

第2部 粒子ハイブリッドモデル

粒子シミュレーション法 概説

臼井英之、杉山徹、大村善治、藤本正樹、松本紘

2002.8

目 次

第1章 テスト粒子解析	5
1.1 Euler 法	5
1.2 修正 Euler 法	6
1.3 Runge-Kutta 法	6
1.4 Buneman-Boris 法	7
1.5 逆行列	9
第2章 1次元電磁粒子シミュレーション法	11
2.1 基礎方程式	11
2.2 粒子モデルの基本概念	11
2.3 電磁界定義のための空間格子点	13
2.4 時間更新チャート	15
2.5 電界及び磁界更新ルーチン	16
2.6 電荷密度ルーチン	17
2.7 電流密度ルーチン	18
2.8 電界補正	20
第3章 ハイブリッドシミュレーション法	21
3.1 定式化	21
3.2 タイムチャート	23
3.3 有理ルンゲクッタ法 (Rational Runge Kutta method)	26
第4章 粒子モデルシミュレーション基本課題	27
4.1 電磁粒子シミュレーションで解く課題	27
4.1.1 ビームプラズマ不安定性	27
4.2 ハイブリッドシミュレーションで解く課題	30
4.2.1 イオン二流体不安定性	31
4.2.2 Fast Mode 衝撃波	32

参考文献	35
付録A クーラン条件	37
付録B マクスウェル分布を与える方法	39

第1章 テスト粒子解析

本章では、テスト粒子解析手法について概説する。テスト粒子解析は、ある与えられた電磁界環境の中でプラズマ粒子がどのような振る舞いをするかを計算するものであり、プラズマ粒子の運動による電流変化は電磁界環境にはフィードバックされない。粒子の速度更新は微小時間ステップ Δt 毎に行い、これにより粒子の軌跡や加速減速を見る。ここで述べる速度更新や位置更新の手法は後述する電磁粒子シミュレーションやハイブリッドシミュレーションに用いられる。

一般に宇宙プラズマは十分に希薄であり、粒子相互間の衝突はほとんど無視することができる。したがって、本章では衝突項を含まない粒子の運動方程式を考える。相対論的效果を無視すれば、運動方程式は次式で与えられる。

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{q}{m}(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = \mathbf{v} \quad (1.2)$$

ここで、 \mathbf{v} , \mathbf{r} , q , m , \mathbf{E} , \mathbf{B} はそれぞれ、粒子の速度ベクトル、位置ベクトル、電荷、質量、電界ベクトル、磁界ベクトルとする。

上方程式を用いて粒子速度を時間ステップ Δt 毎に解き進めていく代表的な方法はいくつかある。それらについて以下説明する。

1.1 Euler 法

変数 t , t の関数 $v(t)$ として、 $v(t)$ の満たすべき微分方程式と初期条件

$$\frac{dv(t)}{dt} = f(v, t) \quad (1.3)$$

$$v(t=0) = v_0 \quad (1.4)$$

を与えて、 $v(t)$ を求める問題を考える。離散的に解くもっとも簡単な方法は、

$$\frac{dv}{dt} \sim \frac{v^{n+1} - v^n}{t^{n+1} - t^n} = \frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} \quad (1.5)$$

から、

$$v^{n+1} = v^n + f(v^n, t^n) \Delta t \quad (1.6)$$

として計算するもので、Euler 法という。しかし、この方法は、後述の方法に比べ誤差が大きい。

1.2 修正 Euler 法

t^n から t^{n+1} まで積分するとき、 $f(v^n, t^n)$ だけを用いるのではなく、 $f(v^n, t^n)$ と予測した $f(v^{n+1}, t^{n+1})$ を用いると精度が良くなる。この方法は、修正 Euler 法という。予測の方法は、

$$k_1 = f(v^n, t^n) \quad (1.7)$$

$$v^{n+1} = v^n + k_1 \Delta t \quad (1.8)$$

$$k_2 = f(v^{n+1}, t^n + \Delta t) \quad (1.9)$$

と予測値を求め、

$$v^{n+1} = v^n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \Delta t \quad (1.10)$$

と、 v^{n+1} を求めなおす。

1.3 Runge-Kutta 法

さらに、4つの予測値を使う方法が、ルンゲクッタ法である。

$$k_1 = f(v^n, t^n) \quad (1.11)$$

$$v_2 = v^n + k_1 \frac{\Delta t}{2} \quad (1.12)$$

$$k_2 = f(v_2, t^n + \frac{\Delta t}{2}) \quad (1.13)$$

$$v_3 = v^n + k_2 \frac{\Delta t}{2} \quad (1.14)$$

$$k_3 = f(v_3, t^n + \frac{\Delta t}{2}) \quad (1.15)$$

$$v_4 = v^n + k_3 \Delta t \quad (1.16)$$

$$k_4 = f(v_4, t^n + \Delta t) \quad (1.17)$$

と予測値を求め、

$$v^{n+1} = v^n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)\Delta t \quad (1.18)$$

と、 v^{n+1} 求める。

1.4 Buneman-Boris 法

式 (1.1) の差分表現は以下のようになる。

$$\frac{v^{n+1/2} - v^{n-1/2}}{\Delta t} = \frac{q}{m}(\mathbf{E}^n + \frac{\mathbf{v}^{n+1/2} + \mathbf{v}^{n-1/2}}{2} \times \mathbf{B}^n) \quad (1.19)$$

式を見てわかるように、時間 $n\Delta t$ における式展開になっている。ただし、 \mathbf{E} , \mathbf{B} は粒子位置での電界値および磁界値である。この式から $v^{n+1/2}$ の値を計算するには以下のような方法を用いる。

まず、新しい変数として v^- と v^+ を以下のように定義し導入する。

$$v^- = v^{n-1/2} + \frac{q}{m}\mathbf{E}^n \frac{\Delta t}{2} \quad (1.20)$$

$$v^+ = v^{n+1/2} - \frac{q}{m}\mathbf{E}^n \frac{\Delta t}{2} \quad (1.21)$$

すなわち、 $v^{n-1/2}$ から電界 \mathbf{E}^n で $\Delta t/2$ だけ加速を受けた後の速度、および $v^{n+1/2}$ から電界 \mathbf{E}^n で $\Delta t/2$ だけ加速を受ける前の速度を意味する。これらの変数を用いて式 (1.19) を書き換えると以下のようになる。

$$\frac{v^+ - v^-}{\Delta t} = \frac{1}{2}\frac{q}{m}(\mathbf{v}^+ + \mathbf{v}^-) \times \mathbf{B}^n \quad (1.22)$$

この意味は、 v^+ から v^- へ変化する間に $\frac{q}{m}\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ のローレンツ力によるサイクロトロン回転のみが作用するということである。

この式の両辺について $(v^+ + v^-)$ との内積をとると $(v^+)^2 = (v^-)^2$ となる。すなわち、図 1.1 に示されたように、式 (1.22) は v^+ は v^- は大きさが同じで、角度 θ だけ回転させたものであることを示す。つまり、式 (1.19) を $\Delta t/2$ 分の電界による加速 2 回と、 Δt 分のサイクロトロン回転とに分離したことになる。

詳細は省くが、式 (1.22) を整理すると、

$$\mathbf{v}^+ = \mathbf{v}^- + \frac{2}{1 + \mathbf{T}^2}(\mathbf{v}^- + \mathbf{v}^- \times \mathbf{T}) \times \mathbf{T} \quad (1.23)$$

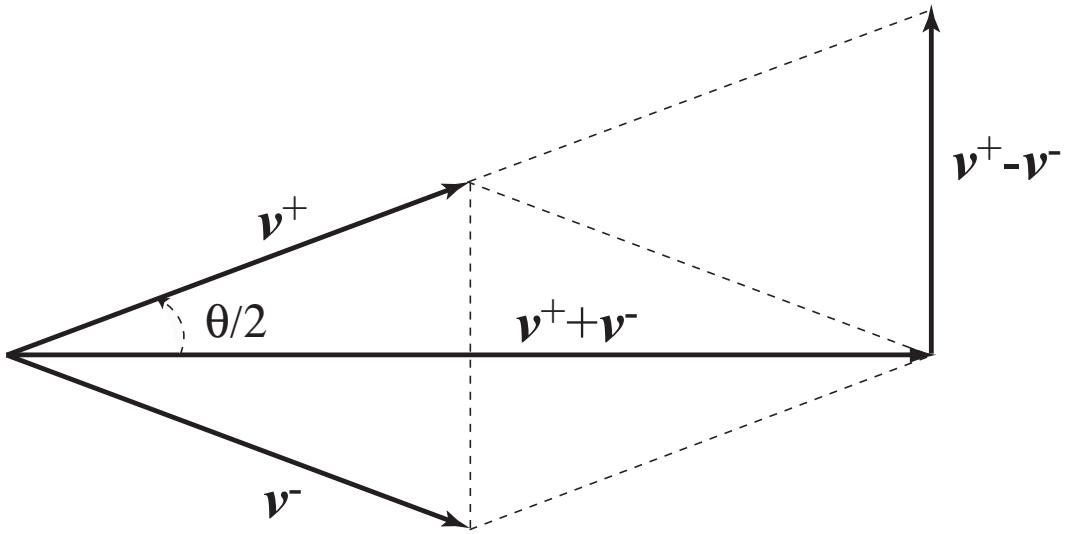


図 1.1: Vector relation in Byneman-Boris method

となる。ただし、 $\mathbf{T} = (q/m)\Delta t \mathbf{B}^n / 2$ と定義する。上の式で括弧内を v^o とすると、 v^- から v^+ への計算は

$$\mathbf{v}^o = \mathbf{v}^- + \mathbf{v}^- \times \mathbf{T} \quad (1.24)$$

$$\mathbf{v}^+ = \mathbf{v}^- + \mathbf{v}^o \times \mathbf{S} \quad (1.25)$$

ただし、 $S = 2T/(1 + T^2)$ とする。

以上をまとめると、粒子の速度更新には以下の 4 ステップの計算を行うことになる。

$$\mathbf{v}^- = \mathbf{v}^{n-1/2} + \frac{q}{m} \mathbf{E}^n \frac{\Delta t}{2} \quad (1.26)$$

$$\mathbf{v}^o = \mathbf{v}^- + \mathbf{v}^- \times \mathbf{T} \quad (1.27)$$

$$\mathbf{v}^+ = \mathbf{v}^- + \mathbf{v}^o \times \mathbf{S} \quad (1.28)$$

$$\mathbf{v}^{n+1/2} = \mathbf{v}^+ + \frac{q}{m} \mathbf{E}^n \frac{\Delta t}{2} \quad (1.29)$$

この計算方法を Buneman-Boris 法という。

速度がわかれば粒子位置 r は速度 v を時間的に積分することにより得られる。

$$x^{n+1} = x^n + v_x^{n+1/2} \Delta t \quad (1.30)$$

1.5 逆行列

一般性を欠くが、以下のような方法もある。式(1.19)を成分で書くと、

$$m \begin{pmatrix} v_x^{n+1/2} - v_x^{n-1/2} \\ v_y^{n+1/2} - v_y^{n-1/2} \\ v_z^{n+1/2} - v_z^{n-1/2} \end{pmatrix} \Delta t = q \begin{pmatrix} E_x^n \\ E_y^n \\ E_z^n \end{pmatrix} + q \frac{1}{2} \begin{pmatrix} v_x^{n+1/2} + v_x^{n-1/2} \\ v_y^{n+1/2} + v_y^{n-1/2} \\ v_z^{n+1/2} + v_z^{n-1/2} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} B_x^n \\ B_y^n \\ B_z^n \end{pmatrix} \quad (1.31)$$

これを $v^{n+1/2}$ について解くと、

$$\mathbf{v}^{n+1/2} = \mathbf{A} \left(\frac{q}{m} \mathbf{E} \Delta t + 2\mathbf{v}^{n-1/2} \right) - \mathbf{v}^{n-1/2} \quad (1.32)$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{D} \begin{pmatrix} 4 + B_x^2 & B_x B_y + 2B_z & B_z B_x + 2B_y \\ B_x B_y + 2B_z & 4 + B_y^2 & B_y B_z + 2B_x \\ B_z B_x + 2B_y & B_y B_z + 2B_x & 4 + B_z^2 \end{pmatrix} \quad (1.33)$$

$$D = 4 + B_x^2 + B_y^2 + B_z^2 \quad (1.34)$$

$$B_x = \frac{q}{m} B_x^n \Delta t \quad (1.35)$$

$$B_y = \frac{q}{m} B_y^n \Delta t \quad (1.36)$$

$$B_z = \frac{q}{m} B_z^n \Delta t \quad (1.37)$$

となり、時間を進めることができる。

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)と式(1.2))および以下に示したMaxwellの電磁方程式である。

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (2.1)$$

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

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

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

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

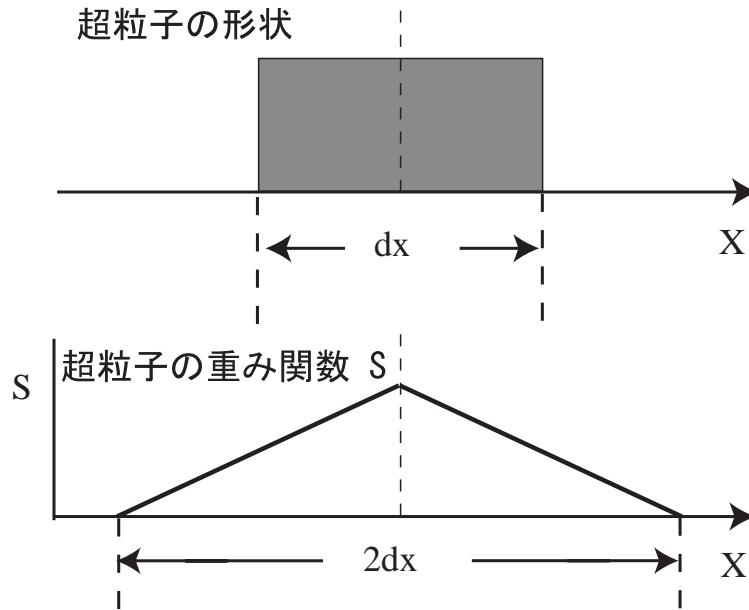


図 2.1: 超粒子の形状および Shape factor

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 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 v , 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.q., 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。

