



講座

プラズマ計算機シミュレーション入門 I

2. 粒子シミュレーションの基礎

内 藤 裕 志

(山口大学工学部)

Basic Theory of Particle Simulation

NAITOU Hiroshi

Department of Electrical and Electronic Engineering, Yamaguchi University, Ube 755-8611, Japan

(Received 25 March 1998)

Abstract

In a particle simulation, it is inevitable that there is a more limited number of particles than in a real plasma. Therefore, charged particles in particle simulation have an enhanced mass and charge with a fixed charge-to-mass ratio. These particles are called *superparticles*. In a plasma consisting of *superparticles*, collisional effects increase drastically from the real plasma. The use of finite-size particles in which *superparticles* have a distributed charge density profile, reduces the collisional effects to an acceptable level. The nondimensional equations for the particle simulation are derived from the equations of motion and the Maxwell equations. The method of charge (and current) assignment from the particle to the grid points is explained as well as the interpolation scheme of field quantities from the grid points to the particle position. The time integration scheme of the equations of motion is illustrated. Some recent topics related to particle simulations are presented.

Keywords:

particle simulation, finite-size particle, numerical grid, particle-in-cell (PIC) method, leap-frog method, superparticle, gyrokinetic model, δf -method

2.1 はじめに

プラズマとは自由に動きまわる電子とイオンの集合体である。極めて多数の荷電粒子が自分自身の作る電磁場によりお互いに影響を与えあって運動している。このプラズマの本質的に多体的特性が、プラズマの物理現象の理論的解析を非常に困難にしている。粒子シミュレーションでは、プラズマを荷電粒子の集合体として表し、荷電粒子の運動方程式と、荷電粒子が作る自己無撞着な電磁場を決定するマクスウェルの方程式を連立させて、系の時間発展を追跡する。原理的には、無限の速度と主記憶容量を持つコンピュータが存在すれば、プラズマの物理はすべて解明できる。しかしながら、現実の実験室のプラズマでは 1 cm^3 あたり、 10^{10-14} 個の荷電粒子が存

在するため、すべての荷電粒子をシミュレーションすることは不可能である。実際、現在最新鋭の超並列コンピュータを用いても最大 10^8 程度の粒子を取り扱うことが可能であるのみである。したがって、粒子シミュレーションで取り扱う粒子は、実際の粒子の電荷質量比を一定に保ったまま多数の粒子の電荷と質量を1つにまとめた超粒子 (*superparticle*) である。たとえば、上記の例では 1 cm^3 のプラズマをシミュレーションするには、 $10^2 \sim 10^6$ の粒子を合体して1個の超粒子を作ることになる。超粒子からなるプラズマは容易に想像できるように、非常に衝突の多い、熱平衡に近付きやすい性質をもち、プラズマのシミュレーションしたい物理現象をマスクしやすい。超粒子からなるプラズマの衝突現象を抑制する

author's e-mail: naitou@plasma.eee.yamaguchi-u.ac.jp

ため、点電荷 ZSP (Zero-Size Particle) を持つ超粒子ではなく、人為的に荷電粒子の電荷分布に広がりを持たせた FSP (Finite-Size Particle) [1,2] が用いられる。また粒子シミュレーションでは時間と空間の離散化が必要である。空間グリッドの利用法や、時間積分の手法についても知る必要がある。

本解説の構成は以下のとおりである。第2節では、ZSP からなる超粒子モデルの衝突効果について述べる。第3節では、FSP モデルの導入と衝突効果の抑制について説明する。また FSP からなるプラズマの基礎方程式についても紹介する。第4節では無次元化された基礎方程式の導出をする。第5節では空間グリッドの利用について議論する。運動方程式の時間積分の方法は第6節で示される。最後に、一次元シートモデルと二次元ロッドモデルの説明と、粒子シミュレーションの新しい流れでもあるデルタエフ法とジャイロ運動論粒子シミュレーションについて簡単に示す。

2.2 超粒子からなるプラズマの性質

超粒子からなるプラズマと実際のプラズマとの違いについて考察する。超粒子と実際のプラズマを作っている粒子の関係を Fig. 1 に示す。簡単のため、体積 $V = L_x L_y L_z$ を持つ有限の直方体領域で N_e 個の電子と N_i 個のイオン (イオンは1種類と仮定する) からなる系を考える。以下では荷電粒子の種類を添字 s ($s=e, i$) で表すことにする。このプラズマの s 種の荷電粒子の電荷と質量を q_s と m_s で表す。 N_s 個の荷電粒子からなる系を、 $N_s^{\text{SP}} = N_s / M$ ($M \gg 1$) 個の超粒子からなる系で置き換えた場合、系の物理的性質が、統計性が悪くなる以外に、どのように変化するかを考える。以下では超粒子からなるプラズマに関係する量は添字 SP を付けて表す。 M 個の粒子を集めて1個の超粒子が作られているので

$$q_s^{\text{SP}} = M q_s, \quad m_s^{\text{SP}} = M m_s, \quad (1)$$

である。またこのとき平均量であるが、密度 n_s と温度 T_s は

$$n_s^{\text{SP}} = n_s / M, \quad T_s^{\text{SP}} = M T_s, \quad (2)$$

になることに注意する。本解説では温度の単位としてエネルギー単位を用いることにする。プラズマに特有の時間スケールや空間スケールは M に依存しない。たとえば、プラズマ振動の角周波数 ω_{ps} 、熱速度 v_{ts} 、デバイ長 λ_{Ds} は、超粒子からなるプラズマでも実際のプラズマでも同じ値をとる。

$$\omega_{ps}^{\text{SP}} = \omega_{ps} = \sqrt{\frac{n_s q_s^2}{\epsilon_0 m_s}}, \quad (3)$$

$$v_{ts}^{\text{SP}} = v_{ts} = \sqrt{\frac{T_s}{m_s}}, \quad (4)$$

$$\lambda_{Ds}^{\text{SP}} = \lambda_{Ds} = \frac{v_{ts}}{\omega_{ps}} = \sqrt{\frac{\epsilon_0 T_s}{n_s q_s^2}}. \quad (5)$$

