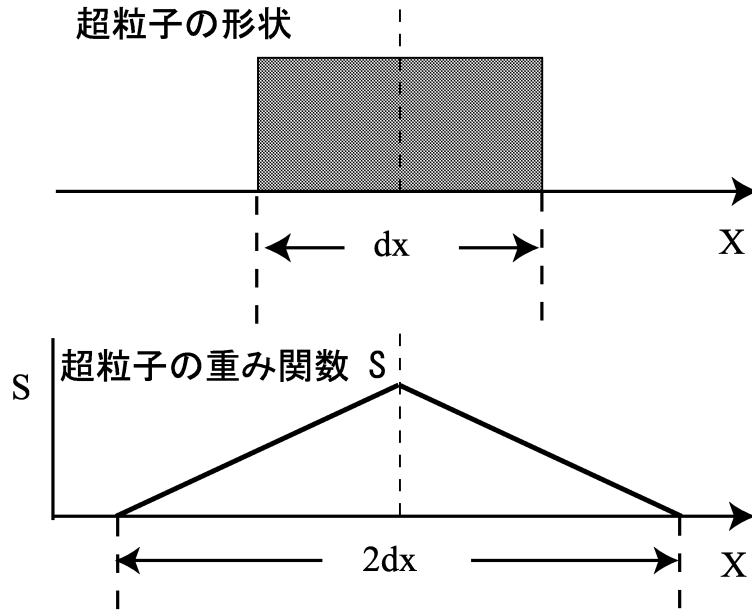


図 2.1: 超粒子の形状および Shape factor

る。また、粒子の運動を追跡する場合、粒子軌跡は連続であるため任意の粒子位置において電磁界が必要となる。

これらの問題を解決するために PIC 法 (Particle-In-Cell) を用いる。まず、多くの現実のプラズマ粒子を代表する大きい電荷、大きい質量をもつ超粒子 (superparticle) を考え、この超粒子を多数用いることによりプラズマ環境を再現する。この超粒子に空間的にある大きさをもたせる方がより現実のプラズマの性質を模擬することができる。今回は、簡単のため図 2.1 に示すような長方形形状を採用する。すなわち、大きさは空間格子点間隔 Δx をもつとする。

また、超粒子はシミュレーションシステム内で任意の位置を取ることができる。超粒子に働く電磁界は粒子同士のクーロン力を直接計算するのではなく、シミュレーション空間に離散点として定義された空間格子点にその粒子情報 (電流、電荷) を一旦配分し、それらの情報を用いて同じく格子点上で定義された電磁界成分について Maxwell 方程式を用いて更新する。

上述のように超粒子は点電荷ではなく広がりがあるため、格子点に電荷量を配分するときには $qS(\mathbf{X}' - \mathbf{x})$ に従って行う。この重み関数 S を shape factor と呼び、図 2.1 に示す。ただし $\mathbf{X}'$ は格子点位置、 $\mathbf{X}$ は粒子の中心とする。各超粒子の運動を更新する際には、その隣接する格子点上の電磁界を超粒子位置に内挿しそれを用いて運動方程式を解く。すなわち、超粒子の情報を格子点を介して電磁界更新に使い、その電磁界を再び粒子更新に用いるのが PIC 法である。粒子の速度 $\mathbf{v}$ および位置 $\mathbf{r}$ 更新は上述したが、電磁界の格子点での扱いについて以下に述べる。