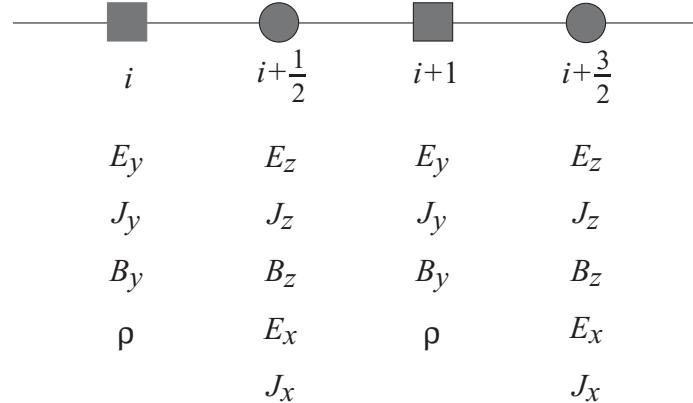


図 2.2: 整数格子と半整数格子および各電磁界の定義点

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、格子点に電荷量を分配するときには $qS(X' - x)$ 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 X' は格子点位置、 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用い、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 v および位置 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。

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するため、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、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

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

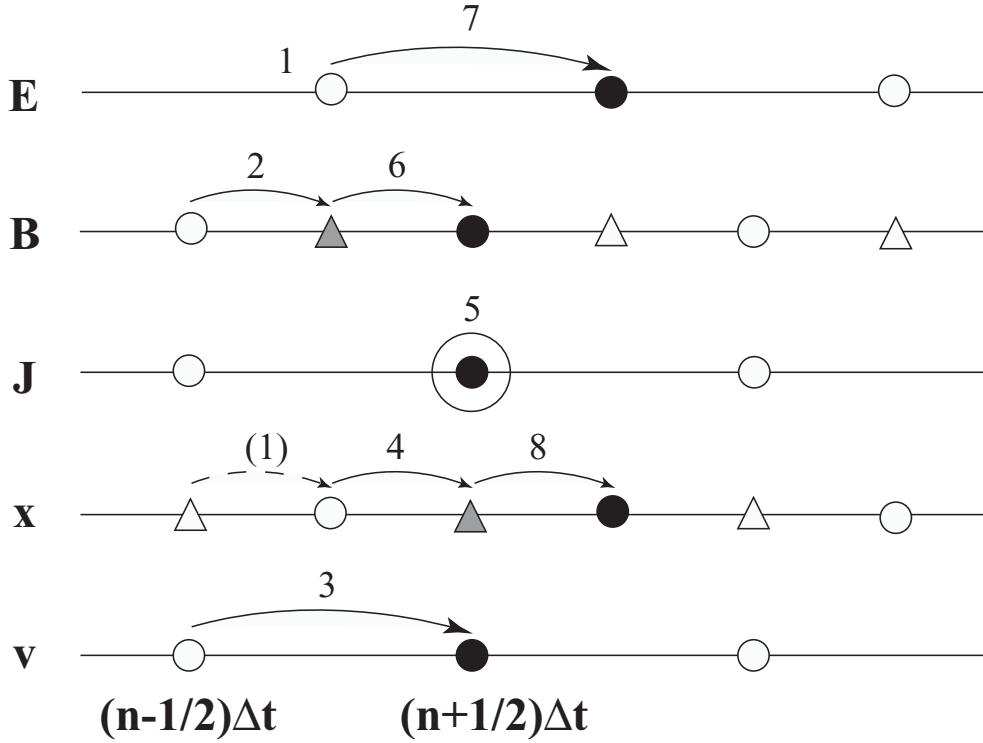


図 2.3: 時間更新チャート

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

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 B を解く。
3. $t = n\Delta t$ における電界 E 、磁界 B が求まつ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、速度が決まつたので後述の電荷保存法により電流密度 J を各格子点で計算する。
6. 磁界 B を更に半ステップ進める。
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。

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

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

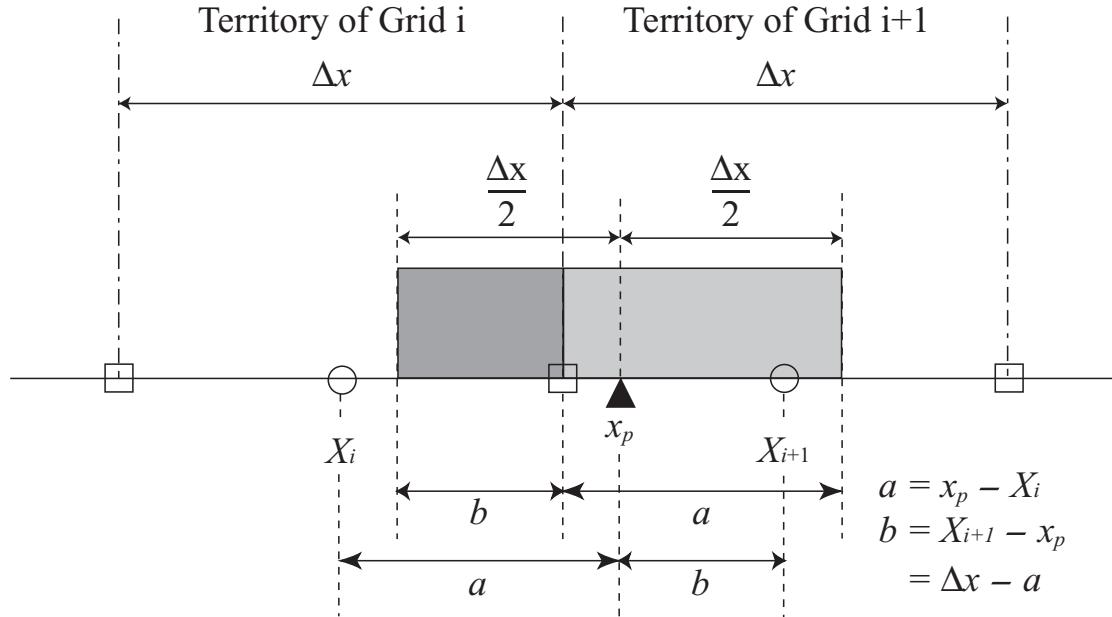


図 2.4: Area weighting method in computing charge density.

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 電荷密度ルーチン

電界の初期値を得るためにには、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 2.4 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。

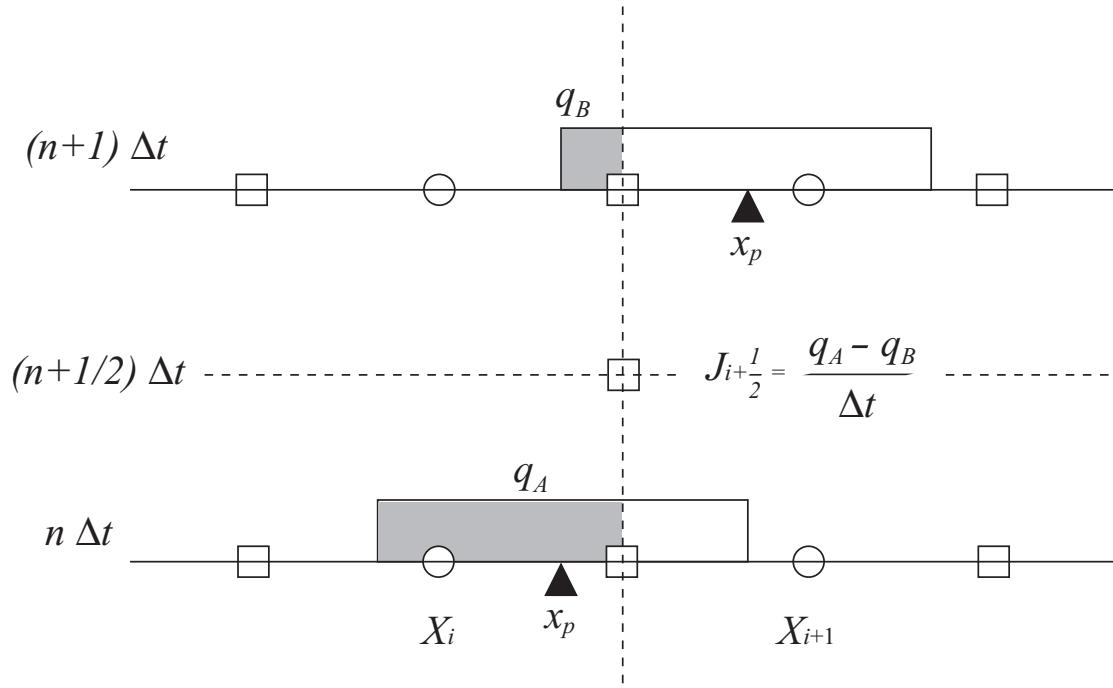


図 2.5: Charge conservation method in computing current density : Case 1

2.7 電流密度ルーチン

電流密度 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 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 2.5 に示

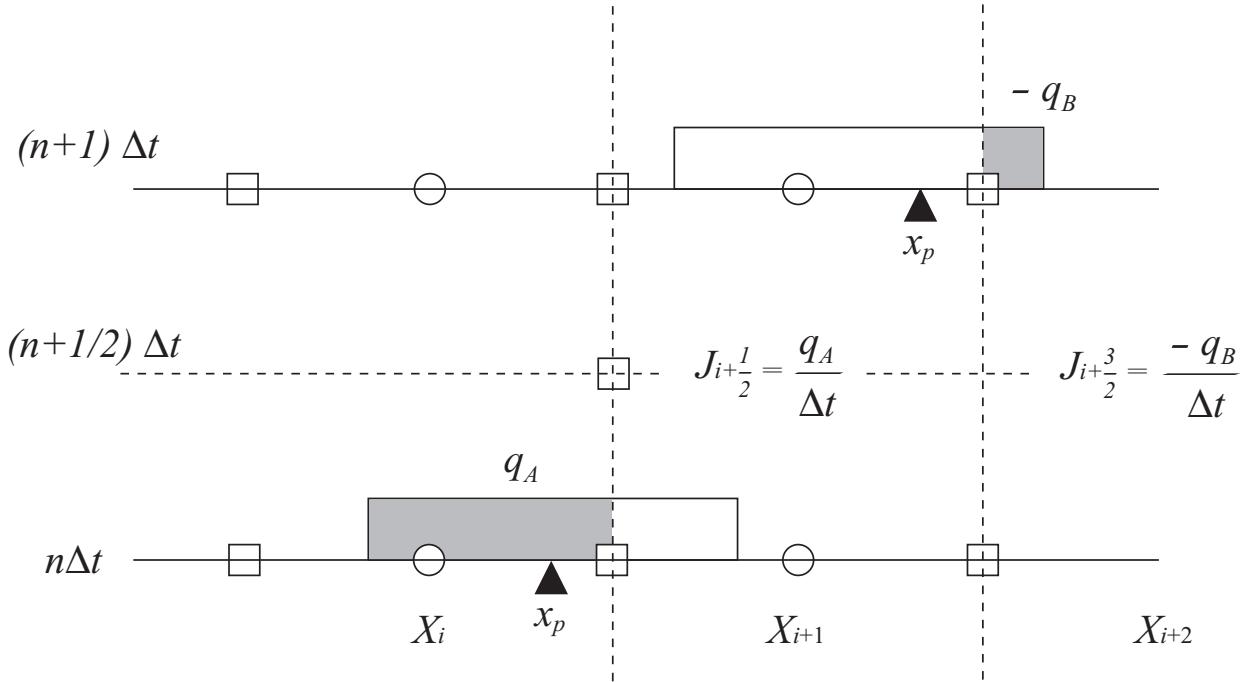


図 2.6: Charge conservation method in computing current density : Case 2

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、図 2.6 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。

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

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、

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

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。以上的方法は、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。(Matsumoto and Omura, Computer space plasma physics: simulation technique, Terra Pub., page 21, 1993)

2.8 電界補正

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。ただし、1次元モデルの場合、 E_x は静電界のみであり、式(2.5)の解が E_x そのものになる。また、電荷密度から初期の電界分布を求めるためにも以下のポアソン方程式を解く必要がある。

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

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のが提唱されているが、空間的に周期境界のものでは、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。

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

第3章 ハイブリッドシミュレーション法

3.1 定式化

電子とイオンの特徴的な運動時間、空間を比べた場合、はるかに、電子の方が、速く、短い。そこで、注目するプラズマ現象が、イオンによって主に生じていると分かっている場合、すなわち、現象の時間と空間スケールがイオンの運動程度と分かっている場合は、電子の運動論的効果を陽に解かないシミュレーションを行うことができる。この手法を、ハイブリッド (HYBRID) 法と呼ぶ。そこでは、イオンを粒子で扱う一方、電子を電荷中性を瞬時に行う流体として扱う。瞬時に行うためには、慣性を持ってはならないので電子の質量は 0 となり、光速は無限大となる。式で表すと、

$$\rho_e = \sum_{i=ion} \rho_i \quad (3.1)$$

$$\frac{M_p}{m_e} \rightarrow \infty \quad (3.2)$$

$$\frac{c}{V_A} \rightarrow \infty \quad (3.3)$$

まず、ハイブリッド法で用いる方程式系を導入するために Maxwell 方程式 (2.1 - 2.2) と次の電子流体要素に対する運動方程式の規格化を行う。

$$m_e N_e \frac{d\mathbf{V}_e}{dt} = -e N_e (\mathbf{E} + \mathbf{V}_e \times \mathbf{B}) - \nabla P_e \quad (3.4)$$

規格化定数は、

速度	\mathbf{V}	\rightarrow	$\tilde{\mathbf{V}}$	V_A
時間	t	\rightarrow	\tilde{t}	$\frac{t}{\Omega_i}$
長さ	x	\rightarrow	\tilde{x}	$\frac{V_A}{\Omega_i}$
磁場	\mathbf{B}	\rightarrow	$\tilde{\mathbf{B}}$	B_0
電場	\mathbf{E}	\rightarrow	$\tilde{\mathbf{E}}$	$V_A B_0$

$$\begin{array}{ll} \text{密度} & \rho \rightarrow \tilde{\rho} \rho_0 \\ \text{圧力} & P \rightarrow \tilde{P} \frac{B_0^2}{2\mu_0} \end{array}$$

を用いる。Maxwell 方程式 (2.1 - 2.2) を規格化すると、

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{E}}}{\partial \tilde{t}} = \left(\frac{c}{V_A}\right)^2 (\tilde{\nabla} \times \tilde{\mathbf{B}} - \tilde{\mathbf{J}}) \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{B}}}{\partial \tilde{t}} = -\tilde{\nabla} \times \tilde{\mathbf{E}} \quad (3.6)$$