ここで ϵ_0 は真空中の誘電率を表す。

電荷質量比が一定であるため、電磁場が与えられている場合には、荷電粒子の運動は M に依存せず同じである。ただし、例えば $\mathbf{r}_{sj}$ の位置にある1個の超粒子がつくる静電ポテンシャル (クーロンポテンシャル) は

$$\phi^{\text{SP}}(\mathbf{r}) = \frac{q_s^{\text{SP}}}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{sj}|} = M \frac{q_s}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{sj}|}, \quad (6)$$

になる。これは、実際のプラズマの1個の荷電粒子がつくるポテンシャルの M 倍である。この粒子を含む微小領域を考える。この微小領域内には十分な数の荷電粒子があると仮定する。微小領域内の超粒子の密度は $1/M$ になるため、微小領域内の全電荷は (統計的ゆらぎを除

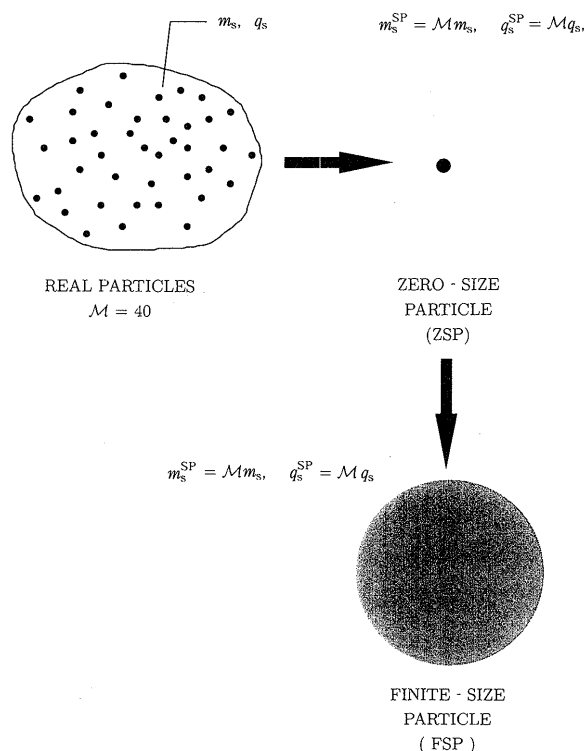


Fig. 1 The relation between the real particle and the superparticle. Two types of superparticle are ZSP (Zero-Size Particle) and FSP (Finite-Size Particle).

いて) 超粒子からなるプラズマでも実際のプラズマでもほとんど同じになる。また特定の超粒子の電荷が作るポテンシャルは(実際のプラズマと同様に), この超粒子近傍の多数の荷電粒子の密度分布が一様分布からすこし変化することにより遮蔽される(デバイ遮蔽)。この遮蔽の生じる特徴的な長さがデバイ長である。このためデバイ長より遠くはなれた荷電粒子間の2体の相互作用は無視できる。一方半径がデバイ長程度の微小領域内の粒子間の相互作用を考えると, 粒子はお互いのクーロンポテンシャルを感じて動くため, 超粒子間の近距離の相互作用(衝突)は実際のプラズマの M 倍になる。

ここで超粒子からなるプラズマに対して, s 種の超粒子の同種粒子間の衝突周波数 ν_s^{SP} を評価する。まず2個の粒子が衝突して大きく曲がる粒子間距離 b_s^{SP} (理論的には90度散乱の衝突パラメータと呼ばれる)を求める。荷電粒子の軌道が大きく曲がるためには, 一方の粒子の作るポテンシャルエネルギーと他方の粒子の運動エネルギーが同程度である必要がある。

$$\frac{(q_s^{\text{SP}})^2}{4\pi\epsilon_0 b_s^{\text{SP}}} \sim m_s^{\text{SP}} v_{\text{ts}}^2 = T_s^{\text{SP}}. \quad (7)$$

ここで運動エネルギーを熱速度を用いて評価した。(7)式より b_s^{SP} は

$$\begin{aligned} b_s^{\text{SP}} &\sim \frac{(q_s^{\text{SP}})^2}{4\pi\epsilon_0 T_s^{\text{SP}}} = \frac{1}{4\pi n_s^{\text{SP}} \lambda_{\text{Ds}}^3} \lambda_{\text{Ds}} \\ &= M \frac{1}{4\pi n_s \lambda_{\text{Ds}}^3} \lambda_{\text{Ds}} = M b_s, \end{aligned} \quad (8)$$

となって, 実際のプラズマの b_s の M 倍になる。実際のプラズマでは, $n_s \lambda_{\text{Ds}}^3 \gg 1$ (たとえば核融合プラズマでは $n_s \lambda_{\text{Ds}}^3 \sim 10^8$)であるから, 上式より $b_s \ll \lambda_{\text{Ds}}$ であることに注意する。超粒子系では $n_s^{\text{SP}} \lambda_{\text{Ds}}^3 \gg 1$ であるものの, $n_s^{\text{SP}} \lambda_{\text{Ds}}^3$ は数個から数十個の値をとる。散乱断面積 σ_s^{SP} は b_s^{SP} を用いて

$$\sigma_s^{\text{SP}} \sim \pi (b_s^{\text{SP}})^2 = M^2 \pi b_s^2, \quad (9)$$

で表される。以上より衝突周波数 ν_s^{SP} は

$$\begin{aligned} \nu_s^{\text{SP}} &\sim n_s^{\text{SP}} \sigma_s^{\text{SP}} v_{\text{ts}} = \frac{\omega_{\text{ps}}}{16\pi n_s^{\text{SP}} \lambda_{\text{Ds}}^3} \\ &= M \frac{\omega_{\text{ps}}}{16\pi n_s \lambda_{\text{Ds}}^3} = M \nu_s, \end{aligned} \quad (10)$$