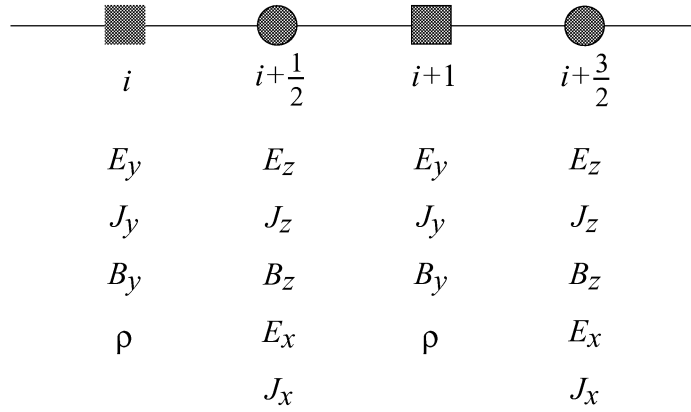


図 2.2: 整数格子と半整数格子および各電磁界の定義点

2.3 電磁界定義のための空間格子点

テスト粒子シミュレーションでは、粒子ダイナミクスが電磁界に影響を及ぼさないため、電磁界を Maxwell 方程式で解き進める必要がなかった。しかし、一般に、超粒子の運動は電流と等価であり、これによりシステム内の電磁界は変動する。この超粒子プラズマダイナミクスによる電流の寄与を Maxwell 方程式に取り込み、電磁界を解き進めるには、それらの各成分を時間的、空間的に離散点に定義する必要がある。これは、Maxwell 方程式を差分形式で解くためである。ここでは、まず空間格子点について説明する。

Maxwell 方程式を中心差分で解き進めるため、シミュレーションシステム内に整数格子群 $i\Delta x (i = 1, 2, 3, \dots, N = x)$ と半整数格子群 $(i + 1/2)\Delta x$ を用意する。図 2.2 に示すように E_y, B_y, J_y, ρ は整数格子点に定義され、その他の電磁界成分は半整数格子点に定義される。電界成分と磁界成分は互いに入れ子に配置されているが、これは、Maxwell 方程式を x 方向の空間変動のみを考慮した 1 次元空間で展開してみれば理解できる。また、電流密度 J_x, J_y, J_z はそれぞれ電界成分 E_x, E_y, E_z と同じ格子点に定義する。ただし、整数格子、半整数格子とは便宜上の呼び名であり、シミュレーションコード内では、電磁界の配列の添え字は整数であるので混乱しないように注意する。

前章で Buneman-Boris 法による粒子速度更新について述べたが、その際に、粒子位置での電磁界の値が必要となる。粒子位置での電磁界は粒子位置に隣接する 2 つの格子点上の電磁界成分を用いて内挿することにより求める。ただ、上述のように電磁界成分は整数格子、半整数格子の二つの格子システムに定義されているため、各粒子位置への内挿法はそれぞれ違う。また、粒子位置での電磁界成分を求める際には、静電的および静磁的ないわゆる“セルフフォース”に注意する必要がある。以下にそれについて簡単に述べる。

後述するが、静電界成分は電荷密度を用いてポアソン方程式を満たすように得られる。すなわち、

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} = \rho \quad (2.5)$$

が満たされ、 $E_{x,i+1/2} - E_{x,i-1/2} = \rho_i$ という関係がシミュレーション内で得られる（簡単の

ために $\epsilon_0 = 1$ としている。)。見てわかるように、 E_x は半整数格子点での定義であるため、電荷密度 ρ は整数格子点で定義される。すなわち、シミュレーションシステム内に分布するプラズマ粒子の各電荷量は各粒子に隣接する整数格子点に線形的に配分され電荷密度 ρ が得られ、その情報を元に式 (2.5) から半整数格子点において電界値 E_x が求められる。

さて、運動方程式を用いて粒子速度を更新する場合は粒子位置での電界値が必要であるが、これを上に定義された半整数格子点から内挿して求めると正しい電界値が得られない。たとえば、速度を持たない1粒子をある点におき、上のようにして求めた電界値を用いると粒子位置での電界値は本来ゼロであるべきが、ゼロにはならない。これをセルフフォースという。詳細は省くがこのセルフフォースを回避するには、Maxwell 方程式を解くために半整数格子に定義されていた電界値 E_x を粒子更新の際にはもともとの電荷配分点である整数格子点に再配分し、その値を用いて粒子位置に電界値を内挿する。すなわち粒子速度更新の際には $E_{x,i} = (E_{x,i-1/2} + E_{x,i+1/2})/2$ で得られた値を用いて粒子位置に電界値を内挿するとうまくいく。つまり、セルフフォース回避の原則として、粒子電荷を配分した格子点での電界成分を用いて粒子位置での電界成分を内挿することが言える。同じことが電流密度 J と磁界 B についてもいえる。Maxwell 式より 1次元では B_y, B_z は