となり、式 (3.5) において、式 (3.3) を満足し、かつ、左辺が有限値になるためには、

$$\tilde{\nabla} \times \tilde{\mathbf{B}} - \tilde{\mathbf{J}} = 0 \quad (3.7)$$

でなければならない。

電流は、

$$\tilde{\mathbf{J}} = \sum \tilde{\rho}_i \tilde{\mathbf{V}}_i \quad (3.8)$$

$$= \tilde{N}_e \tilde{\mathbf{V}}_e + \sum_{ion} \tilde{\rho}_i \tilde{\mathbf{V}}_i \quad (3.9)$$

と定義されるため、電子の流体速度は、式 (3.7) を使って、

$$\tilde{\mathbf{V}}_e = (\tilde{\mathbf{J}} - \sum_{ion} \tilde{\rho}_i \tilde{\mathbf{V}}_i) / \tilde{N}_e = \frac{1}{\tilde{N}_e} \left(\sum_{ion} \tilde{\rho}_i \tilde{\mathbf{V}}_i - \tilde{\nabla} \times \tilde{\mathbf{B}} \right) \quad (3.10)$$

と求まる。

次に電子流体の運動方程式は、

$$\frac{d\tilde{\mathbf{V}}_e}{d\tilde{t}} = -\left(\frac{\tilde{M}_p}{\tilde{m}_e}\right)(\tilde{\mathbf{E}} + \tilde{\mathbf{V}}_e \times \tilde{\mathbf{B}} + \frac{1}{2\tilde{N}_e} \tilde{\nabla} \tilde{P}_e) \quad (3.11)$$

となり、式 (3.2) を満足し、かつ、左辺が有限値になるためには、

$$\tilde{\mathbf{E}} + \tilde{\mathbf{V}}_e \times \tilde{\mathbf{B}} + \frac{1}{2\tilde{N}_e} \tilde{\nabla} \tilde{P}_e = 0 \quad (3.12)$$

でなければならない。

したがって、電場は、

$$\tilde{\mathbf{E}} = -\tilde{\mathbf{V}}_e \times \tilde{\mathbf{B}} - \frac{1}{2\tilde{N}_e} \tilde{\nabla} \tilde{P}_e \quad (3.13)$$

と求まる。

つまり、電子の流体速度と電場の値は、時間積分を行い求めるのではなく、各時

間で、他の変数から求める。

電子の圧力勾配は、状態方程式から求める。例えば、断熱変化を仮定した場合、比熱比 γ を用いて

$$\tilde{P}_e \tilde{N}_e^{-\gamma} = \text{const.} \quad (3.14)$$

から求める。イオンの各粒子については、以下の運動方程式を解く。

$$\frac{d\tilde{\mathbf{v}}_i^\sharp}{d\tilde{t}} = \left(\frac{\tilde{Z}_i}{\tilde{M}_i} \right) (\tilde{\mathbf{E}} + \tilde{\mathbf{v}}_i^\sharp \times \tilde{\mathbf{B}}) \quad (3.15)$$

まとめると、解き進めて行く方程式は、(以降、~記号を省略)

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E} \quad (3.16)$$

$$\mathbf{E} = -\mathbf{V}_e \times \mathbf{B} - \frac{1}{2N_e} \nabla P_e \quad (3.17)$$

$$\mathbf{V}_e = \frac{1}{N_e} \left(\sum_{ion} \rho_i \mathbf{V}_i - \nabla \times \mathbf{B} \right) \quad (3.18)$$

$$N_e = \sum_{ion} \rho_i \quad (3.19)$$

$$\frac{d\mathbf{v}_i^\sharp}{dt} = \left(\frac{Z_i}{M_i} \right) (\mathbf{E} + \mathbf{v}_i^\sharp \times \mathbf{B}) \quad (3.20)$$

である。

\mathbf{E} 、 \mathbf{B} 、 \mathbf{V} 、 P_e 、 N は、空間上に定義したグリッド上でのみ定義される。また、Full-Particle 計算の時のような半グリッドずらした場所での変数の定義は無い。

3.2 タイムチャート

まず、時間 $t^n = n\Delta t$ で、粒子の位置 x^n 、グリッド上での磁場 $B^n(j)$ 、イオンの密度 $N_i^n(j)$ が分かっていて、 $t^{n+1/2} = (n + 1/2)\Delta t$ で粒子の速度 $v^{n+1/2}$ が分かっていたとする。ここで、 j は、グリッド位置 $j\Delta x$ を表すとする。leap-frog 法でイオン粒子を時間的に進めるため、イオン粒子の位置と速度の情報は、時間的にずれて定義する。

STEP 1: $t = t^n$ でのグリッド上でのイオンフラックス $F_1^n(j)$ を求める。

$$F_1^n(j) = v^{n+1/2} \sum_{\sharp} S(x^n - X(j)) \quad (3.21)$$

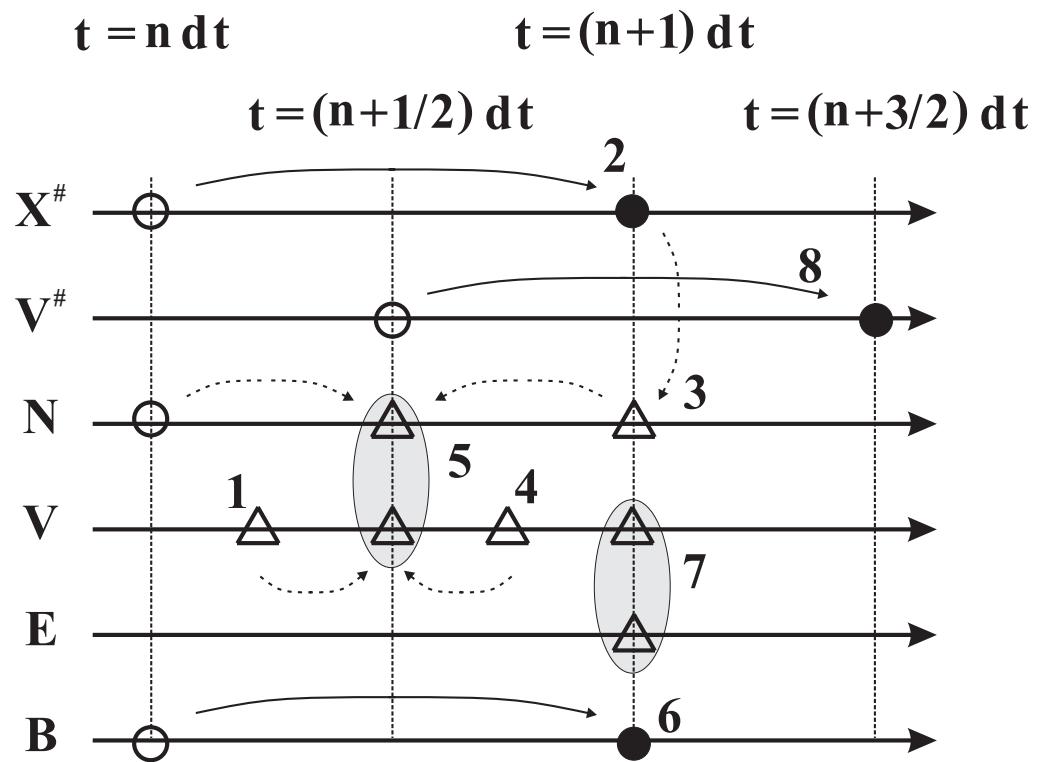


図 3.1: 時間の進め方。 の時間での値は既知。 の値は、 から時間を進めるこ
とによって求める。 の値は、他の量から求める。

STEP 2: 粒子の位置を進める。

$$x^{n+1} = x^n + v^{n+1/2} \Delta t \quad (3.22)$$

STEP 3 & 4: $t = t^{n+1}$ でのグリッド上でのイオンの数密度とフラックスを求める。

$$N^{n+1}(j) = \sum_{\sharp} S(x^{n+1} - X(j)) \quad (3.23)$$

$$F_2^{n+1}(j) = v^{n+1/2} \sum_{\sharp} S(x^{n+1} - X(j)) \quad (3.24)$$

STEP 5: $t = t^{n+1/2}$ でのイオンの数密度、速度、イオン電流を求める。

$$N^{n+1/2} = (N^n + N^{n+1})/2 \quad (3.25)$$

$$\mathbf{V}^{n+1/2} = (F_1^n + F_2^{n+1})/(2N_i^{n+1/2}) \quad (3.26)$$

$$\mathbf{J}^{n+1/2} = \sum_{ion} Z_i N^{n+1/2} \mathbf{V}^{n+1/2} \quad (3.27)$$

STEP 6: 磁場を進める。後述の有理ルンゲクッタ法を使う。

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E} \quad (3.28)$$

STEP 7 & 8: 粒子の速度を進める。

$$\frac{v^{n+3/2} - v^{n+1/2}}{\Delta t} = \mathbf{E}'^{n+1} + \frac{v^{n+3/2} + v^{n+1/2}}{2} \times \mathbf{B}'^{n+1} \quad (3.29)$$

ここで、

$$\mathbf{E}'^{n+1}(j) = \sum_i \mathbf{E}^{n+1} S(x^{n+1} - X(j)) \quad (3.30)$$

$$\mathbf{B}'^{n+1}(j) = \sum_i \mathbf{B}^{n+1} S(x^{n+1} - X(j)) \quad (3.31)$$

は、粒子の存在する位置での電場と磁場の値である。

また、 \mathbf{E}^{n+1} は、

$$\mathbf{E}^{n+1} = -\mathbf{V}_e^{n+1} \times \mathbf{B}^{n+1} - \frac{1}{2N_e} \nabla P_e \quad (3.32)$$

$$= -\frac{1}{N_e} \left(\sum_{ion} Z_i N_i^{n+1} \mathbf{V}_i^{n+1} - \nabla \times \mathbf{B}^{n+1} \right) - \frac{1}{2N_e} \nabla P_e \quad (3.33)$$

から求め、 V_i^{n+1} は

$$\mathbf{V}_i^{n+1} = a_1 \mathbf{V}_i^{n+1/2} + a_2 \mathbf{V}_i^{n-1/2} + a_3 \mathbf{V}_i^{n-3/2} + a_4 \mathbf{V}_i^{n-5/2} \quad (3.34)$$

$$a_1 = 55/24, \quad a_2 = -59/24, \quad a_3 = 37/24, \quad a_4 = -9/24 \quad (3.35)$$

から求める。

3.3 有理ルンゲクッタ法 (Rational Runge Kutta method)

Wambecq によって提案された非線形のルンゲクッタ型積分法で、

$$\frac{dy}{dt'} = f(y, t') \quad (3.36)$$

のような時間に関する微分方程式においては、次式で表される。(2次精度の場合)

$$g_1 = f(y, t') \quad (3.37)$$

$$g_2 = f\left(y + \frac{\Delta t'}{2} g_1, t' + \Delta t'\right) \quad (3.38)$$

$$g_3 = 2g_1 - g_2 \quad (3.39)$$

全グリッドでの値の内積和を以下のように求め、

$$G_{11} = \sum_j (g_1, g_1) \quad (3.40)$$

$$G_{33} = \sum_j (g_3, g_3) \quad (3.41)$$

$$G_{13} = \sum_j (g_1, g_3) \quad (3.42)$$

これらを使って、 $\Delta t'$ 時間を進める。

$$y^{new} = y^{old} + \Delta t' \frac{2G_{13}g_1 - G_{11}g_3}{G_{33}} \quad (3.43)$$

この時の時間ステップ $\Delta t'$ は、シミュレーションの時間ステップ Δt とは独立であるため、必要に応じて細かくとることができる。(例 : $\Delta t' = \Delta t/4$)

第4章 粒子モデルシミュレーション 基本課題

本シミュレーションスクールでは実習課題を用意している。本来なら、宇宙空間またはチャンバー装置内でしか再現できないようなプラズマ現象を計算機内でバーチャルに実現することができ、その解析を自ら行うことにより、シミュレーションの有用性について実感していただけると幸いである。特に、粒子モデルでは、ビーム-プラズマ不安定性および衝撃波現象に関する基本課題を用意しており、各受講者はそれぞれの端末で基本課題に関するシミュレーションを実体験することができる。これらの基本課題は、非常に古典的な問題であるにもかかわらず、それぞれの現象の時空間発展はプラズマパラメータに大きく依存する。このため、観測、理論、シミュレーションを含めて現在でも非常にホットで最先端の研究テーマでもある。自習時間では、基本課題を元にした応用課題に是非取り組んでいただきたい。

4.1 電磁粒子シミュレーションで解く課題

4.1.1 ビームプラズマ不安定性

近年、衛星を用いた地球磁気圏プラズマ波動観測により様々なプラズマ波動が観測されている。これらのプラズマ波動の形成要因として考えられているもの1つにビームプラズマ不安定性がある。ビームとは、背景プラズマに対して相対速度を持ったイオンや電子の流れのことを示す。ビーム成分と背景プラズマとの相互作用は非常に古典的な問題であり、理論的には1940年代から研究されてきている。その後、計算機シミュレーションによりその線形過程および初期の非線形過程について様々な研究が行われてきた。近年では、静電孤立波の衛星観測に伴い、ビーム-プラズマ相互作用の非線形発展に関する計算機シミュレーション研究が注目を浴びている。