になる。(実際のプラズマの衝突では, 衝突パラメータが b_s からデバイ長の範囲の粒子が衝突に寄与する。衝

突のなかで支配的なのは90度散乱よりも小さな小角度散乱である。本解説では, オータの評価をしているので, この違いは無視して記述している。)

超粒子系での電子に対する衝突周波数は

$$\frac{\nu_e^{\text{SP}}}{\omega_{\text{pe}}} \sim \frac{1}{16\pi n_e^{\text{SP}} \lambda_{\text{De}}^3} \sim M \frac{1}{16\pi n_e \lambda_{\text{De}}^3}, \quad (11)$$

になる。もし $n_e^{\text{SP}} \lambda_{\text{De}}^3$ が数個から数十個の値を持つとすると, プラズマ振動数近傍の波動のみがかりうじてシミュレーション可能であり, イオンの関係するより低い周波数の波動現象は超粒子の衝突効果によりマスクされてしまうことになる。また系が熱平衡にあるときの電磁場のゆらぎの大きさも, 超粒子系では, 温度が M 倍になっていることと対応して, 実際のプラズマの M 倍になる。これらの超粒子プラズマ特有の現象がシミュレーションしたい物理現象をマスクしてしまわないように様々な手法が開発されてきた。その中の一つがFSPの利用である。

2.3 有限の電荷の広がりを持った超粒子: FSP

ここまで述べた超粒子は点電荷を持つZSPである。たとえばZSPに対して s 種の粒子の j 番目の超粒子の電荷密度分布は次式で表される。

$$q_s^{\text{SP}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{sj}(t)). \quad (12)$$

ここで $\delta(\mathbf{r})$ は三次元空間でのデルタ関数を表していて, 一次元のデルタ関数を用いて表すと

$$\delta(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z), \quad (13)$$

になる。デルタ関数は空間積分に関して以下の性質を持つことがよく知られている。

$$\int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r} = 1, \quad \int F(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r} = F(\mathbf{r}'). \quad (14)$$

ただし上式で積分区間は $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ を含むとする。 $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ を含まない場合は積分値はゼロになる。また次の性質もよく知られている。

$$\delta(\alpha \mathbf{r}) = \frac{1}{|\alpha|^3} \delta(\mathbf{r}). \quad (15)$$

なお $\delta(\mathbf{r})$ は体積積分して無次元量になるため, 長さの3乗の逆数の次元を持つことに注意する。ZSPは粒子の中心でクーロンポテンシャルが発散することが衝突効果に大きく寄与している。デバイ長より長波長の物理現象を正しくシミュレーションしたい場合が普通であるか

ら、近距離のクーロンポテンシャルを人為的に小さくして、超粒子系の衝突効果を小さくすることが可能である。この目的のため、荷電粒子を有限の広がりを持つ粒子、FSP、として扱う。ZSP と FSP の違いは Fig. 1 に図示されている。FSP の電荷密度分布はシェイプ・ファクタ (shape factor) $S(\mathbf{r})$ を用いて表すと、

$$q_s^{\text{SP}} S(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{sj}(t)), \quad (16)$$

になる。 $S(\mathbf{r})$ は原点に関して球対称であり、全空間で体積積分すると、

$$\int S(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1, \quad (17)$$

を満たすように定義する。通常シェイプ・ファクタにはガウス型の分布、

$$S(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi a)^3} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}|^2}{2a^2}\right), \quad (18)$$

が用いられる。ここで a は FSP の特徴的な大きさを表している。 a を無限に小さくすると $S(\mathbf{r})$ は $\delta(\mathbf{r})$ になることに注意する。(FSP モデルで $a=0$ の極限が ZSP モデルである。) FSP の電荷は分布しているのに対して、質量は中心に集中している。また FSP の電荷分布は固定されていて、回転運動や振動運動はしない。FSP は互いに電荷分布が重なるようにして交差することが可能である。電荷分布が有限の広がりを持つことにより、クーロンポテンシャルの発散がなくなり、電荷中心近傍でのポテンシャルの値は有限の値まで減少する。電荷中心近傍を離れるとポテンシャルの値はクーロンポテンシャルの値と同じになる。このことにより、遠距離での現象を変化させないで、粒子間の近距離での衝突効果が大きく減少する。また FSP が感じる電荷分布で平均化された実効電場 $\mathbf{E}^*$ と実効磁場 $\mathbf{B}^*$ は

$$\mathbf{E}^*(\mathbf{r}, t) = \int \mathbf{E}(\mathbf{r}', t) S(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) d\mathbf{r}', \quad (19)$$

$$\mathbf{B}^*(\mathbf{r}, t) = \int \mathbf{B}(\mathbf{r}', t) S(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) d\mathbf{r}', \quad (20)$$

である。FSP に働く実効的な電場と磁場は FSP の電荷分布で平均されるため、より衝突効果が減少する。FSP の運動方程式(ニュートン・ローレンツの式)は次式で表される。

$$\frac{d\mathbf{r}_{sj}(t)}{dt} = \mathbf{v}_{sj}(t), \quad (21)$$

$$m_s^{\text{SP}} \frac{d\mathbf{v}_{sj}(t)}{dt} = q_s^{\text{SP}} [\mathbf{E}^*(\mathbf{r}_{sj}(t), t) + \mathbf{v}_{sj}(t) \times \mathbf{B}^*(\mathbf{r}_{sj}(t), t)]. \quad (22)$$

運動方程式とマクスウェルの方程式からなる系を完成するためには、マクスウェルの方程式中の電荷密度 ρ と電流密度 $\mathbf{J}$ を

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{s=e,i} q_s^{\text{SP}} \sum_{j=1}^{N_s^{\text{SP}}} S(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{sj}(t)), \quad (23)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \sum_{s=e,i} q_s^{\text{SP}} \sum_{j=1}^{N_s^{\text{SP}}} \mathbf{v}_{sj} S(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{sj}(t)), \quad (24)$$

で表す。上式の ρ と $\mathbf{J}$ は荷電粒子の微視的な位置の情報を含むため、通常の(巨視的)電荷密度と(巨視的)電流密度と区別して、それぞれ、微視的電荷密度と微視的電流密度と呼ばれる。