$$B_{z,i+1/2} - B_{z,i-1/2} = -\frac{J_{y,i}}{c^2} \quad (2.6)$$

$$B_{y,i+1} - B_{y,i} = \frac{J_{z,i+1/2}}{c^2} \quad (2.7)$$

となり B_z と J_y および B_y と J_z についてもそれぞれ互いに入れ子になる必要があるため違う格子点で定義される。しかし、電流密度は粒子情報から直接得られるので、粒子速度更新の際に磁界を用いる場合は電流密度が定義された格子点に磁界を再配置する必要がある。

2.4 時間更新チャート

ここでは、電磁界と粒子の時間発展を解き進める手順を概説する。フローチャートを図 2.3 に示す。時間についても空間同様、整数格子群 $n\Delta t$ 、半整数格子群 $(n+1/2)\Delta t$ の2つを用意し、時間的な中心差分に対応させる。

1. 初期のプラズマ分布より各格子点における電界密度 ρ を求め、ポアソン式を解き、初期電界を求める。
2. 半ステップ、磁界 $\mathbf{B}$ を解く。
3. $t = n\Delta t$ における電界 $\mathbf{E}$ 、磁界 $\mathbf{B}$ が求まったので運動方程式より $t = (n+1/2)\Delta t$ における各超粒子の速度 v を求める。
4. $t = (n+1/2)\Delta t$ の速度を用いて粒子位置 r を半ステップ分進める。
5. $t = (n+1/2)\Delta t$ における各粒子の位置、速度が決まったので電流密度 $\mathbf{J}$ を各格子点で計算する。
6. 磁界 $\mathbf{B}$ を更に半ステップ進める。