このような研究背景の中、本基本課題では、特に不安定性の線形発展から非線形過程にいたるプロセスに着目し、背景プラズマにビームとなる成分を加えたモ

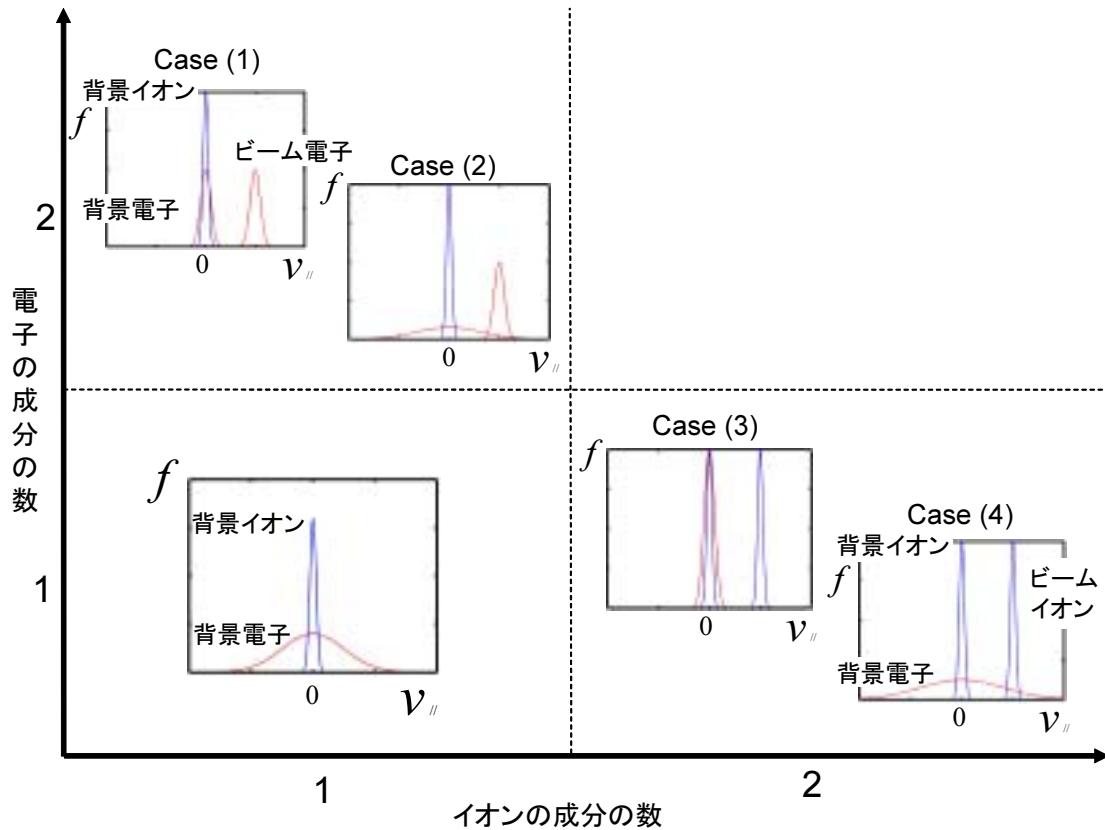


図 4.1: 電子及びイオンの速度分布とビーム不安定性

デルを用いて、計算機シミュレーション実習を行う。実際のビームプラズマ不安定性では背景プラズマとビームの熱速度、質量比、密度比またはビームの相対速度などにその発展は大きく依存する。しかし基本的には電子-電子間、電子-イオン間そしてイオン-イオン間での生じる不安定性の組み合わによりある程度理解することができる。そこで今回、基本課題として、電子またはイオンのビームが1つだけ存在する場合に生じる電子-電子間、電子-イオン間そしてイオン-イオン間の不安定性の特徴的な場合について計算機シミュレーションを行ってみる。

背景プラズマと電子ビーム

静止系において背景プラズマ(電子とイオン)が存在し、加えてビーム電子が存在する場合について考える。この時起りうる不安定性としては、(1) 背景電子-ビーム電子間の電子二流体不安定性と(2) 背景イオン-ビーム電子間のBuneman不安定性の2種類が考えられる。どちらの不安定性が支配的になるかは、各成分の熱

速度、質量比、密度比またビームの相対速度などにより決まるが、本基本課題では背景電子の熱速度にのみ注目することにする。

- Case (1) : 背景電子の温度が低い場合 (電子二流体不安定性)

背景電子の温度が低い場合、背景電子-ビーム電子間の不安定性である電子二流体不安定性が支配的である。電子二流対不安定性とは電子-電子間で相対速度を持つ場合に生じる静電的な不安定性で、各電子が自らの運動エネルギーを電場に与えより安定した速度分布に落ち着こうとして生じる。背景電子の温度が低い場合の代表的な速度分布を図に示す。図をみて分かるように背景電子の他に背景イオンも存在するが、電子の方がイオンより軽く動きやすいためにイオンより先にビーム電子と電子二流対不安定性を起し安定な状態に落ち着こうとする。課題としては、線形分散解析を予め行いどのような波数の波動が最も成長しやすいかを確認後、その波動を再現できるようなシミュレーションシステム・パラメータを選択し実際にシミュレーションを行う。シミュレーション結果を解析して、最大成長率をもつ波数、時間的な波動成長率などを理論値と比較する。

- Case (2) : 背景電子の温度が高い場合 (Buneman 不安定性)

背景電子の温度が高い場合、電子二流体不安定性は小さくなり背景イオン-ビーム電子間の Buneman 不安定性が支配的になる。Buneman 不安定性とは電子-イオン間で相対速度を持つ場合に生じる静電的な不安定性で、電流駆動型 (Current-driven) 不安定とも言われる。基本的にはイオン音波モードから静電波が成長するが、不安定性を起すイオンと電子の温度がその波の成長に関係する。すなわち、イオン温度と電子温度より決まるイオン音速がイオンの熱速度より小さい場合、イオンによるランダウ減衰が起り波の成長は妨げられる。背景電子の温度が高い場合の代表的な速度分布を図に示す。図をみて分かるように背景電子は熱速度が高く速度分布が広がっていて安定しているので背景電子-ビーム電子間の不安定性は小さい、しかし、背景イオンは熱速度が小さく、系全体から見た場合、背景イオンとビーム電子は不安定な状態にある。よって Buneman 不安定性が起こり安定な状態に落ち着こうとする。

この場合についても前のケース同様の解析を行い、シミュレーション結果の解析を行う。

背景プラズマとイオンビーム

次に、静止系において背景プラズマとして電子とイオンが存在し、加えてビームイオンが存在する場合について考える。この時は上に述べた Buneman 不安定性と背景イオン-ビームイオン間のイオン二流体不安定性の 2 種類が考えられる。ここでも背景電子の熱速度にのみ注目して、それぞれの不安定性が支配的になる 2 つの場合について計算機シミュレーションを行ってみる。

- Case (3): 背景電子の温度が低い場合 (Buneman 不安定性)

背景電子の温度が低い場合、背景電子-ビームイオン間の Buneman 不安定性が支配的である。この時の代表的な速度分布を図に示す。この場合、系全体で見た場合、背景電子、イオンそしてビームイオンのすべてが不安定な状態にある。しかし電子はイオンより軽く動きやすいためよく安定な状態に移行しやすい、よって、背景イオン-ビームイオン間の不安定性より背景電子-ビームイオン間の Buneman 不安定性の方が早く起こり安定な状態に落ち着いてしまう。

この場合についても前のケース同様の解析を行い、シミュレーション結果の解析を行う。

- Case (4): 背景電子の温度が高い場合 (イオン二流体不安定性)

次に背景電子の温度が高い場合は、Buneman 不安定性が弱まり背景イオン-ビームイオン間の不安定性であるイオン二流体不安定性が支配的となる。イオン二流体不安定性とは、イオン-イオン間で相対速度を持つ場合に生じる静電的な不安定性で、各イオンが自らの運動エネルギーを電場に与えより安定した速度分布に落ち着こうとして起る不安定性である。この場合の代表的な速度分布を図に示す。見て分かるように背景電子は熱速度が大きく速度分布が広がっており、系全体見た場合ビームイオンと背景電子の不安定性は小さい。よって背景イオンとビームイオン間のイオン二流体不安定性が一番強くなる。イオン二流体不安定性は他の 2 つの場合と違い両方イオンなので最も成長率が小さく、波の成長に時間がかかり長い計算時間を要する。

4.2 ハイブリッドシミュレーションで解く課題

本スクールでは、ハイブリッド法で解析されるプラズマ現象として、イオン二流体不安定性と Fast Mode の衝撃波を扱う。また、簡単のために空間 1 次元 (X 方向の変化のみ) の仮定の基で行う。粒子の速度は 3 成分を扱う。

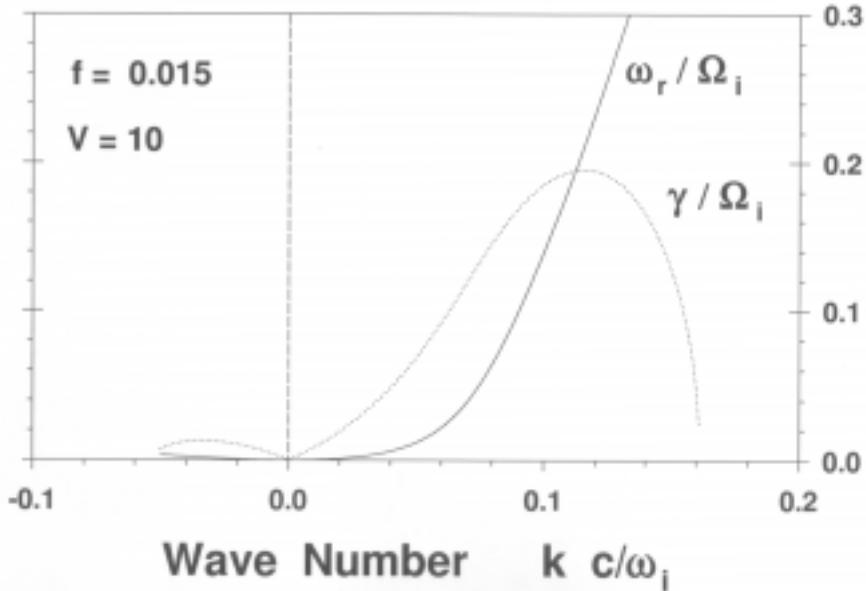


図 4.2: イオン二流体不安定性に関する分散曲線。実線が周波数、破線が成長率を表す。時間と長さは、それぞれプロトンのサイクロトロン角周波数 Ω_i とプロトンの慣性長 V_A/Ω_i で規格化してある。 Ω_i よりもゆっくりした波動で、成長率も静電的波動に比べて小さい。

4.2.1 イオン二流体不安定性

背景イオンと電子が存在する系に、イオンビームが加わる場合を考える。先の粒子コードによって解析した静電的な波動の励起に加え、図 4.2 の分散関係に見られるような、電磁的な波動も励起される。しかし、この電磁的な波動は、静電的な波動に比べ波の成長率が極端に小さいため、粒子コードを長時間走らさなければならない。昨今のコンピューターの能力では、この長時間の計算を行うことは可能だが、この現象がイオンの時間スケールで生じる現象と分かっているため、ハイブリッドコードで解析することが可能であり、また短時間で行える。宇宙空間でこのような現象が人工衛星によって直接観測される場所としては、地球の定在衝撃波 (Bow Shock) 近傍や、地球磁気圏尾部のプラズマシート境界などがある。そこでは、背景プラズマに対し、磁力線に沿った方向にイオンビームが流れている現象が観測され、同時に電磁的な波動も観測されている。

問題

- (1) 分散曲線の図で、 $k > 0$ の波 (共鳴波と呼ばれる) の方が、 $k < 0$ の波 (非共

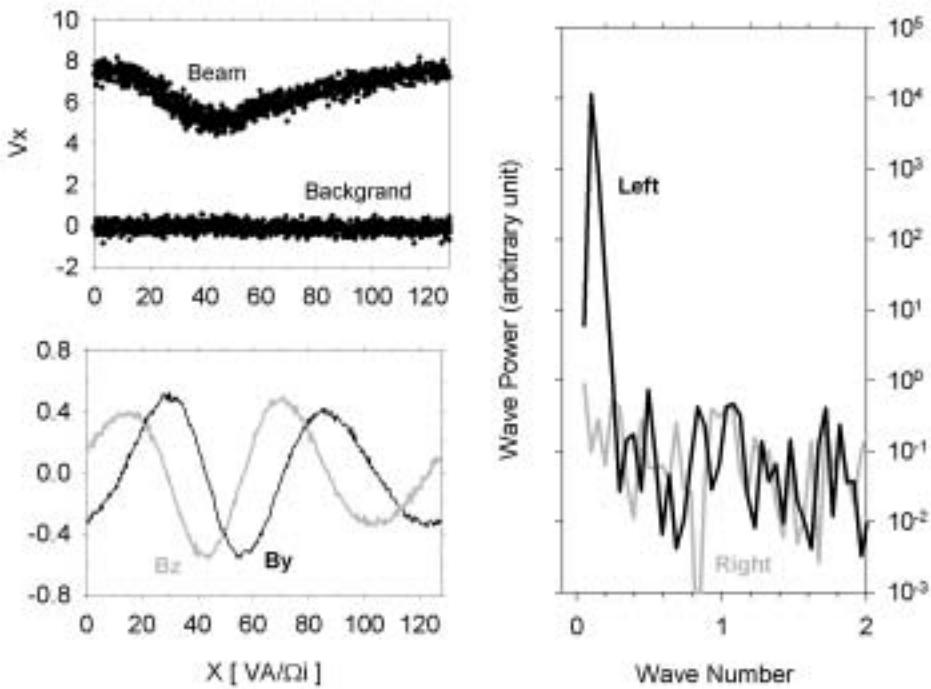


図 4.3: 波が成長してきた時点での、 $X - V_x$ 位相空間図(左上)、磁場の垂直 2 成分の空間変化図(左下)とそのスペクトル図(右)。空間的に左周りの波が励起されている。

鳴波)より成長率が大きいが、どのような時に逆転するか?

- (2) ビームの速度や密度を変えて行くと、励起される波のモードがどのように変化するか?
- (3) テスト粒子計算の時に行つた位相捕捉現象が見られるだろうか?

