

プラズマ粒子シミュレーションで使用する境界条件

国立極地研究所 岡田雅樹

プラズマのシミュレーションは一般に、偏微分方程式の初期値境界値問題を数値的に解くことに相当する。物理的に正しいシミュレーションを行うことができるかどうかは、これらの初期値と境界条件によって決まるといっても過言ではない。本章では、プラズマ粒子シミュレーションにおいて使用される境界条件とその物理的意味について述べる。

1. 概要

シミュレーションでは、無限の物理領域の一部を計算機上に再現するためになんらかの仮定を必要とする。例えば、一様無限の空間内に周期性のみを持つ物理現象を再現する場合には、周期境界条件を使用することができる。あるいは、空間内に局所的に擾乱の発生領域が存在し、その影響が空間的に拡散または放射されるような現象をシミュレートする場合には、擾乱の発生領域を取り囲むように擾乱の吸収領域を設ける方法が有効である。また、宇宙飛翔体等をシミュレーション空間内にモデル化するためには、導体または誘電体をシステム内に置く必要がある。本節では、これらの境界条件を与える手法について詳述する。

2. 周期境界条件

一様無限の空間を再現する手法として最も一般的な手法が、周期境界条件である。システム長 L の 1 次元電磁粒子コードの場合、全ての物理量 $F(x)$ に対して、 $F(x=L)=F(0)$ が成り立つことを意味する。これは、左右のシステム境界を越えて伝播する波動は、反対側のシステム境界からシステム内に伝播することを意味している。このことを電位 にあてはめると、システムの両端における電位 は同じでなければならない、ガウスの発散定理からシステム内の全電荷は零でなければならないことになる。さらにシミュレーションの全ての時間ステップにおいてこの条件が満たされるために、ひとつの境界を越えたプラズマ粒子は、そのまま速度を変えことなく反対側の境界から注入されなければならない。このような周期境界条件を与えることによって、実空間においてシステム長 L を周期とする現象をシミュレーション空間に再現することが可能になる。この周期性によってポアソン方程式の解法として高速な FFT 法が有効である。

3. 拘束プラズマ境界条件

実験室プラズマ等の有限空間に閉じ込められたプラズマ環境を再現するためには、 $F(x=L) \neq F(x=0)$ である拘束プラズマ境界条件を使用する必要がある。ここで紹介する拘束

プラズマ境界条件は、シミュレーション空間以外の領域はプラズマの存在しない自由空間である状況に似ている。つまり、放射電磁波が境界に達するとシステムには戻らず、シミュレーション空間から取り除かれ、外部からレーザー等の電磁波を入射することも可能となる。シミュレーション空間外($x < 0, L < x$)の領域では静電波は存在しないため、 $E_x(x) = 0$ となる。このようなシステムでポアソン方程式を解くためにはFFT法をそのまま使用することはできないが、少々工夫をすることでFFT法と同程度の計算量でポアソン方程式を解くことができる。非周期的なシステムに対してFFT法を適用するためには、電荷密度が、 $\rho(x = L) = \rho(x = 0)$ を仮定する必要がある。非周期的でかつ電荷中性なシステムは

$$\rho(x = L) = 0 = \rho(x = 0) \quad (1)$$

を仮定することによって実現できる。この仮定によって、ポアソン方程式

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = -\rho(x) \quad (2)$$

は周期的な特解 ϕ を持つことができる。この特解 ϕ に $\phi = a + bx$ なる解を加えることによって、非周期的な解をえることができる。ここで、 b は境界条件から求められ

$$E_x(0) = -\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_0 = -\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_0 - b = -\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_L - b = E_x(L) = 0 \quad (3)$$

さらに中心差分の原理と周期性 $\phi(x+L) = \phi(x)$ を利用すると

$$b = -\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_0 = \frac{\phi(-\Delta x) - \phi(+\Delta x)}{2\Delta x} = \frac{\phi(L - \Delta x) - \phi(+\Delta x)}{2\Delta x} \quad (4)$$

$$\phi(X_j) = \phi(X_j) + bX_j \quad \text{for} \quad 0 \leq X_j \leq L \quad (5)$$

$$E_x(X_j) = \frac{\phi(X_j - \Delta x) - \phi(X_j + \Delta x)}{2\Delta x} \quad \text{for} \quad \Delta x \leq X_j \leq L - \Delta x \quad (6)$$