上式とマクスウェル方程式が FSP からなるプラズマの基礎方程式系を示している。ZSP からなる実際のプラズマの基礎方程式系からの変更点が微小であるため、FSP からなるプラズマの物理は理論的にもシミュレーション的にも比較的よく研究されている[1-4]。たとえば FSP の半径 a より十分長波長の波動の分散等は実際のプラズマと同じになることがよく知られている。FSP からなるプラズマで抑圧されるのは FSP の半径 a より小さい波長の現象のみである。通常粒子間の 2 体衝突の効果はデバイ長より短い距離で働くため、 a をデバイ長と同程度にとると、デバイ長より短い波長の物理現象が変化するのみで、デバイ長より長波長の物理現象は変化しない。この性質は、プラズマ中の波動現象をシミュレーションするには好都合である。ただし以下のことに注意しなければならない。運動している 1 個の超粒子に注目すると、この超粒子の速度が遅い場合は、近傍のデバイ球内にある他の超粒子が電荷を中和する。ただし、超粒子の速度が速くなると、この超粒子近傍の電荷分布は超粒子の中心に対して非対称になり、長波長の波を励起する。逆に、この粒子は波を励起する反作用として運動量やエネルギーに変化を生じる。この効果を動的遮蔽効果と呼ぶ。いわばこの長波長の衝突効果は FSP の利用によっても抑制することはできない[4,5]。

2.4 無次元化された基礎方程式

一般にシミュレーションでは、規格化して無次元化された方程式系を用いる。また無次元化された方程式系は単位系に依存しない、 e , m_e , ϵ_0 , μ_0 等の値をプログラム

に書き込む必要がない，各種パラメータに対するスケールリング則が導出しやすい等の利点がある．

ここでは，時間と長さに対して以下のように規格化を行う．

$$t = \tilde{t} \omega_{pe}^{-1}, \quad \mathbf{r} = \tilde{\mathbf{r}} \Delta, \quad (25)$$

ここで () のついた量は規格化された物理量を表している．たとえば長さを c/ω_{pe} で規格化することも可能であるが，ここでは Δ として，あとで定義される空間格子の格子間の間隔を用いた．自明であるが，このとき速度は

$$\mathbf{v} = \tilde{\mathbf{v}} \Delta \omega_{pe}, \quad (26)$$

で規格化される．また規格化された式に電荷，質量等の物理量が入らないように注意すると電場 $\mathbf{E}$ ，磁場 $\mathbf{B}$ と静電ポテンシャル ϕ は

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \tilde{\mathbf{E}} \frac{m_e \Delta \omega_{pe}^2}{e}, \quad \mathbf{B} = \tilde{\mathbf{B}} \frac{m_e \omega_{pe}}{e}, \\ \phi &= \tilde{\phi} \frac{m_e \Delta^2 \omega_{pe}^2}{e}, \end{aligned} \quad (27)$$

で，また電荷密度 ρ と電流密度 $\mathbf{J}$ は

$$\rho = en_e \tilde{\rho}, \quad \mathbf{J} = en_e \Delta \omega_{pe} \tilde{\mathbf{J}},$$

で規格化される．

無次元化された運動方程式は以下のようにになる．

$$\frac{d\tilde{\mathbf{r}}_{sj}(\tilde{t})}{d\tilde{t}} = \tilde{\mathbf{v}}_{sj}(\tilde{t}), \quad (29)$$

$$\frac{d\tilde{\mathbf{v}}_{sj}(\tilde{t})}{d\tilde{t}} = \frac{Q_s}{M_s} \left[\tilde{\mathbf{E}}^* \{ \tilde{\mathbf{r}}_{sj}^*(\tilde{t}), \tilde{t} \} + \tilde{\mathbf{v}}_{sj}(\tilde{t}) \times \tilde{\mathbf{B}}^* \{ \tilde{\mathbf{r}}_{sj}(\tilde{t}), \tilde{t} \} \right] \quad (30)$$

ここで $Q_s = q_s/e$ ($Q_e = -1$, $Q_i = q_i/e$), $M_s = m_s/m_e$ ($M_e = 1$, $M_i = m_i/m_e$) である．

また規格化された電荷密度と電流密度は次式で表される．

$$\tilde{\rho}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) = \frac{\tilde{L}_x \tilde{L}_y \tilde{L}_z}{N_e^{SP}} \sum_{s=e,i} Q_s \sum_{j=1}^{N_s^{SP}} \tilde{S} \{ \tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{r}}_{sj}(\tilde{t}) \}, \quad (31)$$

$$\tilde{\mathbf{J}}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) = \frac{\tilde{L}_x \tilde{L}_y \tilde{L}_z}{N_e^{SP}} \sum_{s=e,i} Q_s \sum_{j=1}^{N_s^{SP}} \tilde{\mathbf{v}}_{sj}(\tilde{t}) \tilde{S} \{ \tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{r}}_{sj}(\tilde{t}) \}. \quad (32)$$

基礎方程式にシステムサイズおよび粒子数が入っているのは(31)式と(32)式のみである．(31)，(32)式の導出には

$$\begin{aligned} q_s^{SP} &= \frac{N_s}{N_s^{SP}} q_s = \frac{n_s L_x L_y L_z}{N_s^{SP}} q_s \\ &= n_s q_s \Delta^3 \frac{\tilde{L}_x \tilde{L}_y \tilde{L}_z}{N_s^{SP}} = n_e e \Delta^3 \frac{\tilde{L}_x \tilde{L}_y \tilde{L}_z}{N_s^{SP}} Q_s, \end{aligned} \quad (33)$$

および

$$S \{ \mathbf{r} - \mathbf{r}_{sj}(t) \} = \frac{1}{\Delta^3} \tilde{S} \{ \tilde{\mathbf{r}} - \tilde{\mathbf{r}}_{sj}(\tilde{t}) \}, \quad (34)$$