4.2.2 Fast Mode 衝撃波

衝撃波面での散逸現象

粒子間の衝突が無視できる宇宙空間においては、衝撃波の存在は自明ではない。なぜなら、衝撃波面での散逸現象が粒子間の衝突に起因しないからである。如何にして、運動エネルギーが熱エネルギーに変換されているのであろうか。その散

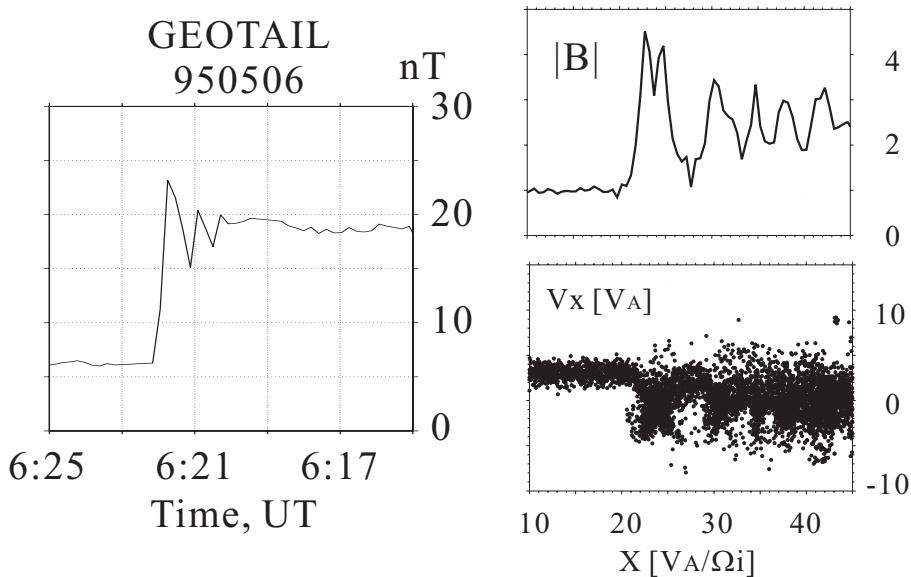


図 4.4: 人工衛星によって観測された衝撃波の例 (左: 磁場強度) とハイブリッド法で計算された衝撃波 (右上: 磁場強度、右下: 位相空間図)。

逸の様子を、シミュレーションで理解することを目標とする。

問題

- (1) Rankine-Hugoniot の関係式を使って、下流での熱量を求める。
- (2) 衝撃波の法線方向 (x 軸) と磁場の成す角 (Shock 角) を変えることにより衝撃波の性質が変わることを確認する。
- (3) 衝撃波面から、上流方向へ移動する粒子があることを確認する。
- (4) Shock 角が小さいとき (< 45 度)、上流で、イオン二流体不安定性が見られるなどを確認する。

衝撃波面での加速現象

衝撃波は、また、プラズマ粒子の加速器として働くことが良く知られている。しかし、全ての粒子を加速しているわけではない。加速される粒子とされない粒子は、何が違うのであろうか。

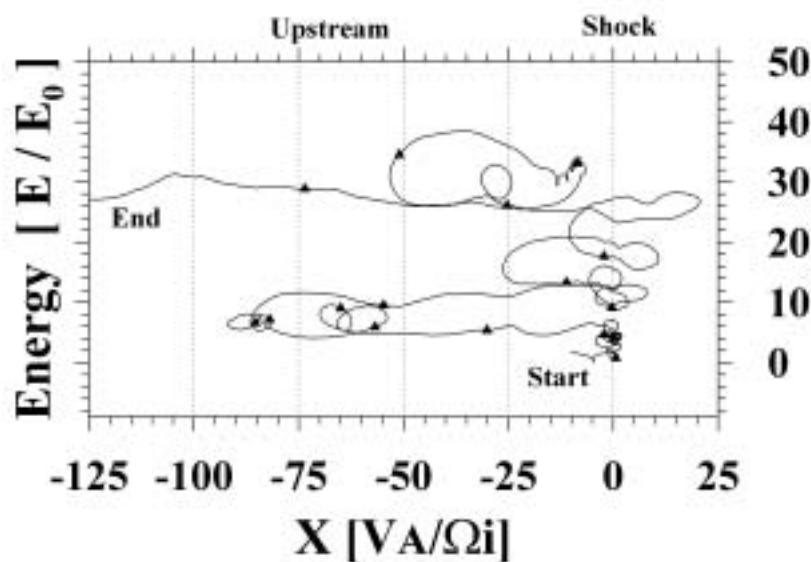


図 4.5: 準平行衝撃波で、上流からやって来た粒子が衝撃波面で止められ加速され行く様子を示す(ハイブリッド法による計算結果から)。点は、 $2\pi\Omega_i$ 時間毎に打ってある。

参考文献

- [1] Birdsall, C. K, and A. B. Langdon, *Plasma physics via computer simulation*, McCraw-Hill, 1985.
- [2] Hockney, R. W., and J. W. Eastwood, *Computer simulation using particles*, McGraw-Hill, 1981.
- [3] Matsumoto, H., and Y. Omura, *Particle simulations of electromagnetic waves and their applications to space plasmas*, *Computer simulations of space plasmas*, ed. by H. Matsumoto and T. Sato, Terra Pub. and Reidel Co., 1985.
- [4] Matsumoto, H., and Y. Omura, *Computer space plasma physics: Simulation techniques and software*, ed. by H. Matsumoto and Y. Omura, Terra Pub., 1993.
- [5] Villasenor, J. and O. Buneman, Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solvers, *Computer Physics Communication*, 69, 306-316, 1992.
- [6] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery
Numerical Recipes in C, 技術評論社、1998年
- [7] Fujimoto, M., Instabilities in the Magnetopause Velocity Shear Layer, PhD thesis, Institute of Space and Astronautical Science, Kanagawa, Japan, 1992

粒子モデルの基本実習課題に関連する参考図書も以下にあげる。

1. Nicholson, D. R., *Introduction to plasma theory*, John Wiley & Sons, 1983.
2. Melrose, D. B., *Instabilities in space and laboratory plasmas*, Cambridge Univ. Press, 1986.

付録A クーラン条件

Maxwell 方程式を空間的に中心差分、時間的にリープフロッギで解き進めるには、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。

$$\Delta x > c\Delta t \quad (\text{A.1})$$

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。

$$A(x, t) = A_0 \exp(ikx - i\omega t) \quad (\text{A.2})$$

空間的な中心差分を考えると

$$\frac{\Delta A}{\Delta x} = \frac{A(x_0 + \Delta x/2, t) - A(x_0 - \Delta x/2, t)}{\Delta x} \quad (\text{A.3})$$

$$= \frac{\exp(ik\Delta x/2) - \exp(-ik\Delta x/2)}{\Delta x} A(x_0, t) \quad (\text{A.4})$$

$$= i \frac{\sin(k\Delta x/2)}{\Delta x/2} A(x_0, t) \quad (\text{A.5})$$

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。

$$K = \frac{\sin(k\Delta x/2)}{\Delta x/2} \quad (\text{A.6})$$

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

$$\Omega = \frac{\sin(\omega\Delta t/2)}{\Delta t/2} \quad (\text{A.7})$$

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、

$$\sin^2(\omega\Delta t/2) = \left(\frac{c\Delta t}{\Delta x}\right)^2 \quad (\text{A.8})$$

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ないといけないことがある。 $c\Delta t/\Delta x = 1$ の場合、臨界安定である。

付録B マクスウェル分布を与える方法

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

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

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、

$$|P(y)dy| = |p(x)dx| \quad (\text{B.2})$$

となり、

$$P(y) = p(x) \left| \frac{dx}{dy} \right| \quad (\text{B.3})$$

と求まる。これを、2次元に拡張すれば、

$$P(y_1, y_2)dy_1dy_2 = p(x_1, x_2) \left| \frac{\partial(x_1, x_2)}{\partial(y_1, y_2)} \right| dy_1dy_2 \quad (\text{B.4})$$

となる。 $|...|$ 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、

$$f(\mathbf{v}) = \frac{1}{\pi \langle v \rangle^2} \exp\left(-\frac{v_x^2 + v_y^2}{\langle v \rangle^2}\right) \quad (\text{B.5})$$

であるから、式(B.4)のヤコビアンが、

$$\left| \frac{\partial(x_1, x_2)}{\partial(y_1, y_2)} \right| = \left[\frac{1}{\sqrt{\pi} \langle v \rangle} \exp\left(-\frac{y_1^2}{\langle v \rangle^2}\right) \right] \left[\frac{1}{\sqrt{\pi} \langle v \rangle} \exp\left(-\frac{y_2^2}{\langle v \rangle^2}\right) \right] \quad (\text{B.6})$$

となる変換関数があれば良い。

それは、

$$y_1 = V_x = \langle v \rangle \sqrt{-\ln(x_1)} \cos(2\pi x_2) \quad (\text{B.7})$$

$$y_2 = V_y = \langle v \rangle \sqrt{-\ln(x_1)} \sin(2\pi x_2) \quad (\text{B.8})$$

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(B.7,B.8)の変換により、1組の2次元ガウス分布が求まる。

プラズマ線形分散関係ソルバー **emdisp**について

羽田 亨⁽¹⁾、白石岳雄⁽²⁾、関 光弘⁽²⁾

1:九州大学大学院総合理工学研究院流体環境理工学専攻

2:九州大学大学院総合理工学府大気海洋環境システム学専攻

August 10, 2002

要旨：無衝突プラズマ中のプラズマ波動の線形分散関係を数値計算するプログラム **emdisp** の使用方法および計算の背景となる理論の概要について紹介する。このプログラムでは、プラズマに関する各種パラメータ（分布関数、イオン種数など）と波数ベクトル（の組）を入力することにより、対話型操作を通して、複素角周波数（実角周波数および線形成長率）、波動の偏波指数、波動が電磁的/静電的かを表す指数、などの出力を得ることができる。プラズマ分布関数は、ドリフト速度を持ち得るマックスウェル分布の重ね合わせとして表現する。操作の実例を、いくつかの例題を用いて解説する。なお、ここで紹介するプログラムは、「宇宙シミュレーション・ネットラボラトリーシステム開発」（科学技術振興事業団）の一部として整備が行われているものの簡約化されたバージョンである。

1 はじめに

宇宙・天体で起きている様々な興味深い現象を議論する際、これらの環境を満たす媒質である無衝突プラズマ中に、どの様な性質をもつどのような線形波動が存在し得るかを知る、つまり線形分散関係を得る、ことは極めて重要な意味を持つ。これは、議論の対象が宇宙・天体プラズマ波動である場合には勿論のこと、それ以外の場合でも、例えば衝撃波、磁気再結合過程、といった一見、線形波動とは関係のなさそうなダイナミックな物理現象においても、その核心的部分で（異常）散逸をまかなっているのがプラズマ波動を媒介とした効果的な粒子拡散であるように、多くの宇宙・天体现象において、プラズマ波動が本質的な役割を果たしているからである。さらに一般的な立場から見ても、ある物理系の性質を理解するためには、まずその定常状態を議論し、その上で系の微少擾乱に対する反応（線形応答）を求めるのが筋道であるが、これは媒質中の線形波動を求めることに他ならない。

この様に無衝突プラズマ中の線形分散関係を計算する機会は、宇宙・天体プラズマの研究に携わっている限り、かなり頻繁にあるものと思う。しかしその一方、他の数値計算コードの場合と同

様、線形分散関係を計算するプログラム（線形分散関係ソルバー）の汎用バージョンは、少なくとも筆者達の知る限りにおいては、手軽に使える形では世の中に出回っていないようである（実際、過去数年の間に筆者らが複数の研究グループから、我々の使用している線形分散関係ソルバーを使いたいとの依頼があった）。大きな研究組織では、計算機ライブラリーの一部としてプログラムが整備されているところも多くあるのだろうが、宇宙・天体研究者の多くがそうであるように、スタッフ数が数人程度の小さな研究グループでは、むしろ小回りのきくプログラムの方が使い勝手がよいであろう。本稿で紹介するプログラム `emdisp` は、分散関係ソルバーのなかでは必要最小限の機能のみを備える基本的なものだが、今回のワークショップのように、とりあえず数値シミュレーションの結果と照合したい、というような目的には、十分役に立つはずである。また、必要に応じて新しい問題に適応できるよう、プログラムに修正・変更を逐次加えていくことも可能である（利用者からのフィードバックを期待したい）。以下、必要最低限の計算の背景の説明に続き、与えられた条件のプラズマの中に存在する波動の線形分散関係を、具体的な題材を例にとって説明する。

2 計算の背景

ここでは、各種物理量の定義と物理的意味を明確にすることも兼ねて、`emdisp` を使用する際に必要と思われる最低限の理論的なバックグラウンドとして、線形分散関係式を求める過程をごく簡単に振り返っておく。詳細は多くのプラズマ物理の教科書に解説してある（例えば [1], [2], [3]）のでこれらを参照してほしい。

2.1 線形分散関係の導出

プラズマ波動の線形分散関係式を導くために使用する式は、ヴラソフ方程式

$$\frac{\partial f_\sigma}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_\sigma + \frac{q_\sigma}{m_\sigma} (\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_\sigma}{\partial \mathbf{v}} = 0 \quad (1)$$

およびマックスウェルの方程式

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{4\pi \mathbf{j}}{c} = \nabla \times \mathbf{B} \quad , \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi \rho \quad , \quad (2a, 2b)$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E} \quad , \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (3a, 3b)$$

である。ここに、 $f_\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ はプラズマの分布関数、 σ は粒子種、その他の記号は標準的なものである。単位系はガウス単位系を用いている。

3 次元空間内に一様にひろがるプラズマを考え（0 次量）ここに微少擾乱（1 次量）を与える。2 次以降のオーダー量は無視できると仮定し（線形近似）さらに 1 次の擾乱を、空間・時間に關

してフーリエ変換する ($\partial/\partial t \rightarrow -i\omega$, $\nabla \rightarrow ik$)。ここに、 $\omega = \omega_r + i\gamma$ は波動の複素角周波数、 ω_r は実角周波数、 γ は線形成長率(正が不安定) k は波数ベクトルである。

これらの操作により、マックスウェルの方程式 (2a) と (3a) は、屈折率ベクトル $n = ck/\omega$ を用いて

$$\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{E}_1) + \mathbf{E}_1 = -\frac{4\pi i}{\omega} \mathbf{j}_1 \quad (4)$$

と書ける。ただし磁場の摂動は、 $B_1 = n \times E_1$ によって電場の摂動と関係づけられている。式 (4) の右辺、つまり電流が、電場 E_1 の関数として書ければ式は閉じ、分散関係式が得られる。(4)を導くにあたって (2b), (3b) を使わなくてすんだのは、 $\omega \neq 0$ の波動を考える場合には、(2a), (3a) と電荷保存の式が (2b) と (3b) を含んでいるからである。 $\omega = 0$ の波動(構造)を考える場合には注意が必要である(例えば エントロピー波)。

一方、ヴラソフ方程式を線形化し、分布関数の1次の摂動を粒子の軌道に沿った積分としてあらわすと

$$f_{\sigma 1} = \frac{-q_{\sigma}}{m_{\sigma}} \int_{-\infty}^t (\mathbf{E}_1 + \frac{1}{\omega} \mathbf{v} \times (\mathbf{k} \times \mathbf{E}_1)) \cdot \frac{\partial f_{\sigma 0}}{\partial \mathbf{v}} dt \quad (5)$$