このような条件 $\rho(x = L) = 0 = \rho(x = 0)$ を実現するためには、システムの両端のグリッドに荷電粒子が入らないようにする必要がある。システム両端における粒子の取り扱いとしては、 $x = \Delta x$ と $x = L - \Delta x$ において粒子を反射する壁があるように取り扱うことによって実現できる。

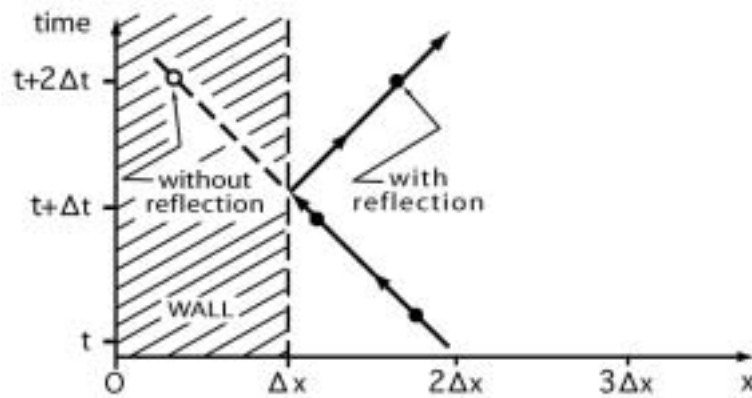


図1．拘束プラズマ境界条件を扱う場合の境界近傍での粒子の取り扱い

4．完全導体境界条件

完全導体表面では、電界ベクトルの接線成分がゼロになるため、 $x=0(j=0)$ と $x=L_x(j=N_x)$ における境界条件は次のように書くことができる。ここで、 j および k は x, y 方向のグリッドの添え字である。

$$E_y = 0 \quad E_{y,0,k+1/2} = 0 \quad (7)$$

$$E_z = 0 \quad \frac{E_{z,-1/2,k+1/2} + E_{z,1/2,k+1/2}}{2} = 0 \quad (8)$$

E_z 成分の境界条件は (8) 式のような平均操作を行うことにより 2 次の精度を持つことができる。境界面上において、 E_y , E_z 成分が常にゼロであることをマクスウェル方程式の磁界成分の時間変化の式に適用すると

$$\frac{\partial B}{\partial t} = -c \nabla \times E \quad (9)$$

$$B_x \quad \frac{B_{x,-1/2,k} + B_{x,1/2,k}}{2} = B_{x0}(y) \quad (10)$$

が得られる。この条件は方程式を閉じるためには必要ではないが、導体境界面上において初期値として与えた磁場成分が後の時間ステップにおいて保存されるということを示しているという意味で重要である。