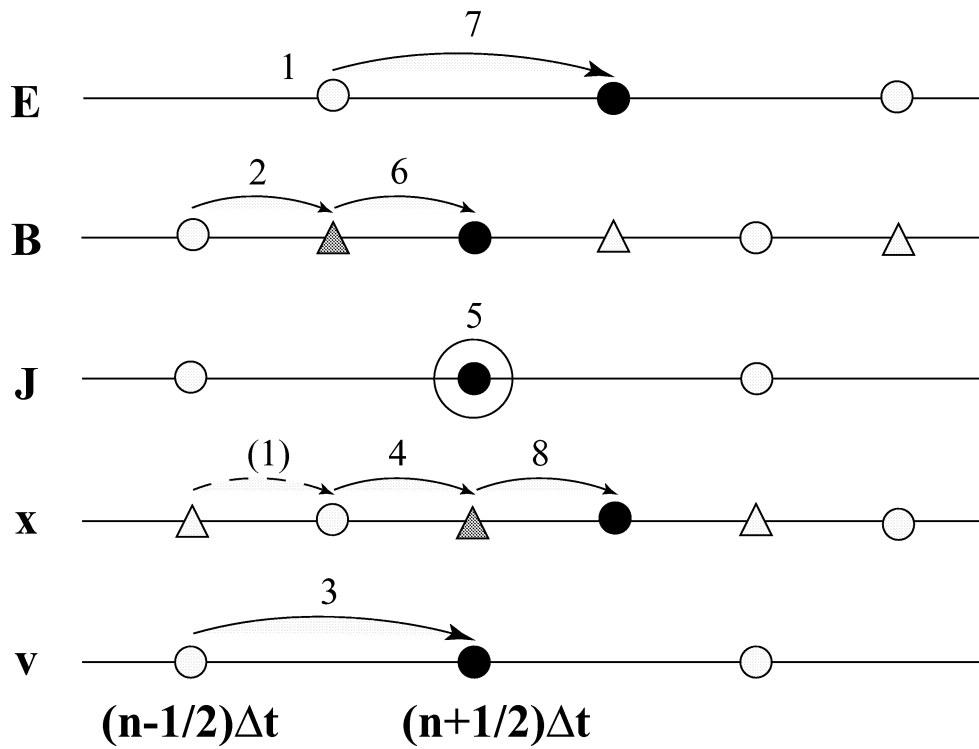


図 2.3: 時間更新チャート

7. $t = (n+1)\Delta t$ における電界 E を求める。

8. $t = (n+1/2)\Delta t$ の速度 v を用いて更に半ステップ各粒子の位置を進める。

以上、1ステップ (Δt) 分、電磁界および粒子ダイナミクスが時間更新される。これらを繰り返し行うことにより、シミュレーションシステム内でのプラズマ現象の空間・時間発展を解き進めることができる。

2.5 電界及び磁界更新ルーチン

電界の時間更新には式 (2.1) を用いる。1次元モデルでは、解くべき式は以下の3式である。

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = -\frac{J_x}{\epsilon_0} \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = -c^2 \frac{\partial B_z}{\partial x} - \frac{J_y}{\epsilon_0} \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = c^2 \frac{\partial B_y}{\partial x} - \frac{J_z}{\epsilon_0} \quad (2.10)$$

また、磁界の時間更新には式 (2.2) を用いる。1次元モデルでは、解くべき式は以下の2式である。式 (2.4) から B_x の変動はないので解かない。

$$\frac{\partial B_y}{\partial t} = \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial B_z}{\partial t} = -\frac{\partial E_y}{\partial x} \quad (2.12)$$

ただし、図 2.3 の時間更新チャートであるように、磁場は運動方程式を解く際に電界と時間ステップをあわせる必要があるため、 $\Delta t/2$ 分を2回解くことになる。

2.6 電流密度ルーチン

電流密度 $\mathbf{J}$ は各超粒子の速度と位置から計算する。Maxwell 方程式の差分形から、 J_x と J_z は半整数格子点、 J_y は整数格子点に定義されているが、簡単のため、一旦、半整数格子点で電流密度 $\mathbf{J}$ を計算し、その後 J_y を整数格子に再配置することにする。

J_y と J_z については、後述する電荷密度の計算と同じ方法で超粒子のモーメントを隣接する2つの格子点に線形重みで分配する。 J_x については電荷保存法を用いる。これはシステム方向の電荷の連続式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (2.13)$$

を常に満たすように電流を求める方法である。差分形で書くと、

$$\rho_i^{n+1} - \rho_i^n = -(J_{i+1/2}^{n+1/2} - J_{i-1/2}^{n+1/2}) \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (2.14)$$

となる。

超粒子が1タイムステップ Δt の時間に1空間格子 Δx 以上移動しない場合、 $J_x^{n+1/2}$ を計算するには、2つの場合が考えられる。まず第一の場合は、図 2.4 の上のパネルに示したように粒子が同じ格子内の移動であり、第二の場合は、同図の下のパネルにあるように2つの格子が関係する場合である。

第一の場合は、格子点 $X_{i+1/2}$ における電流値 $I_{i+1/2}$ は時間ステップ Δt 内に $X_{i+1/2}$ の点を通過した電荷量を計算することで得られる。すなわち、

$$I_{i+1/2} = \frac{q_A - q_B}{\Delta t} \quad (2.15)$$

となる。ただし、 q_A, q_B は次のように与えられる。

$$q_A = q \frac{X_{i+1} - x_p(n\Delta t)}{\Delta x}, \quad q_B = q \frac{X_{i+1} - x_p((n+1)\Delta t)}{\Delta x} \quad (2.16)$$