となるが、この積分を実行するためには、ゼロ次オーダーでの粒子の軌道を指定する必要がある。一様・定常な磁場のもとでは、粒子はスパイラル軌道をとるから、これを用いて実際に (5) を評価することができる(ランダウの積分)。それ以外の軌道の場合にでも $f_{\sigma 1}$ が計算できる場合がある。また数値的には、一般的なゼロ次オーダー軌道に対して (5) の積分が計算でき、例えばニュートラルシート近傍でのテアリング不安定性の解析に応用されている。

分布関数の1次摂動がわかれば、電流の1次摂動は

$$\mathbf{j}_1 = \sum_{\sigma} q_{\sigma} \int f_{\sigma 1} d\mathbf{v} \equiv \sigma \cdot \mathbf{E}_1 \quad (6)$$

により求められる。ここに σ は電気伝導度テンソルである。線形波動に対するプラズマの効果は、すべてこの σ の中に集約されている。実際、(6) を(フーリエ空間でなく)実空間で書けば、与えられた摂動電場に対する、非局所的かつ時間の遅れをともなうプラズマの線形応答が摂動電流を作ることを示す畳み込み積分となり、直感的である。プラズマの応答 (6) を用いて (4) を書き直せば、

$$\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}_1 \equiv \mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{E}_1) + (1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma) \mathbf{E}_1 = 0 \quad (7)$$

となり、これが E_1 に関して自明でない解を持つ条件、

$$\det(\mathbf{D}) \equiv D(\omega, \mathbf{k}) = 0 \quad (8)$$

が線形分散関係である。ここに、 D は線形分散関係テンソルであり、また (7) にあらわれる $\epsilon \equiv 1 + 4\pi i \sigma / \omega$ を誘電率テンソルと呼ぶ。

2.2 0次の分布関数

線形分散関係を解くためには、プラズマの0次の分布関数を指定する必要がある。人工衛星によって観測された分布関数や、数値実験により得られた分布関数は、任意の形をしているが、これを(5)の積分が評価しやすい関数の重ね合わせとして表わすのが、分布関数の標準的な表現方法である。`emdisp`では分布関数を、ドリフトと温度異方性を持つマックスウェル分布の重ね合わせとして書く。

$$f_{\sigma 0}(v_{\parallel}, v_{\perp}) = \sum_j f_{\sigma 0,j} = \sum_j \frac{n_{\sigma j}}{(2\pi)^{3/2} a_{\sigma \parallel} a_{\sigma \perp}^2} \exp\left(-\frac{(v_{\parallel} - u_{\sigma})^2}{2a_{\sigma \parallel}^2} - \frac{v_{\perp}^2}{2a_{\sigma \perp}^2}\right) \quad (9a)$$

ここに、 $n_{\sigma j}$ は密度、 $a_{\sigma \parallel}^2 = T_{\parallel}/m_{\sigma}$ と $a_{\sigma \perp}^2 = T_{\perp}/m_{\sigma}$ は磁力線に平行および垂直方向の熱速度の2乗、 $u_{\sigma j}$ は沿磁力線方向のドリフト速度である。マックスウェル分布の線形重ね合わせとして0次分布関数を表現することの利点は、性質がよくわかっていて数値計算の比較的容易な「プラズマ分散関数」を用いて線形分散関係を評価することができるからである。

上式の温度が低い場合の極限として、冷たいプラズマの分布関数、

$$f_{\sigma 0,j} = \frac{n_{\sigma j}}{\pi v_{\perp}} \delta(v_{\parallel} - u_{\sigma}) \delta(v_{\perp}) \quad (9b)$$

および、冷たいリング分布、

$$f_{\sigma 0,j} = \frac{n_{\sigma j}}{\pi v_{\perp}} \delta(v_{\parallel} - u_{\sigma \parallel}) \delta(v_{\perp} - u_{\sigma \perp}) \quad (9c)$$

も扱うことができる（但し、夏の学校バージョンではサポートしていない）。

2.3 計算出力

入力パラメータを与え、与えられた波数ベクトル \mathbf{k} に対して線形分散関係(8)を解けば、解として ω が得られ、実周波数および線形成長率が求められる。一方、ひとたび ω が求められると、(7)の固有ベクトルとして、 \mathbf{E}_1 （の方向）が定まるが、これを用いて波動の固有の性質をあらわす物理量を計算することができる。

いま、一般性を失うことなく、磁場の0次成分が z 軸に平行であり、 \mathbf{k} が $x-z$ 平面に含まれるように座標系をとり、求められた \mathbf{E}_1 から以下の量を評価する。

- 偏波 (Polarization) : $P = iE_{1,x}/E_{1,y}$
- 電磁静電指数 (EM/ES index) : $S = |\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}_1 / \mathbf{k} \times \mathbf{E}_1|$

偏波はその定義からわかるように、 \mathbf{E}_1 の回転の向きを表している。磁力線のまわりを、電子と同じ向きにまわるか、陽子と同じ向きにまわるか、をそれぞれ「右回り」とおよび「左回り」と定義する。ここで「まわる」と言っているのは、ある空間上の点で観測したベクトルが時間的にど

のように回転するか、のことである。(一方、例えば真空中の光の伝搬に対しては、電子も陽子も関与しないから磁力線の方向に対して定義するのは無意味であるため、波動の伝搬方向に対する電場の回転方向(波動が進むにつれて右ネジの方向に電場が回転するか、あるいは左ネジの方向か)で定義することが普通である)

また、電磁静電指数を、上の様に定義した。定義の分子および分母をそれぞれゼロとした場合が、純粋な電磁波($\mathbf{k} \perp \mathbf{E}_1$)および純粋な静電波($\mathbf{k} \parallel \mathbf{E}_1$)に対応している。したがって、波動が静電的(例えば音波、プラズマ振動)なほど S は1を越えて大きな値をとり、波動が電磁的であるほど(例えば平行伝搬アルフヴェン波) S は0に近い値をとる。なお静電波の場合、磁場摂動は $\mathbf{B}_1 = \mathbf{n} \times \mathbf{E}_1 = 0$ であり、また線形分散関係式(7)は、 $\epsilon \cdot \mathbf{E}_1 = 0$ と書ける。さらに $\mathbf{k} \parallel \mathbf{E}_1$ をもちいてこれを書き直すと静電波の線形分散関係、 $\epsilon_{es}(\omega, \mathbf{k}) \equiv \mathbf{k} \cdot \epsilon \cdot \mathbf{k} = 0$ が得られる。このスカラ方程式は(7)の一部分であり、したがって **emdisp** にも含まれている。

3 計算の手順

3.1 計算手順の概略

与えられたプラズマ条件のもとでの線形分散関係を求めるためには、以下の手続きを踏む。

Step 1. プラズマのパラメータ指定

プラズマに関する情報を粒子種ごとに、分布関数をマックスウェル分布(9a)で表現する際のパラメータの組(密度、ドリフト速度など)として与え、また磁場の強さをプラズマ周波数とサイクロトロン周波数の比として与える。これにより、線形分散関係(8)の具体的な表式が決まる。

Step 2. シード解の探索

与えられた波数ベクトル \mathbf{k} に対して、これを満たす ω を見つけることが目標であるが、線形分散関係(8)は ω に関して著しく非線形なので、解を見つけるための一般的な方法は存在しない。本プログラムでは、期待される解が存在する領域を指定し、 $D(\omega, \mathbf{k})$ の「地図」を描く、あるいはこの領域内でのトライアル・アンド・エラーによる方法により、まずシード解(波数の組に対して解を求めていくための元になる解)を見つける。

Step 3. 分散関係を求める

シード解が見つかれば、それを起点として外挿を繰り返すことにより、 ω と \mathbf{k} の組を比較的効率よく求めていくことができる。この際、偏波、電磁静電指数、計算誤差も評価する。

以下、実際に **emdisp** を走らせながら、各手続きを解説する。

3.2 Step 1. プラズマのパラメータ指定

プラズマのパラメータは、データセットを作成し、その中で namelist 文を用いて指定する。例えば、データセット data1 を以下のように作る。

```
cat data1
&input

ns  = 3,
pc  = 1.0000d+04,

ds  = 0.9900d-00,   1.0000d-00,   0.0100d-00,
el  = 1.0000d+00,  -1.0000d+00,   1.0000d-00,
rm  = 1.8360d+03,   1.0000d+00,   1.8360d+03,
aba = 0.2200d+00,   0.5400d+00,   0.2200d+00,
abe = 0.2200d+00,   0.5400d+00,   0.2200d+00,
ud  = 0.0000d+00,   0.0000d+00,   1.0000d+01,

&end
```

ここでは、電子、プロトン、およびプロトンのビームから構成されるプラズマを考えている。使われているパラメータは、以下の通りである。

変数	: 意味	規格化
ns	: マックスウェル分布の数	---
pc	: 規格化定数	---
ds(i)	: 数密度	ds(i) の総和=1
el(i)	: 電荷	素電荷 = 1
rm(i)	: 質量	電子 = 1
aba(i)	: 平行熱速度	c / sqrt(pc)
abe(i)	: 垂直熱速度	c / sqrt(pc)
ud(i)	: ドリフト速度	c / sqrt(pc)

上の例では、プラズマは 3 つのマックスウェル分布の重ね合わせ(プロトン、電子、プロトンビーム)として表現しているので、ns=3 である。ns は 20 以下とする。分布数 ns と、規格化定数 pc (詳細は後述) のあとにならんでいるのが、各マックスウェル分布(添字 i で表すことにする)を特徴づけるパラメータ群である。数密度 ds(i) は、i についての総和が 1 となるように指定する。電荷 el(i) は、例えば陽子ならば 1 、電子ならば-1 である。これらの 2 つに対して、プラズマの中性条件、つまり $ds(i)*el(i)$ の総和が 0 となるようにする。但し、パラメータ入力時の

数値誤差のため、この値が厳密に 0 になるとは限らないので、プログラム内部で、最も数密度の大きい粒子種の数密度を調整することで、中性条件を満たすようにしている。質量 $rm(i)$ は、電子を 1 とし、(現実の) 陽子ならば 1836、あるいは計算機実験で使った値を指定すればよい。平行熱速度 $aba(i)$ 、垂直熱速度 $abe(i)$ 、およびドリフト速度 $ud(i)$ は、(9a) で定義している。

*変数の規格化について

線形分散関係の計算に限らず、計算はなるべく無次元量を用いて行った方が効率も、見通しもよい。しかし、プログラムにデータを渡す際に、少なくとも周波数と速度(つまり時間と空間)をどのように規格化しているか、を指定する必要がある。例えば、時間は必ず電子のサイクロトロン角周波数、速度は光速を用いる、と決めておけば簡単であるが、実際にはプロトンの時間スケールや MHD 波動の速度スケールなど、指定するパラメータの値が余りに大きくなったり小さくなったりすることを避けるために、emdisp では以下のように変数の規格化を行っている。

- ・時間は、データを入力する際の、マックスウェル分布の最初の列の粒子種のサイクロトロン角周波数を基準として、これを用いて規格化する。以下、これを Ω_0 とする。
- ・空間は、考えている問題に都合のよい任意の長さを基準とする。これを L_0 とする。
- ・上の 2 つにより、速度スケールは、 $L_0\Omega_0$ で規格化される。
- ・規格化定数 $PC = c^2/L_0^2\Omega_0^2$ と指定する。

例えば、 Ω_0 としてプロトンのサイクロトロン角周波数 Ω_i を選び、 L_0 として V_A/Ω_i (V_A はアルフヴェン速度) を選ぶと、 PC の値は

$$\frac{c^2}{V_A^2} = \frac{\omega_i^2}{\Omega_i^2}(1 + \mu) \sim \frac{\omega_i^2}{\Omega_i^2} \quad (10)$$

となり (ω_i はプロトンプラズマ角周波数、 $\mu = m_e/m_i$ はプロトンと電子の質量比) また、 Ω_0 として電子のサイクロトロン角周波数 Ω_e 、 L_0 として電子の慣性長 c/ω_e を選ぶと、 PC の値は

$$\frac{c^2}{L_0^2\Omega_e^2} = \frac{\omega_e^2}{\Omega_e^2} \quad (11)$$

となる。実際には、考えている現象が MHD スケールに近いか、電子スケールに近いかを見極めて、上の 2 つのどちらかを選んでおけば良い。

上の入力データを用いて、実際にプログラムを走らせてみる。端末から、

```
./emdi817.exe
```

と入力すると(プログラム名は変更になっている可能性あり)

Step 1: Input plasma parameters

Input the dataset name

と聞いてくるので、先ほどのデータセット名

data1

を入力する。すると、以下の表が表示されるはずである。

```
new ds(1)= 0.990000D+00
```

```
# of species          3
```

```
pc                  0.100000D+05
```

species #	1	2	3
density	0.990000D+00	0.100000D+01	0.100000D-01
el charge	0.100000D+01	-0.100000D+01	0.100000D+01
mass	0.183600D+04	0.100000D+01	0.183600D+04
para thml vel	0.333300D+00	0.222600D+02	0.331600D+01
perp thml vel	0.333300D+00	0.222600D+02	0.331600D+01
drift vel	0.000000D+00	0.000000D+00	0.100000D+02
cycl freq	0.100000D+01	-0.183600D+04	0.100000D+01
plsm freq **2	0.100000D+05	0.185455D+08	0.101010D+03
para beta	0.222178D+00	0.545221D+00	0.222139D+00
perp beta	0.222178D+00	0.545221D+00	0.222139D+00
larmor radius	0.333300D+00	0.121242D-01	0.331600D+01

一番上の行は、中性条件に合うように、数密度の調整を（表示されていない行に対して）行った結果である。以下、入力されたパラメータのエコーが続き、最後の 4 行は、サイクロトロン角周波数、プラズマ角周波数、平行、垂直方向のベータ値、およびラーマ半径である。

3.3 Step 2. シード解の探索

前節までで、分散方程式 (8) の具体的な関数が定まったので、次にこれを、与えられた k に対して解かなければならない。前に述べたように、まずシード解をもとめ、これをもとにして外挿により (k, ω) の組を計算していく方法をとる。

分散方程式 (8) は、実際には次の 2 つの式からなる連立方程式である。

$$D_r(\omega, \mathbf{k}) = 0 \quad ; \quad D_i(\omega, \mathbf{k}) = 0 \quad (12a, b)$$