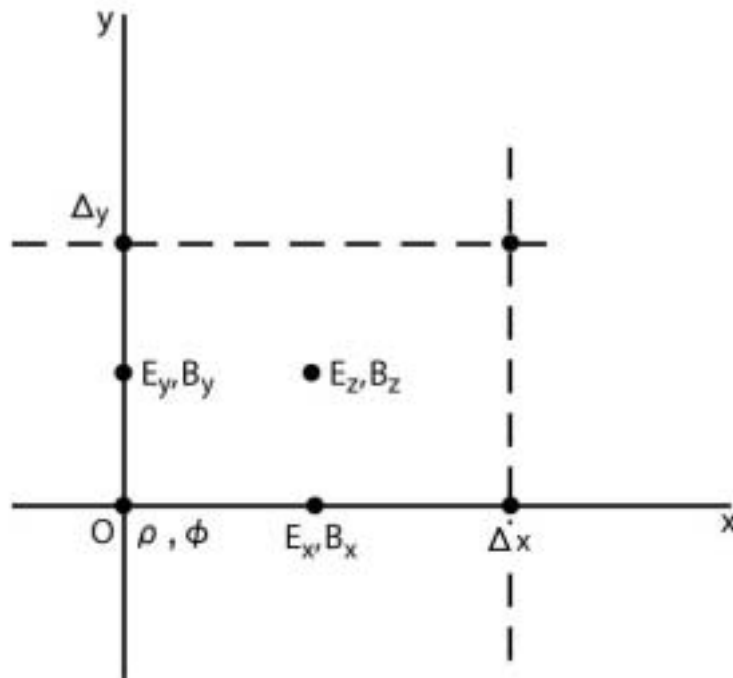


図2．導体境界条件を使用する場合の境界($x=0$)近傍のグリッド配置

6 . 開放境界条件

無限に広がる空間をシミュレーション空間に再現する方法として必要な境界条件が開放境界条件である。この条件でもっとも重要なのは、実際にシミュレーション空間の外に格子点が存在しないにもかかわらず、あたかも無限遠まで続いているかのように“みせかける”必要があるという点にある。つまり、シミュレーション空間内で発生した静電的、電磁的波動は外部に向かって伝播するが、これらの波動はシミュレーション空間外の無限遠に伝播し、シミュレーション空間内にはもどってこないように見せかける必要がある。これを実現するためには、大きく分けると二つの方法がある。ひとつは、外向きの波動を数値的に設けた吸収領域において減衰させる方法である。この方法は、電波無響室の原理と同様で、有効な方法であるが計算量が増加することが欠点である。二つ目の方法は、自由空間と同じインピーダンスを持つ媒質を境界面上に置く方法である。この方法は、計算量の増加はわずかですむ反面、プラズマ波のような自由空間と異なる屈折率を持った媒質中を伝播する波動に対しては適用が困難である。この説では、幅広い適用が可能な吸収境界条件について述べることにする。

吸収境界条件の設定法はいくつかあるが、基本となる考え方は以下のファラデーの法則に磁流項を加える方法である。

$$-c\nabla \times E = \frac{\partial B}{\partial t} + J_m \quad (11)$$

ここで、 $J_m = \sigma_m(x)B$ であり、仮想的に磁気単極子の流れを作ることに相当する。このような操作と同様の手法としては、1以下の定数を磁場成分に毎ステップ乗じることによっても可能である。

マスキング法は、電界、磁界などの物理量を直接的に減衰させる方法である。使用する減衰係数 $f_M(x)$ の空間分布は図5に示すように、 x に関して2次関数で与えると比較的効率的に減衰できることがわかっている。

$$E(x) \rightarrow f_M(x)E(x) \quad (13)$$

$$E(x) \rightarrow f_M(x)E(x) \quad (14)$$

ここに、 $f_M(x)$ は

$$f_M(x) = \begin{cases} 1 & (|x| \leq L) \\ 1 - \left(\frac{|x| - L}{L_D} \right)^2 & (|x| > L) \end{cases} \quad (15)$$

となる減衰関数である。この手法に改良を加えた方法なども開発されている。

さらに純粋に横伝播の電磁波に対してのみ吸収効果を持つ方法として、電場の回転から電流成分を求める方法が使用される。

$$J = c \nabla \times M = -\nabla \times [\alpha(x) \nabla \times E] \quad (12)$$

この方法は、静電波成分にまったく影響せずに、電磁波成分のみを減衰させることができる点において、興味深い方法であるといえる。

いずれの方法においても、減衰させる波の波長と同程度の長さの減衰領域がシステムに必要となる。十分な減衰を得るためには、シミュレーション空間の1方向のみを吸収境界とする場合でも、システム全体の半分、2方向を吸収境界とした場合はシステム全体のおよそ1/4を吸収領域に設定する必要があり、計算量が非常に大きくなるが、現実的なシミュレーションを行うためには、現段階ではもっとも実用的な方法といえる。