また、第二の場合は、粒子運動が $X_{i+1/2}$ と $X_{i+3/2}$ の2つの格子点での電流に寄与する。すなわち、

$$I_{i+1/2} = \frac{q_A}{\Delta t}, \quad I_{i+3/2} = -\frac{q_B}{\Delta t} \quad (2.17)$$

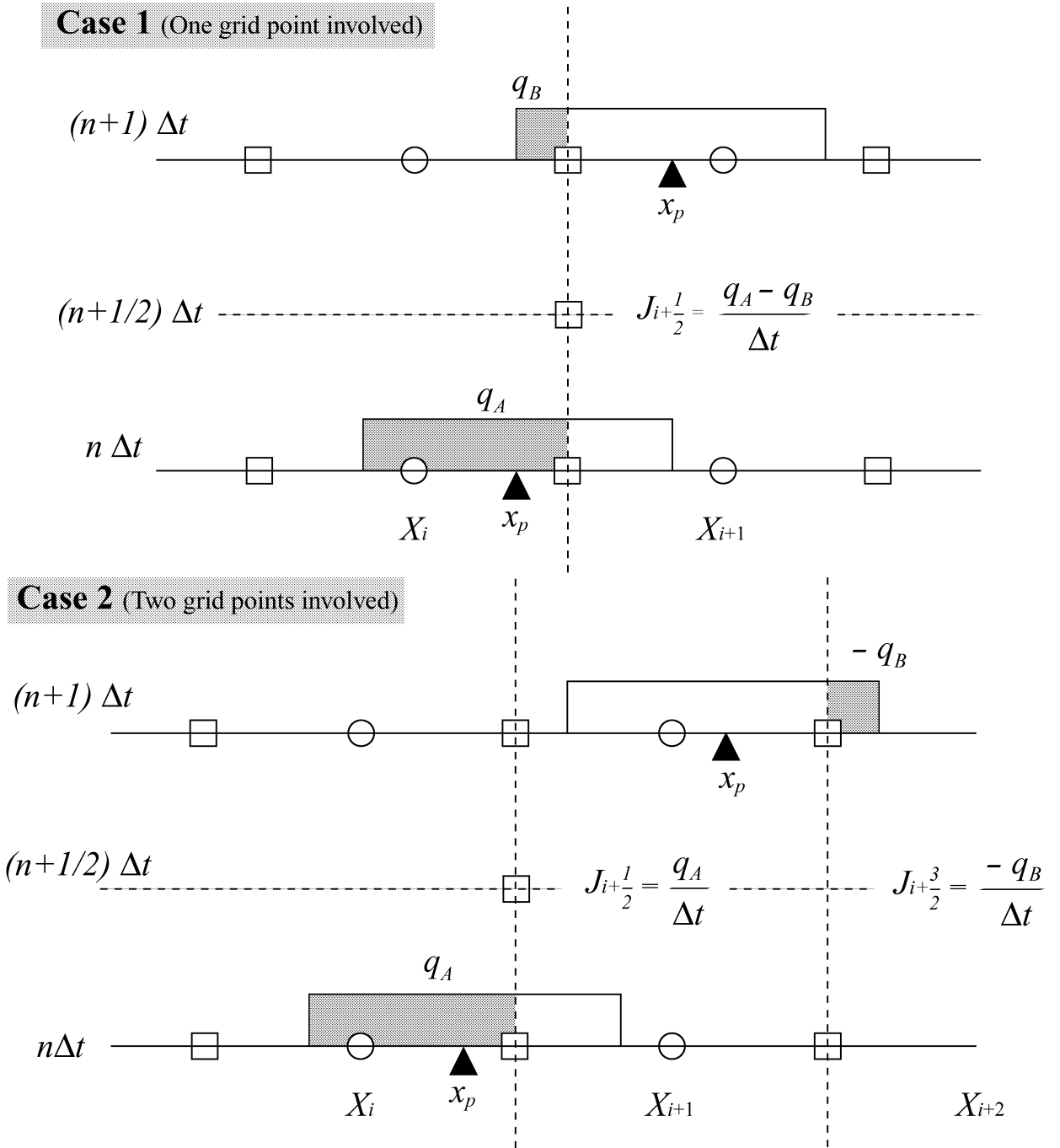


図 2.4: 電荷保存法による電流密度計算 (ケース 1 (上) とケース 2 (下))