を用いた．

無次元化されたマクスウェル方程式は以下のようになる．

$$\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{E}} = \tilde{\rho}, \quad (35)$$

$$\tilde{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{B}} = 0, \quad (36)$$

$$\tilde{\nabla} \times \tilde{\mathbf{E}} = - \frac{\partial \tilde{\mathbf{B}}}{\partial \tilde{t}}, \quad (37)$$

$$\tilde{\nabla} \times \tilde{\mathbf{B}} = \frac{1}{\tilde{c}^2} \left(\tilde{\mathbf{J}} + \frac{\partial \tilde{\mathbf{E}}}{\partial \tilde{t}} \right), \quad (38)$$

ここで

$$\tilde{c} = \frac{c}{\omega_{pe} \Delta}, \quad (39)$$

は，グリッド幅で規格化された電子の無衝突スキン長を表す．

静電モデルの場合はマクスウェル方程式の一部として(35)式のみを用いる．ただし(35)式を直接解かず，静電ポテンシャルを用いてポアソン方程式，

$$\tilde{\nabla}^2 \tilde{\phi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) = -\tilde{\rho}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}), \quad (40)$$

を解き，

$$\tilde{\mathbf{E}}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}) = -\tilde{\nabla} \tilde{\phi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}), \quad (41)$$

により静電場を求める場合が多い．

2.5 粒子と空間グリッド

実際のシミュレーションでは，電磁場量を，空間グリッド点でのみ計算する．空間グリッドの幅を Δ で表す．すべての方向のグリッド幅は等しいとする．電磁場はグリッド点のみで計算されるため，電磁場をマクスウェル方程式から求めるためには，グリッド点での電荷密度と電流密度を計算する必要がある．このため個々の粒子が持つ電荷および電流を空間グリッド点に分配する．また個々の粒子の位置での電磁場の値は粒子近傍のグリッド

点での電磁場の値を内挿して求める。この分配と内挿の手法は、粒子自身が作る電磁場が自分自身に人為的な力を働かせないように設計しなければならない。このための標準的手法が PIC (particle-in-cell) 法[6]と呼ばれる。セル (cell) とはグリッドに囲まれた単位領域を表す。グリッドを用いることにより、グリッド幅以下の短波長の現象がマスクされることになり、グリッド幅程度の実効的な広がりをもつ FSP を用いた場合と同等の効果がある。

粒子の電荷および電流のグリッド点への振り分けと、グリッド点の電場および磁場の粒子の位置への内挿の手法は幾つか存在する。しかし、粒子シミュレーションでは、限られた計算時間内で、できるかぎり多数の粒子を使用し、統計性を増すことが望ましいので、線形補間に対応する手法が多用される。高次の補間法に対応する手法は目的により使用される。以下線形補間に対応する手法について述べる。簡単のため二次元のシステムで説明する。粒子の位置が

$$l < \tilde{x} < l+1, \quad m < \tilde{y} < m+1, \quad (42)$$

にあるとする。またここで、 $\tilde{x}_{sj} = l + \delta\tilde{x}$, $\tilde{y}_{sj} = m + \delta\tilde{y}$ とする。粒子の位置での電荷を、粒子が存在するセルの端にある4個のグリッド点に、分割して振り分ける手法を Fig. 2 に示す。また粒子が感じる電場のグリッド点の電場からの内挿法を Fig. 3 に示す。粒子分割と内挿の手法は、グリッドへのまたはグリッドからの重み (S_{11} , S_{12} , S_{21} , S_{22}) について同じになっている。この場合のみ粒子に対して自分が自分に仕事をすることが避けられることが証明されている。

場の量の具体的な求め方はここでは省略するが、静電コードでは

$$\Delta \lesssim \lambda_{De}, \quad (43)$$

にすると、数値的な不安定は生じない[7]。

2.6 運動方程式の時間積分

運動方程式の時間積分は、時間的に離散化した方程式を用いて実行される。時間ステップの間隔を $\Delta\tilde{t}$ とする。荷電粒子の位置と速度を $\Delta\tilde{t}/2$ だけ異なった時間で定義しておくと、一次のルンゲクッタ法と同じ計算量でありながら、二次のルンゲクッタ法と同等の精度での時間積分が可能である。これは、時間微分を中心差分で近似したことになっている。この手法を蛙飛び法 (leap-frog method) と呼ぶ。

時間的に差分された運動方程式は以下に示される。

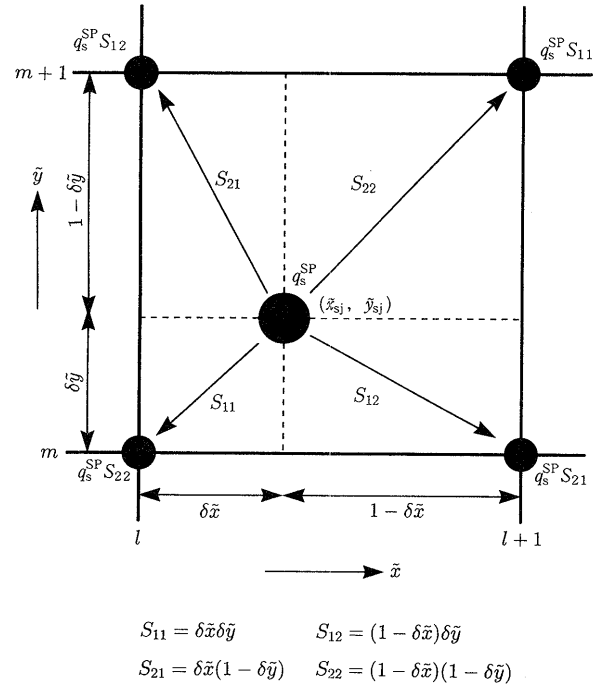


Fig. 2 The method of the charge assignment to the grid points.