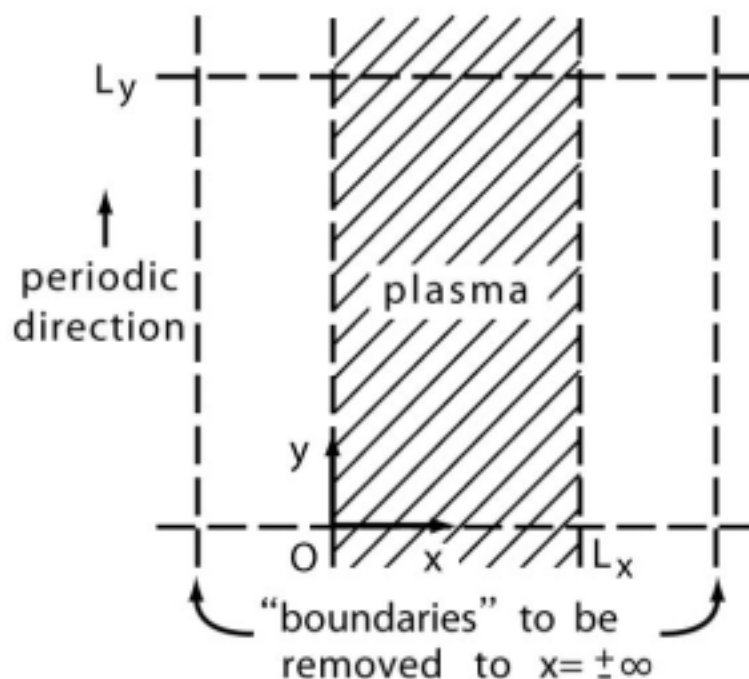


図3 . 2次元のシミュレーション空間の $x < 0, x > L_x$ の領域に吸収境界を取り付け、 y 方向は周期境界を設定した例。

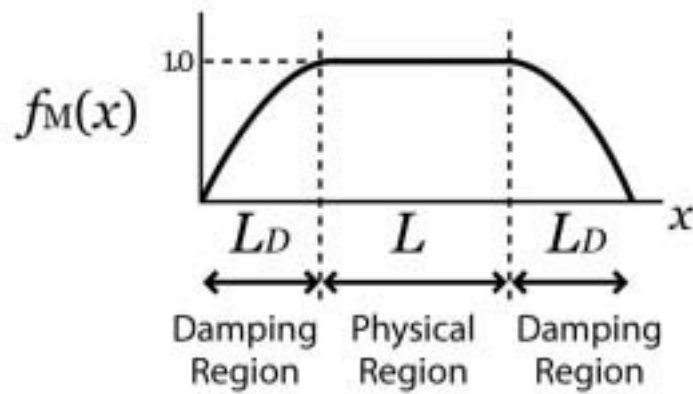


図 4 . 吸収境界を物理領域の両側に設け、この領域では電界、磁界を減衰させることによって反射を抑える。

6 . 非構造格子電磁粒子コード

以上のような境界条件を組み合わせることによって、宇宙空間を飛翔する衛星などの飛翔体環境を模擬することも可能となる。飛翔体などの複雑な形状をシミュレーションのモデルとして取り入れるためには、直行格子によって空間を離散化するのみでは不十分で、構造格子あるいは非構造格子を使った空間格子が必要となる。非構造格子電磁粒子コードでは、空間を三角要素に分割して電磁界の離散化を行う。図 5 は、一つの三角要素上において離散化された電界、磁界の配置を示したずである。電界、磁界の XY 面内の成分は、三角要素の辺上で定義され、Z 成分は三角要素の重心で定義されている。これらの空間格子はシミュレーションに適した Delauney-Voronoi Mesh を形成する。

この離散化により、 E_z 成分の時間発展を計算するために必要な $\nabla \times B$ は以下のようにして計算できる。

$$(\nabla \times B_{xy})_z \cong \frac{B_{xy1} \cdot l_1 + B_{xy2} \cdot l_2 + B_{xy3} \cdot l_3}{A_e} \quad (13)$$

同様に、 B_{xy} 成分の時間発展は隣り合う三角形要素で定義された E_z 成分の差分をとることによって計算することができる。

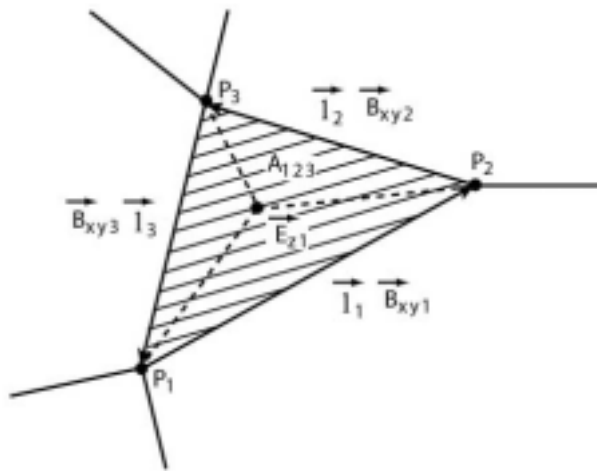


図 5 . 三角形要素上における電界、磁界の離散化。

図 6 (a)は、非構造格子によってシャトル型飛翔体近傍の電磁環境をモデル化した例である。(b)は電磁波の伝播の様子をシミュレートした例で、ほぼ任意の形状の飛翔体環境に適用することが可能となる。図 7 は、3 次元空間を 4 面体要素によって離散化した例である。飛翔体の表面物性に合わせて、導体境界条件、誘電体境界条件、吸収境界条件を組み合わせることにより、このような宇宙飛翔体環境のシミュレーションが実用になりつつある。