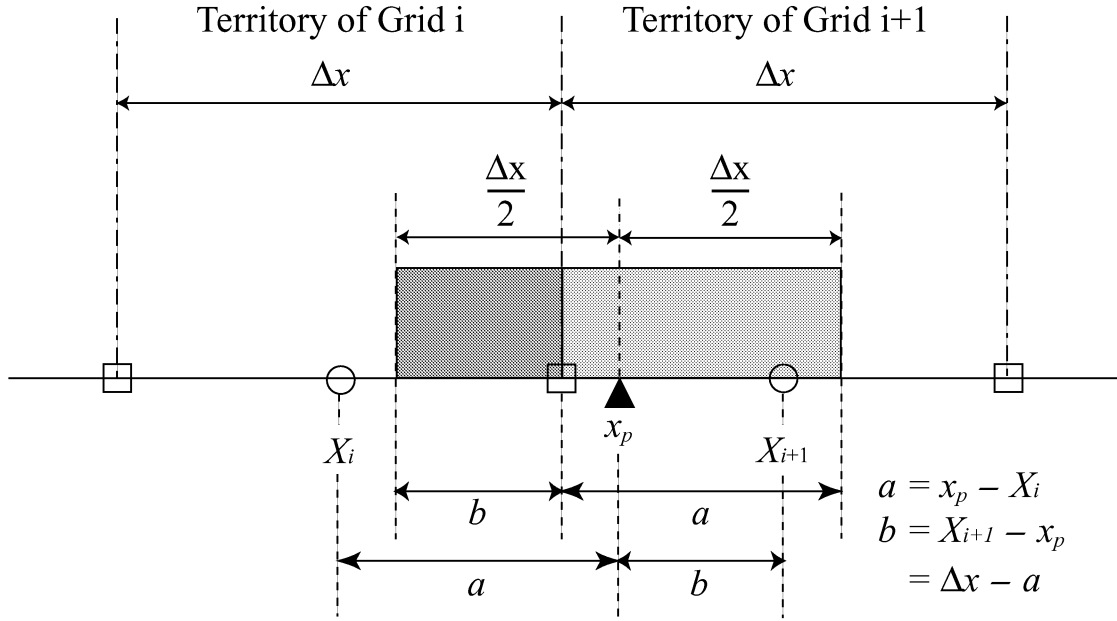


図 2.5: 領域比例配分による電荷密度計算

となる。ただし、図では、粒子速度が正を仮定したが、負の速度を持つ場合、式 (2.15) と式 (2.17) の左辺に-1 をかける必要がある。

この電荷保存法では、粒子位置の情報が $n\Delta t$ と $(n+1)\Delta t$ の時間において得られれば $(n+1/2)\Delta t$ での電流密度が求まる。そのため、前述の時間更新チャートにおいて、粒子位置は $(n+1/2)\Delta t$ において必要ないように思われる。3次元モデルではこれは正しいが、1次元、2次元モデルでは、空間グリッドが存在しない方向の電流密度成分は、後述する電荷密度計算と同様の方法で超粒子モーメントを格子点に集めることによって計算する。このため、前述の時間更新チャートのように、粒子を半時間ステップずつ動かし、 $(n+1/2)\Delta t$ における粒子位置と速度の情報が必要となる。