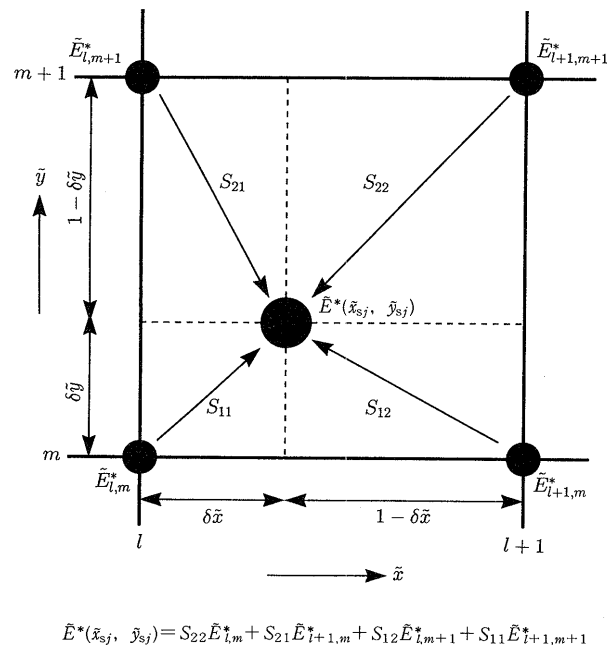


Fig. 3 The interpolation method of the electric field from the grid points to the particle position.

$$\tilde{\mathbf{v}}_{k+1/2} = \tilde{\mathbf{v}}_{k-1/2} + \frac{Q_s}{M_s} \left[\tilde{\mathbf{E}}_k^* + \frac{\tilde{\mathbf{v}}_{k+1/2} + \tilde{\mathbf{v}}_{k-1/2}}{2} \times \tilde{\mathbf{B}}_k^* \right] \Delta \tilde{t}, \quad (44)$$

$$\tilde{\mathbf{r}}_{k+1} = \tilde{\mathbf{r}}_k + \tilde{\mathbf{v}}_{k+1/2} \Delta \tilde{t}. \quad (45)$$

ここで, $\tilde{\mathbf{r}}_k = \tilde{\mathbf{r}}_{sj}(k\Delta\tilde{t})$, $\tilde{\mathbf{v}}_k = \tilde{\mathbf{v}}_{sj}(k\Delta\tilde{t})$ であり, また $\tilde{\mathbf{E}}_k^* = \tilde{\mathbf{E}}_k^*(\tilde{\mathbf{r}}_{sj}(k\Delta\tilde{t}), k\Delta\tilde{t})$, $\tilde{\mathbf{B}}_k^* = \tilde{\mathbf{B}}_k^*(\tilde{\mathbf{r}}_{sj}(k\Delta\tilde{t}), k\Delta\tilde{t})$ である. 式(44)では, 両辺に $\tilde{\mathbf{v}}_{k+1/2}$ を含むため, $\tilde{\mathbf{v}}_{k+1/2}$ に対して解を求めておく必要がある. ここでは文献[8]による方法を紹介する. まず, 電場による加速を

$$\tilde{\mathbf{v}}^- = \tilde{\mathbf{v}}_{k-1/2} + \frac{Q_s}{2M_s} \tilde{\mathbf{E}}_k^* \Delta \tilde{t}, \quad (46)$$

$$\tilde{\mathbf{v}}_{k+1/2} = \tilde{\mathbf{v}}^+ + \frac{Q_s}{2M_s} \tilde{\mathbf{E}}_k^* \Delta \tilde{t}, \quad (47)$$

により分離すると磁場による加速のみを表す次式を得る.

$$\tilde{\mathbf{v}}^+ - \tilde{\mathbf{v}}^- = (\tilde{\mathbf{v}}^+ + \tilde{\mathbf{v}}^-) \times \frac{Q_s}{2M_s} \tilde{\mathbf{B}}_k^* \Delta \tilde{t}. \quad (48)$$

この式の両辺でそれぞれ $(\tilde{\mathbf{v}}^+ + \tilde{\mathbf{v}}^-)$ との内積をとると $\tilde{v}^+ = \tilde{v}^-$ を得る. ただし $\tilde{v}^+$, $\tilde{v}^-$ はベクトル $\tilde{\mathbf{v}}^+$, $\tilde{\mathbf{v}}^-$ の大きさを表す. これは, 磁場は荷電粒子に仕事をしないというニュートン・ローレンツの式の性質を有限の Δt に対しても保証している. (たとえばルンゲクッタ法による時間積分では, この性質は Δt がゼロの極限でのみ保証される.) (48)式を次のように書き換える.

$$\tilde{\mathbf{v}}^+ - \tilde{\mathbf{v}}^- = (\tilde{\mathbf{v}}^+ - \tilde{\mathbf{v}}^-) \times \frac{Q_s}{2M_s} \tilde{\mathbf{B}}_k^* \Delta \tilde{t} + \tilde{\mathbf{v}}^- \times \frac{Q_s}{M_s} \tilde{\mathbf{B}}_k^* \Delta \tilde{t}. \quad (49)$$

ベクトル $\frac{Q_s}{2M_s} \tilde{\mathbf{B}}_k^* \Delta \tilde{t}$ と (49) 式両辺とのベクトル積をそれぞれとると,

$$\begin{aligned} (\tilde{\mathbf{v}}^+ - \tilde{\mathbf{v}}^-) \times \frac{Q_s}{2M_s} \tilde{\mathbf{B}}_k^* \Delta \tilde{t} &= \left[(\tilde{\mathbf{v}}^+ - \tilde{\mathbf{v}}^-) \times \frac{Q_s}{2M_s} \tilde{\mathbf{B}}_k^* \Delta \tilde{t} \right] \times \frac{Q_s}{2M_s} \tilde{\mathbf{B}}_k^* \Delta \tilde{t} \\ &+ \left(\tilde{\mathbf{v}}^- \times \frac{Q_s}{2M_s} \tilde{\mathbf{B}}_k^* \Delta \tilde{t} \right) \times \frac{Q_s}{M_s} \tilde{\mathbf{B}}_k^* \Delta \tilde{t}, \end{aligned} \quad (50)$$