ここに、 D_r 、 D_i はそれぞれ D の実数部、虚数部である。解を確実に探すためには、 ω 複素平面上で、 $D_r = 0$ の曲線と $D_i = 0$ の曲線を描き、これらの交点を求めればよい。同じことであるが、 D_r と D_i のそれぞれの正負に応じて、 ω 平面を 4 通りに「色分け」し、4 色が集まるところを探してもよい。関数 D が ω に関して正則であること（例えば $|\omega|$ は D に含まれない）等の性質をうまく利用して、シード解を効率よく見つけることができる。（夏の学校バージョンでは、この機能は省略している）

しかし、高速の計算機が身近に使える今日では、上の方法よりもむしろトライアル・アンド・エラー（もぐらたたき）によって、力まかせでシード解を探すほうが効率がよいようである。これは、解があると推測される ω の領域内のランダムに選んだ点を起点として、逐次近似（ニュートン法など）により、点を移動させ、解に収束させる、というものである。多くの場合、点は領域内にとどまらず、遠くに発散してしまうが、シード解に収束する場合もある。以下、例の続きを示す。

Step 2: find seed root

```
Input wkk (=wave number) and wth (=prop angle)
.1,.1
```

シード解を見つける際の、波数ベクトルを入力している。 wkk は波数の絶対値 ($|\mathbf{k}| = k$)、 wth は \mathbf{k} と定磁場とのなす角度 (θ) で、単位は度である。

```
Specify the frequency domain for the seed roots.
Input real(o1), real(o2), imag(o1), imag(o2)
0,1,-.02,.1
```

シード解を探す $\omega = \omega_r + i\gamma$ の領域を、 $real(o1) < \omega_r < real(o2)$ 、 $imag(o1) < \gamma < imag(o2)$ と指定している。

注意： $imag(o1)$ 、 $imag(o2)$ を負で、とても小さい値にすると、強減衰モードが多数現れ、計算が困難になることがある（プラズマ粒子の数だけ波動モードの自由度もある！）。

多少の時間経過の後、シード解が表示される。

```
... now searching the roots.
```

10 root(s) are found

rt#	real w	imag w	residue	iter	ityr

1	-0.200970D+00	-0.880320D-01	0.69349D-14	83	121
2	-0.126941D+00	-0.232688D-08	0.78023D-14	33	4
3	-0.832901D-01	-0.175863D-01	0.56708D-13	21	2
4	0.832902D-01	-0.175856D-01	0.13754D-13	23	1
5	0.116475D+00	-0.800347D-01	0.26313D-11	26	36
6	0.118361D+00	0.105746D-07	0.46397D-14	37	5
7	0.125838D+00	0.111404D+00	0.22495D-14	31	3
8	0.264957D+00	-0.247404D+00	0.10834D-11	68	27
9	0.544976D+00	-0.444636D+00	0.13168D-09	72	28
10	0.846275D+00	-0.131343D+00	0.75697D-11	34	26

上の例では、10個のシード解が見つかった。表の左側より、根の番号、根の実・虚部、計算誤差($=|D(\omega, \mathbf{k})|$)である(右の2つはイテレーションに関連した情報を与えている)。これらのシード解をざっと見ると、根番号=7が $\gamma > 0$ の不安定モード、また根番号=2と6が減衰率の小さなモードを与えていることがわかる。

3.4 Step 3. 分散関係を求める

上に引き続いて、正の成長率を持つ7番目の根について、分散関係を求めることにしよう。

```
Step 3: computation mode ?
1: vary k, fix theta / 2: fix k, var theta
0: back to previous step / 999: end
1
key in the root number for tracing
7
Input wkk1, wkk2, nkk
0.01,2,50
```

emdispでは、分散関係としては、(1) θ を固定しておき、 k を変化させる、(2) k を固定しておき、 θ を変化させる、の2つの計算をするようになっている。上の例では、まず(1)を選択する。

次に、先のステップで求めたシード解の表の中の、どの解について計算を行うか、を指定する。

今の場合 7 を入力する。

最後に、変化させる k の範囲 ($wkk1 < k < wkk2$) と、計算する回数 (nkk) を指定する。

すると、結果が出力される（印刷できるように有効数字をおとして表示している）。

```
1 0.0100 0.1000 -0.0314 -0.0000 0.0000 -1.0000 0.0012 17
2 0.0506 0.1000 0.0168 0.0903 0.0000 1.0000 0.0012 13
3 0.0912 0.1000 0.1066 0.1154 0.0000 1.0000 0.0012 5
4 0.1318 0.1000 0.1842 0.0883 0.0000 1.0000 0.0012 7
5 0.1724 0.1000 0.2391 0.0588 0.0000 1.0000 0.0012 9
6 0.2131 0.1000 0.2850 0.0386 0.0000 1.0000 0.0012 7
7 0.2537 0.1000 0.3303 0.0263 0.0000 1.0000 0.0012 7
```

（以下省略）

左から順に、番号、 k 、 θ 、 ω_r 、 γ 、誤差 ($|D|$)、偏波指数（2.3章参照）、電磁静電指数（2.3章参照）、イテレーション数、である。計算結果は、データセット 'vary-k.txt' に保存される。

次に、伝搬角 θ に対する依存性を調べよう。

Step 3: computation mode ?

```
1: vary k, fix theta / 2: fix k, var theta
0: back to previous step / 999: end
```

2

key in the root number for tracing

7

Input wth1, wth2, nth

.1,60,50

```
1 0.1000 0.1000 0.1258 0.1114 0.0000 1.0000 0.0012 0
2 0.1000 1.3222 0.1258 0.1114 0.0000 0.9995 0.0164 3
3 0.1000 2.5456 0.1256 0.1114 0.0000 0.9980 0.0316 3
4 0.1000 3.7671 0.1254 0.1114 0.0000 0.9957 0.0469 3
5 0.1000 4.9900 0.1251 0.1114 0.0000 0.9925 0.0621 3
6 0.1000 6.2125 0.1247 0.1114 0.0000 0.9883 0.0774 3
7 0.1000 7.4358 0.1242 0.1114 0.0000 0.9833 0.0928 3
```

今度は、(2) を選び、同じ解 (=7) を選択し、そして伝搬角の範囲($wth1 < \theta < wth2$)と計算数(nth)を指定すると、先ほどと同様に結果の表が出力され、また計算結果はデータセット'vary-th.txt'に保存される。

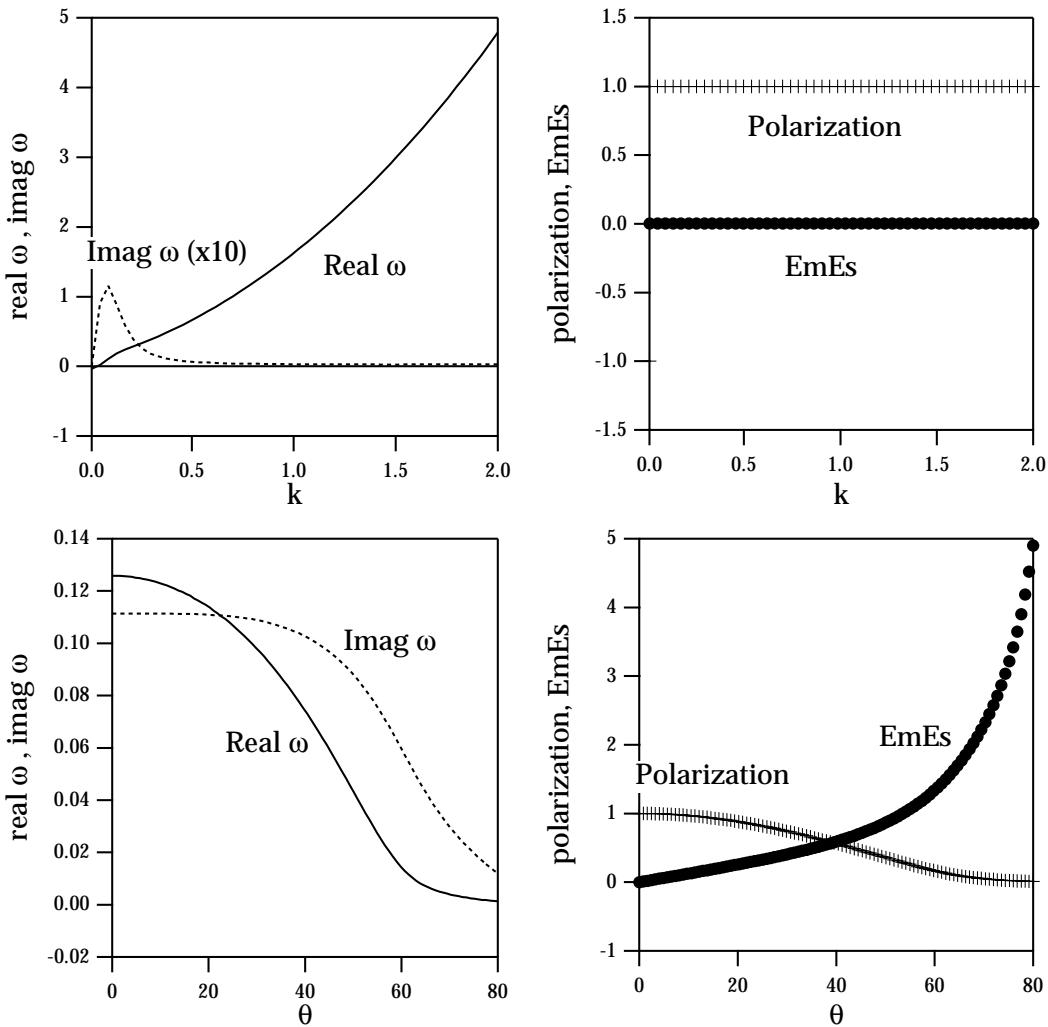


図 1: 計算結果のグラフ。上段は k に対する依存性 ($\theta = 0.1$)、下段は θ に対する依存性 ($k = 0.1$)、また左側と右側にそれぞれ複素角周波数、偏波指数と電磁静電指数をプロットしている。

4 終わりに：WEB 公開版との相違

ここで紹介したプログラムは、「宇宙シミュレーション・ネットラボラトリーシステム開発」(科学技術振興事業団)の一部として WEB 上での公開を目指して整備が行われているものを、今回の宇宙・天体プラズマ夏の学校での使用のために準備したバージョンである。WEB 公開バージョンには、ここで紹介した機能の他に以下の項目を追加する予定である。

- ・マックスウェル分布以外に、冷たいプラズマ、リング・プラズマなどの分布関数の指定。

- ・トライアル・アンド・エラーによる方法に加え、複素角周波数平面でのマップを描いて効率よくシード解を見つけるルーチン。
- ・WEB ページ上の入出力。
- ・特に、WEB 上で、結果のグラフ出力。

その他、機能の強化、使い勝手の向上をはかっていきたいと考えている。ご意見、ご要望、その他何でも感じたことがあれば、ご連絡いただきたい。

参考文献

- [1] Ichimaru, S., *Basic Principles of Plasma Physics: A Statistical Approach*, Benjamin/Cummings Pub. Co., 1973.
- [2] Akhiezer, A. I., I. A. Akhiezer, R. V. Polovin, A. G. Sitenko, and K. N. Stepanov, *Plasma Electrodynamics, Vol. I. Linear Theory*, Pergamon Press, 1975.
- [3] Miyamoto, K., *Plasma physics for nuclear fusion*, The M.I.T. Press, 1976.

PocketPOM 1D version 1.0

A Pocket size tool
for Plasma particle simulations
via Object oriented Methodology
(1-Dimensional version)

利用の手引

POM 開発グループ

愛媛大学工学部情報工学科応用情報工学講座

(科学技術振興事業団計算科学技術活用型特定研究開発推進事業)

目 次

1	はじめに	1
1.1	POM の背景	1
1.2	PocketPOM の構成	1
1.3	PocketPOM で用いられているリソースと動作環境	1
1.4	PocketPOM の背景と開発履歴	1
1.5	PocketPOM 共同開発について	1
1.6	PocketPOM 1D version1.0 の再配布について	2
2	PocketPOM 1D の使い方	2
2.1	実行準備	2
2.2	メインダイアログ	3
2.3	パラメータ設定	3
2.3.1	基本パラメータ	3
2.3.2	境界条件	3
2.4	ジョブ実行	3
2.5	グラフ編集	4

1 はじめに

1.1 POM の背景

POM (Plasma particle simulation code via Object oriented Methodology) は、オブジェクト指向開発設計技法により開発されたプラズマ粒子シミュレーションコードです [1]。2000 年より、愛媛大学工学部情報工学科を中心として、国立極地研究所、京都大学宇宙電波科学研究所、宇宙開発事業団などのプラズマ粒子コード研究者が集まって、研究開発を進めています。

PocketPOM は、POM のサブセットのひとつとして、WindowsOS 上で動作する POM コードとして開発されてきました。Pocket (気軽に) 使える電卓的プラズマ粒子コードとして、小規模な計算に利用されるツールです。近年のパーソナルコンピュータ (PC) の高速化に伴い、PocketPOM の計算処理速度は、簡単な計算を行うためだけであれば、十分実用に耐えるものになりました。

1.2 PocketPOM の構成

PocketPOM は、1.4 で示すように、

- PocketPOM 1D
- PocketPOM 2D

の異なるバージョンが、独立に開発されています。本手引きでは、PocketPOM 1D について説明します。

1.3 PocketPOM で用いられているリソースと動作環境

PocketPOM は、開発環境として Microsoft 社の Visual Studio バージョン 6、データ表示ライブラリとして Quinn-Curtis 社 [2] の GCL ライブラリ [3] が用いられています¹。

動作環境としては、Windows98 SE、Windows2000、WindowsXP Professional での動作を確認しています。その他の WindowsOS でも動作すると思われます。

ハードウェア用件は、特にありません。しかし、多数のプラズマ粒子の運動を処理する場合には、CPU、主記憶容量などは、高速・大容量であることが望されます。

1.4 PocketPOM の背景と開発履歴

PocketPOM 1D は、2001 年より、愛媛大学工学部情報工学科応用情報工学講座において開発されてきました。PocketPOM 1D は、京都大学宇宙電波科学研究所で開発されてきた KEMPO コード (Kyoto university ElectroMagnetic Particle cOde) をオブジェクト指向により再設計・実装した POM コード [1] をベースにしています。