以上の方法は、既に公開されている KEMPO1 シミュレーションコードにおいて、オリジナルな電流ルーチンとして実装されている。(Omura, Y. and H. Matsumoto, KEMPO1: Technical Guide to One-Dimensional Electromagnetic Particle Code, *Computer Space Plasma Physics: Simulation Techniques and Softwares*, ed. by H. Matsumoto and Y. Omura, pages 21-65, Terra Scientific, Tokyo, 1993. (<http://www.terrapub.co.jp/e-library/cspp/index.html>))

2.7 電荷密度ルーチンとポアソン方程式の解法 (補足)

電界の初期値を得るためには、シミュレーションのはじめにポアソン方程式を解く必要がある。これにより、初期の電荷密度分布による電界分布が得られ、この電界を用いて、上述の電界更新を行う。ポアソン方程式にはシステム内の電荷密度 ρ が必要であるが、こ

れを求めるにはシステム内に存在する超粒子の電荷を各格子点に配分する必要がある。基本的には図 2.1 に示した重み関数 S を用いて各格子点に電荷を配分する。その具体的な方法を図 2.5 に詳しく示す。超粒子の形は幅 Δx の長方形とし、その中心位置を x_p とすると、もし $X_i \leq x_p \leq X_{i+1}$ なら格子点 X_i と X_{i+1} に粒子の電荷 q は配分される。すなわち、 $q(x_p - X_i)/\Delta x$ は $\rho(X_{i+1})$ に配分され、 $q(X_{i+1} - x_p)/\Delta x$ は $\rho(X_i)$ に配分される。

電荷密度分布が得られれば、それを用いてポアソン方程式を解く。

$$\nabla^2 \phi = -\rho \quad (2.18)$$

差分形式では次のように表される。

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{\phi(x_{i+1}) - 2\phi(x_i) + \phi(x_{i-1}))}{(\Delta x)^2} \quad (2.19)$$

ポアソン式の解法はさまざまなものが提唱されているが、空間的に周期境界のもとでは、高速フーリエ変換を用いた方法が一般的である。すなわち、電荷密度分布 $\rho(x_i)$ をフーリエ変換し $\rho(k_m)$ を求め、次式から波数空間 k において電位 $\phi(k_m)$ を求める。

$$K_m^2 \phi(k_m) = \rho(k_m) \quad (2.20)$$

$k_m = 2\pi m/L : m = 1, 2, \dots, N_x/2$ であり、

$$K_m = \frac{\sin(k_m \Delta x/2)}{\Delta x/2} \quad (2.21)$$

得られた電位 $\phi(k_m)$ を逆フーリエ変換することにより各格子点での $\phi(x_i)$ 、すなわち ϕ_i を求める。電界値 $E_{x,i+1/2}$ は次式から求まる。

$$E_{x,i+1/2} = \frac{\phi_i - \phi_{i+1}}{\Delta x} \quad (2.22)$$

上述の電荷保存法による電流計算を用いれば、基本的にポアソン方程式が満たされるので電荷密度と静電界の関係は正しく解かれていることになる。しかし、電流密度を電荷密度と同じ方法（各時間ステップにおいて粒子のモーメントを隣接する2つの格子点に配分することにより電流密度を計算）で求めた場合、電荷の連続の式が常に満たされているとは限らない。この場合、ある一定時間間隔でポアソン方程式を陽に解くことにより静電界を補正することが必要になる。

2.8 クーラン条件 (補足)

Maxwell 方程式を空間的に中心差分、時間的にリープフロッグで解き進めるには、上述にあるように格子間隔 Δx と時間ステップ Δt が以下の関係を満足する必要がある。

$$\Delta x > c\Delta t \quad (2.23)$$

ここで c は光速である。これをクーラン条件という。このクーラン条件は光速波動の数値分散関係から簡単に導かれる。今、 $A(x, t)$ を波数 k 周波数 ω を持つ波の成分と仮定する。

$$A(x, t) = A_0 \exp(ikx - i\omega t) \quad (2.24)$$

空間的な中心差分を考えると

$$\frac{\Delta A}{\Delta x} = \frac{A(x_0 + \Delta x/2, t) - A(x_0 - \Delta x/2, t)}{\Delta x} \quad (2.25)$$