になる. (49)式と(50)式の和をとり, ベクトル三重積を

展開すると, 次式を得る.

$$\begin{aligned} &\left[1 + \left(\frac{Q_s}{2M_s} \tilde{\mathbf{B}}_k^* \Delta \tilde{t} \right)^2 \right] (\tilde{\mathbf{v}}^+ - \tilde{\mathbf{v}}^-) \\ &= \left(\tilde{\mathbf{v}}^- + \tilde{\mathbf{v}}^- \times \frac{Q_s}{2M_s} \tilde{\mathbf{B}}_k^* \Delta \tilde{t} \right) \times \frac{Q_s}{M_s} \tilde{\mathbf{B}}_k^* \Delta \tilde{t} \end{aligned} \quad (51)$$

プログラムの作成の際に便利のように(51)式を書き換えると以下ようになる.

$$\tilde{\mathbf{v}}' = \tilde{\mathbf{v}}^- + \tilde{\mathbf{v}}^- \times \frac{Q_s}{2M_s} \tilde{\mathbf{B}}_k^* \Delta \tilde{t}, \quad (52)$$

$$\tilde{\mathbf{v}}^+ = \tilde{\mathbf{v}}^- + \frac{1}{1 + \left(\frac{Q_s}{2M_s} \tilde{\mathbf{B}}_k^* \Delta \tilde{t} \right)^2} \tilde{\mathbf{v}}' \times \frac{Q_s}{M_s} \tilde{\mathbf{B}}_k^* \Delta \tilde{t}. \quad (53)$$

式(46), (52), (53), (47)の順に従って, 粒子の速度を $\Delta \tilde{t}$ だけ進める. このあとで, 式(45)により粒子の位置を $\Delta \tilde{t}$ だけ進める. 粒子の位置と速度の初期値を設定すればシミュレーションを開始できる. ただし初期値として, $t=0$ の位置と $t=-\frac{1}{2}\Delta t$ の速度を与える. たとえば一様で熱平衡にあるプラズマでは粒子の位置は空間的に一様に, 速度はマクスウェル分布に従うように乱数を用いて与えられる. 磁場中の非一様プラズマの粒子の初期値設定の方法は文献[9]に示されている. また磁場中のプラズマに対して, 時間積分を実行した時, システム境界に衝突する荷電粒子の取り扱い方法については文献[10]に示されている.

時間ステップ幅は, 数値的な不安定性を避けるためには,

$$\Delta t \leq \omega_{pe}^{-1}, \quad (54)$$

にとればよい[11]. 時間積分の精度まで考えると, 通常 $\Delta t = 0.2\omega_{pe}^{-1}$ が用いられる. また磁場中の荷電粒子のジャイロ運動に伴う物理をシミュレーションするためには Δt をジャイロ周期よりも十分小さくしておくことも必要である.

2.7 おわりに

以上, 粒子シミュレーションの要点を解説した. とくに空間グリッドの効果を無視した場合の理論的考え方について詳しく説明した. 説明の都合上, 三次元モデルを中心に解説した. また電磁場の数値解法については省略した. 粒子シミュレーションの詳細は, 教科書[12-15]と本講座の第3-5章を参照して下さい. 最後に一次元モデル, 二次元モデルと粒子シミュレーションの最近の流行でもある, デルタエフ (δf) 法[16,17]とジャイロ運

動論モデル[18-21]についての簡単な説明を示す。

一次元シートモデル

物理現象が一次元でモデル化される場合は、一次元モデルを用いてシミュレーションするのが経済的である。物理量が x 方向のみに依存して変化する場合のシミュレーションモデルのイメージを Fig. 4 に示す。この例では、個々の粒子の形が y, z 方向に無限の広さをもつシートで表される。通常、粒子がシートの形状を持つことを意識する必要はないが、粒子間の衝突の効果を考える場合には個々の荷電粒子の作る静電ポテンシャルがシート状の電荷に起因することに注意する必要がある。

二次元ロッドモデル

物理現象が二次元でモデル化される場合は二次元モデルを用いてシミュレーションするのが経済的である。物理量が x, y 面内でのみ変化する場合のシミュレーションモデルのイメージを Fig. 5 に示す。この例では、個々の粒子の形が z 方向に無限の長さをもつロッドで表される。通常、粒子がロッドの形状を持つことを意識する必要はないが、粒子間の衝突の効果を考える場合には個々の荷電粒子の作る静電ポテンシャルがロッド状の電荷に起因することに注意する必要がある。一次元と二次元モデルの衝突効果は当然であるが三次元モデルとは異なった性質を持つ。

デルタエフ法

粒子を用いることによる熱雑音を低減する手法として δf 法がある。 δf 法では粒子の分布関数を熱平衡分布(f_0)と熱平衡分布からのずれ(δf)にわけて表し、個々の粒子に重み w_{sj} を与え、粒子の軌道を追跡するのに加えて、粒子の軌道に沿った w_{sj} の時間変化を解くことにより、 δf の変化を追跡する。たとえば個々の粒子の電荷は q_s^{SP} ではなく、 $q_s^{\text{SP}} w_{sj}$ ($w_{sj} \ll 1$) になるため、個々の粒子(ここではマーカーと呼ばれる)の作るクーロンポテンシャルは非常に小さくなり、衝突効果が劇的に減少する。 δf 法は、分布関数の平衡分布からのずれが小さい場合には、非常に有用なノイズ低減の手法である。通常の粒子シミュレーションがプラズマを多体系として直接解いているのに対して、 δf 法によるシミュレーションはブラソフ方程式のマーカーを用いた解法と見なすこともできる。なお、 δf 法を用いたシミュレーションでは粒子の速度分布や空間分布の初期値を決定する乱数としてビット反転数(bit-reversed number) [22]がよく用いられる。

ジャイロ運動論モデル

とくにトカマク等の低ベータ装置をシミュレーションする場合に用いられる。磁気圏プラズマのシミュレーション

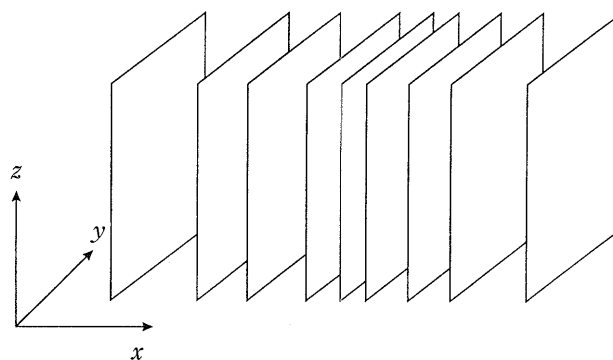


Fig. 4 Schematic diagram of the one-dimensional sheet model.