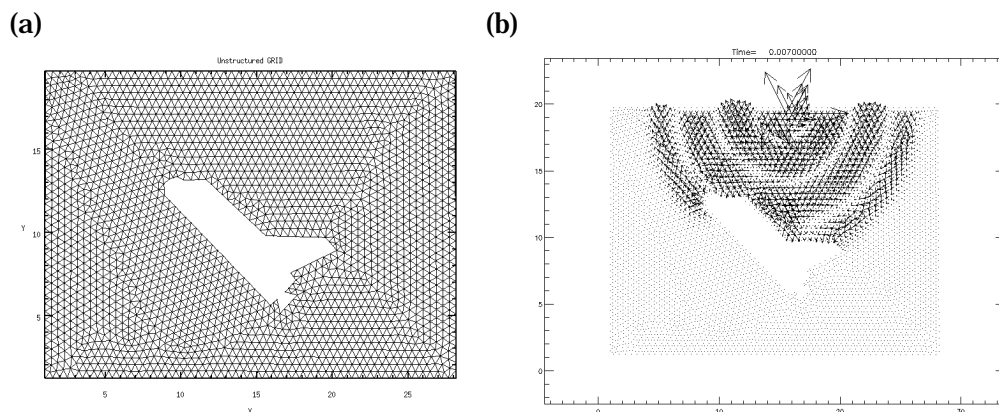


図 6 . 2 次元のシミュレーション空間に導体境界条件を内部境界として使用して飛翔体をモデル化(a)を行い、電磁波の伝播実験を行った例(b)

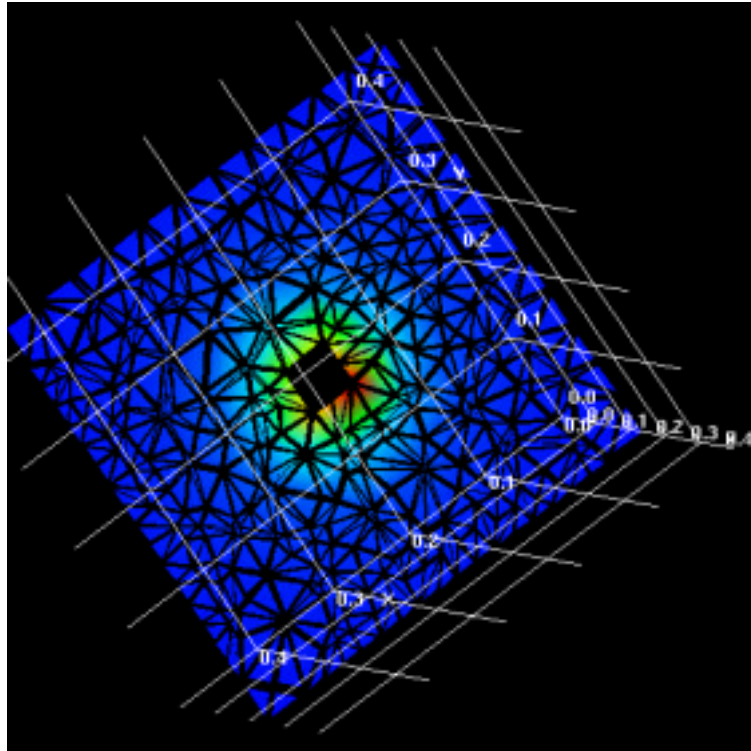


図7 . 3次元の飛翔体環境シミュレーションコードの例。4面体によってシミュレーション空間を離散化をおこなっている。

参考文献

- [1] Birdsall, C. K. and A. B. Langdon, Plasma Physics via Computer Simulation, McGraw-Hill, 1985
- [2] Okada, M., Study on spacecraft-plasma interaction in fast plasma flow via computer experiments, Ph.D thesis, 1994
- [3] Okada, M. and H. Matsumoto, Simulation techniques of electromagnetic environment in the vicinity of a spacecraft, ISTS 2002 at Matsue, 2002