$$= \frac{\exp(ik\Delta x/2) - \exp(-ik\Delta x/2)}{\Delta x} A(x_0, t) \quad (2.26)$$

$$= i \frac{\sin(k\Delta x/2)}{\Delta x/2} A(x_0, t) \quad (2.27)$$

この $\Delta A/\Delta x$ を空間変微分 $\partial A/\partial x$ と比較すると、波数 k は以下のように変数 K に置き換えて考えることができる。

$$K = \frac{\sin(k\Delta x/2)}{\Delta x/2} \quad (2.28)$$

同じように周波数 ω についても変数 Ω に以下のように置き換えることができる。

$$\Omega = \frac{\sin(\omega\Delta t/2)}{\Delta t/2} \quad (2.29)$$

光速モードの波動分散関係は $\omega^2 = c^2 k^2$ であり、 k と ω を上の K と Ω で置き換えると $\Omega^2 = c^2 K^2$ となる。最大波数 $k_{max} = \pi/\Delta x$ を考えた場合、

$$\sin^2(\omega\Delta t/2) = \left(\frac{c\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \quad (2.30)$$

という関係が得られる。もし $c\Delta t/\Delta x < 1$ なら、 ω は複素数となり数値不安定を示す。このため、最初に示したクーラン条件が満たされていないといけなくなる。 $c\Delta t/\Delta x = 1$ の場合、臨界安定である。

2.9 マクスウェル分布を与える方法(補足)

ここでは、 $0 < x < 1$ の一様乱数から、ガウス乱数を生成する方法の一例を述べる。粒子シミュレーションでは、初期の粒子の速度分布をマクスウェル分布で与えることが多いためである。

一様乱数 x

$$p(x)dx = \begin{cases} dx & 0 < x < 1 \\ 0 & \text{other} \end{cases} \quad (2.31)$$

を任意の関数で $y(x)$ に変換した場合、 $y(x)$ の確立密度 $P(y)$ は、

$$|P(y)dy| = |p(x)dx| \quad (2.32)$$

となり、

$$P(y) = p(x) \left| \frac{dx}{dy} \right| \quad (2.33)$$

と求まる。これを、2次元に拡張すれば、

$$P(y_1, y_2) dy_1 dy_2 = p(x_1, x_2) \left| \frac{\partial(x_1, x_2)}{\partial(y_1, y_2)} \right| dy_1 dy_2 \quad (2.34)$$

となる。 $|\dots|$ は、 x の y についてのヤコビアンである。

もし、 $P(y)$ がガウス分布を表す確立密度関数になれば、目的が達成される。

2次元のガウス分布は、

$$f(\mathbf{v}) = \frac{1}{\pi \langle v \rangle^2} \exp\left(-\frac{v_x^2 + v_y^2}{\langle v \rangle^2}\right) \quad (2.35)$$

であるから、式 (2.34) のヤコビアンが、

$$\left| \frac{\partial(x_1, x_2)}{\partial(y_1, y_2)} \right| = \left[\frac{1}{\sqrt{\pi} \langle v \rangle} \exp\left(-\frac{y_1^2}{\langle v \rangle^2}\right) \right] \left[\frac{1}{\sqrt{\pi} \langle v \rangle} \exp\left(-\frac{y_2^2}{\langle v \rangle^2}\right) \right] \quad (2.36)$$

となる変換関数があれば良い。

それは、

$$y_1 = V_x = \langle v \rangle \sqrt{-\ln(x_1)} \cos(2\pi x_2) \quad (2.37)$$

$$y_2 = V_y = \langle v \rangle \sqrt{-\ln(x_1)} \sin(2\pi x_2) \quad (2.38)$$

である。よって、2つの $(0, 1)$ の範囲の一様乱数 x_1, x_2 が求まれば、式 (2.37, 2.38) の変換により、1組の2次元ガウス分布が求まる。