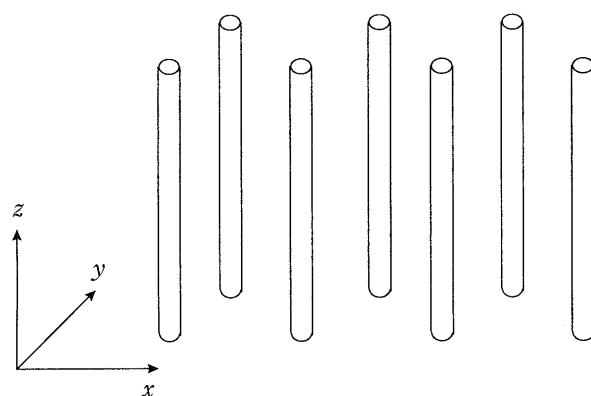


Fig. 5 Schematic diagram of the two-dimensional rod model.

にも有用である。荷電粒子の運動方程式として、荷電粒子の磁場中のジャイロ運動の周期で平均した方程式を用いる。マクスウェル方程式の電荷密度と電流密度の評価にもジャイロ平均が用いられる。理論的にイオンのサイクロトロン運動の周波数以上の物理現象を取り除いた方程式系を基本式とするため、普通の粒子シミュレーションでの時間差分幅や空間グリッド幅の制限がなくなるため、より長い時間・空間スケールの現象のシミュレーションが可能である。通常 δf 法と併用される。またトカマクプラズマ全体をシミュレーションする場合は、非常に大規模計算になるので、並列コンピュータを用いて計算される[21, 23-25]。

謝辞

本稿をまとめるに際し、ご助言、ご協力をいただきました、東北大学工学部の石黒静児博士に感謝いたします。山口大学工学部の学生である小林俊満氏に図形の作成について感謝します。山口大学工学部の福政 修教授、核融合科学研究所の佐藤哲也教授、上村鉄雄教授、日本原子

力研究所の安積正史博士, 平山俊雄博士, 徳田伸二博士のシミュレーション研究に対する長期にわたるご支援に対して感謝します。

参考文献

- [1] A.B. Langdon and C.K. Birdsall, *Phys. Fluids* **13**, 2115 (1970).
- [2] H. Okuda and C.K. Birdsall, *Phys. Fluids* **13**, 2123 (1970).
- [3] H. Okuda, *Phys. Fluids* **15**, 1268 (1972).
- [4] Y. Matsuda and H. Okuda, *Phys. Fluids* **18**, 1740 (1975).
- [5] H. Abe, H. Naitou and R. Itatani, *J. Phys. Soc. Jpn.* **41**, 1364 (1976).
- [6] R.L. Morse and C.W. Nielson, *Phys. Fluids* **12**, 2418 (1969).
- [7] A.B. Langdon, *J. Comp. Phys.* **6**, 247 (1970).
- [8] J.P. Boris, *Proc. 4th Conf. Num. Sim. Plasmas*, Naval Res. Lab., Wash., D.C., 3-67, 2-3 November (1970).
- [9] H. Naitou, S. Tokuda and T. Kamimura, *J. Comp. Phys.* **38**, 265 (1980).
- [10] H. Naitou, S. Tokuda and T. Kamimura, *J. Comp. Phys.* **33**, 86 (1979).
- [11] A.B. Langdon, *J. Comp. Phys.* **30**, 202 (1979).
- [12] R. Hockney and J. Eastwood, *Computer Simulation Using Particles*, (McGraw-Hill, New York, 1981).
- [13] C.K. Birdsall and A.B. Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation*, (McGraw-Hill, New York, 1985) and (Adam Hilger, Bristol, Philadelphia and New York, 1991).
- [14] T. Tajima, *Computational Plasma Physics: With Application to Fusion and Astrophysics*, (Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Redwood City, 1989).
- [15] 田中基彦, 西川恭治: 「パリティ物理学コース: 高温プラズマの物理学」, 牧 次郎, 長岡洋介, 大槻義彦編 (丸善株式会社, 東京, 1991) 12章, 13章.
- [16] S.E. Parker and W.W. Lee, *Phys. Fluids B* **5**, 77 (1993).
- [17] M. Kotschenruether, *Bull. Am. Phys. Soc.* **34**, 2107 (1988).
- [18] W.W. Lee, *J. Comp. Phys.* **72**, 243 (1987).
- [19] T.S. Hahm, W.W. Lee and A. Brizard, *Phys. Fluids* **31**, 1940 (1988).
- [20] H. Naitou, K. Tsuda, W.W. Lee and R.D. Sydora, *Physics of Plasmas* **2**, 4257 (1995).
- [21] H. Naitou, T. Sonoda, S. Tokuda and V.K. Decyk, *J. Plasma Fusion Res.* **72**, 259 (1996).
- [22] J.M. Hammersley and D.C. Handscomb, *Monte Carlo Methods* (Methuen Co. Ltd., London, 1964) 133.
- [23] R.D. Sydora, *Phys. Fluids B* **2**, 1455 (1990).
- [24] S.E. Parker, W.W. Lee and R.A. Santoro, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2042 (1993).
- [25] H. Naitou and S. Tokuda, *J. Plasma Fusion Res.* **72**, 737 (1996) [*in Japanese*].