PocketPOM 2D は、2001 年より開発が始まり、現在に至ります。PocketPOM 2D は、シミュレーションコードとしてよりも、シミュレーション結果の解析環境としての開発が先行しています。2002 年 8 月現在、シミュレーション機能と解析機能の融合を目指して、研究開発が進められています [4]。PocketPOM 2D は、上記の KEMPO コードと、同じく京都大学宇宙電波科学研究所で開発されてきたハイブリッドコードとの融合を目指しています。特に、ハイブリッドコードは、並列化による高速計算が実現されており [5]、並列化オブジェクト指向ハイブリッドコードの PocketPOM への導入も進められています。

PocketPOM は、Windows という個人向け環境での開発ですが、それと平行して、WWW 上からプラズマ粒子シミュレーションを行う問題解決環境の研究 [6] も、愛媛大学工学部情報工学科応用情報工学講座において進められています。

1.5 PocketPOM 共同開発について

POM プロジェクトでは、共同研究者・共同開発者（学生でもかまいません）を隨時募集しています。シミュレーションコード開発、オブジェクト指向設計開発、ビジュアルプログラミング、

¹なお、これらは、今後の開発において、変更の可能性があります。



図 1: PocketPOM 1D 展開ファイル

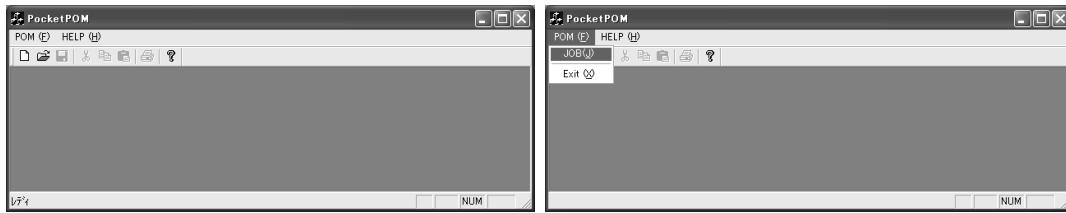


図 2: PocketPOM 1D メインダイアログ

ネットワークシステム構築など、興味のある分野でのご参加をお待ちしています。愛媛大学工学部情報工学科の村田まで、電子メールでご連絡ください [7]。

POMについての情報は、POM ホームページ [8] で公開しています。また、POM 開発の情報交換は、POM メーリングリスト [9] で行っています。

1.6 PocketPOM 1D version1.0 の再配布について

PocketPOM 1D version 1.0 は、科学技術振興事業団 計算科学技術活用型特定研究開発推進事業での成果です。著作権等については、本事業の規則に準じます。また、PocketPOM 1D の実行ファイル、DLL ファイル、マニュアルについては、その際配布を禁じます。

2 PocketPOM 1D の使い方

2.1 実行準備

PocketPOM 1D の動作環境は、1.3 に述べたとおりです。PocketPOM 1D は、自己解凍形式になっており、展開すると PocketPOM.exe と、複数の DLL ファイル (MFC42D.DLL, MFC042D.DLL, MSVCIRTD.DLL, MSVCRTD.DLL, Wct32dr3.dll, Wct32fr3.dll, WRT32DR3.DLL) が解凍されます。PocketPOM.exe を、これらの DLL とおなじフォルダ (ディレクトリ) で実行すると、PocketPOM 1D が起動します。

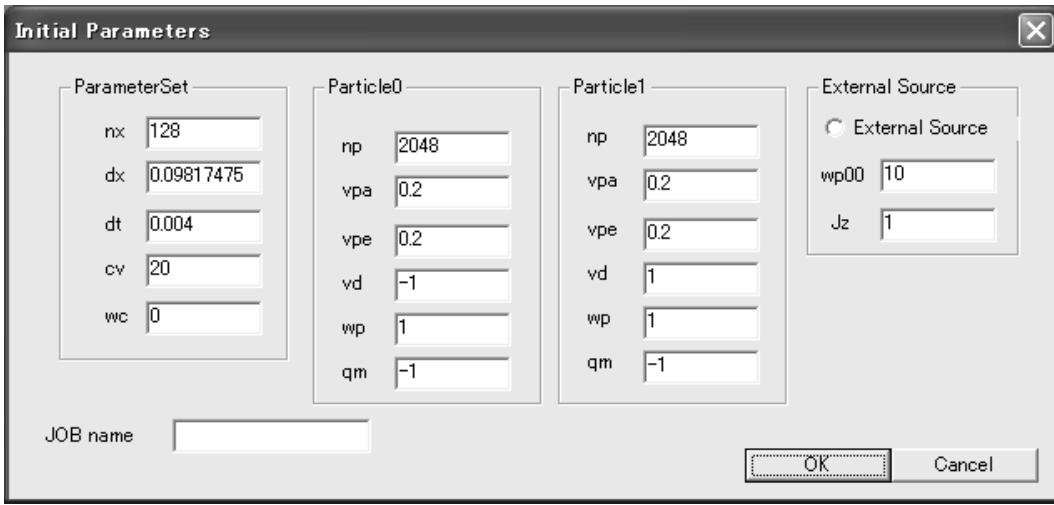


図 3: パラメータ設定

2.2 メインダイアログ

図 2 は、PocketPOM 1D を起動したメインウインドウです。メニューには、POM と HELP だけが表示されます。PocketPOM 1D の実行には、図 2 で示すように、メインダイアログのメニューから POM⇒JOB を選択します。

2.3 パラメータ設定

2.3.1 基本パラメータ

次に、パラメータダイアログが開きますので、シミュレーションを行うパラメータを選択します。PocketPOM 1D version 1.0 では、2 種類の粒子のみを取り扱うことができます²。

ParameterSet ボックスでは、nx でグリッド数、dx でグリッド幅、dt で時間ステップ幅、cv で光速、wc で電子サイクロトロン周波数を設定します。

Particle0 では、1 番目の粒子のパラメータを設定します。np は粒子数、vpa は磁場平行方向の熱速度、vpe は磁場垂直方向の熱速度、vd は磁場並行方向のドリフト速度、wp はプラズマ周波数、qm は電荷と質量の比を与えます。Particle1 では、同様のパラメータを、2 番目の粒子に対して与えます。なお、Job name には何も入れる必要はありません。

2.3.2 境界条件

External Source では、外部境界条件を設定します。チェックを入れることにより、OPEN 境界条件を実現することができます。(チェックがない場合は、周期境界条件が採用されています。) POM コードは、オブジェクト指向により設計されているため、境界条件の変更を容易に行うことができます [1]。OPEN 境界に設定にした場合には、領域中央において、z 方向の電流 J_z を励振することができます。wp00 は励振周波数、Jz は(最大)振幅を表します。

2.4 ジョブ実行

図 3 で OK を選択すると、シミュレーション計算が始まります。同時に、グラフウインドウ(図 4)が開きます。グラフウインドウには、x 方向の電場 3 成分 (E_x, E_y, E_z) の空間分布、粒子の速度位相図 (v_x, v_y, v_z)、エネルギー図が表示されます。

速度位相図では、一番目の粒子が赤色で、二番目の粒子が青色で表示されます。

²将来的バージョンでは、任意の種類の粒子を取り扱えるようにする予定です。

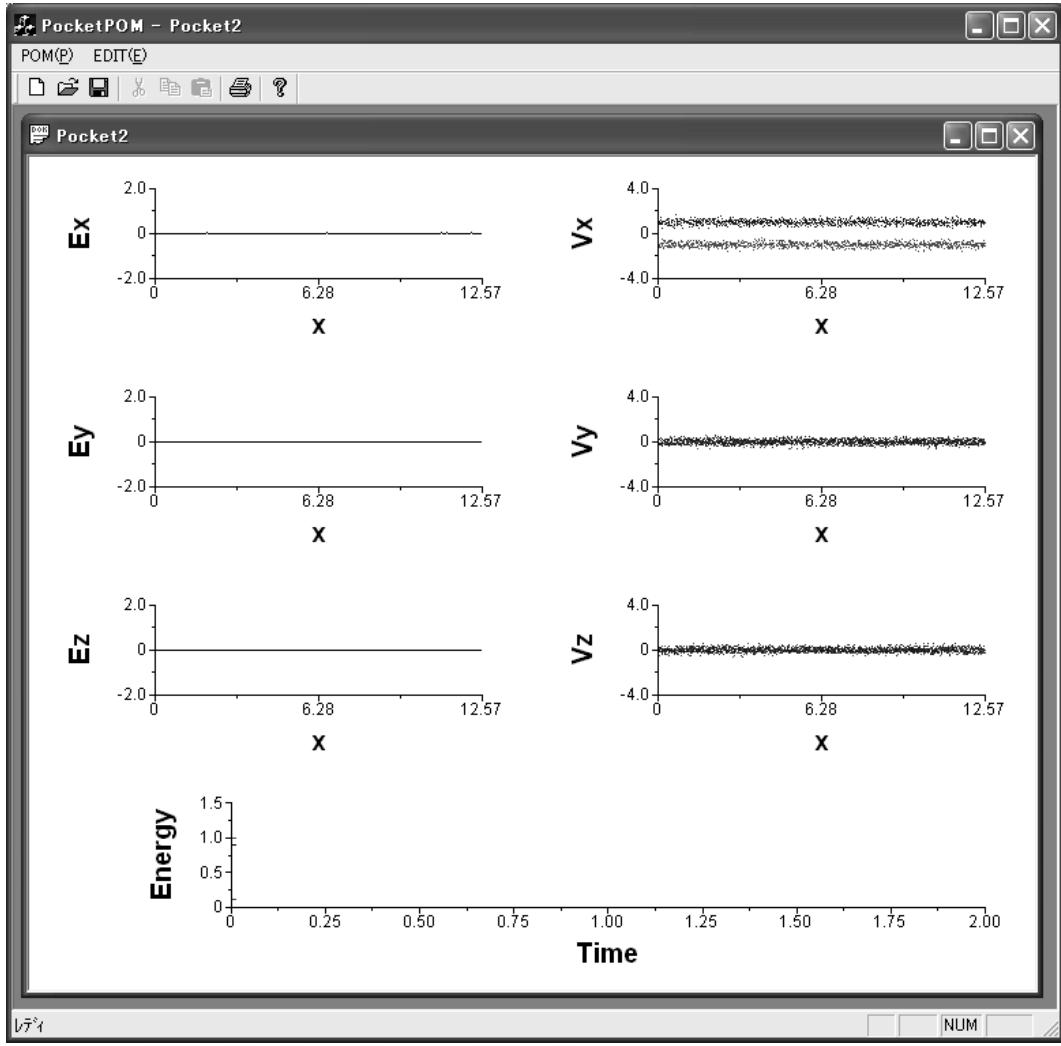


図 4: PocketPOM 1D 実行画面 (時刻 $t = 0$)

エネルギー図は、4種類のエネルギーが時間表示されています。赤は全エネルギー、青は電磁場のエネルギー、黒が粒子の全ドリフトエネルギー、緑が粒子の全熱エネルギーです。³

図 4、図 5 は、それぞれ、時刻 $t = 0.00, 1.00, 2.25$ のプロットです。エネルギー表示は、時刻 $t = 2.00$ 以上になると、0 に戻って、上書き表示します。なお、PocketPOM 1D version 1.0 では、物理パラメータ描画は、毎ステップ行われます。

2.5 グラフ編集

PocketPOM 1D では、グラフィックライブラリとして、GCL[3] を使っています。GCL は、グラフ表示をインタラクティブに行うための、さまざまな機能を備えています。

図 6(a) は、線グラフ表示の変更ダイアログです。 E_x などの線グラフの線上でマウスをダブルクリックすると開きます。Type で、線表示タイプを、線のみ、線とシンボルなどから選択できます。LINE ATTRIBUTE で線表示タイプを実線、破線などから選択できます。その他、スプライン関数によるスムージング表示なども可能です。Data により、その時刻のデータを表示・保存することもできます。

図 6(b) は、粒子などの点プロット表示の変更ダイアログです。点プロット上でダブルクリックすると、ダイアログが開きます。Type で、点表示タイプを、点のみ、棒表示などから選択できます。Marker Attribute では、点の形状 (Sphere)、点のサイズ (Size)、点の色 (Color)、点の

³同期境界条件の場合には、全エネルギー（赤線）が保存されることを確認して下さい。

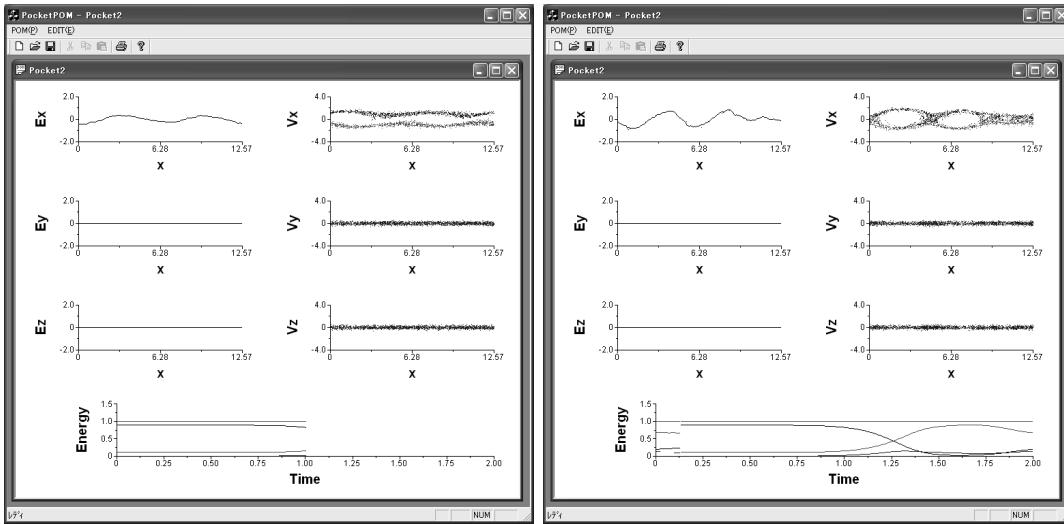


図 5: PocketPOM 1D 実行画面 : (左) 時刻 $t = 1.0$ 、(右) 時刻 $t = 2.25$)

スタイル (Style)などを変更することができます。

図 6(c) は、軸表示変更ダイアログです。 x または y の座標軸上でダブルクリックすると開きます。座標の最大値 (From と To) の変更、軸線表示の変更 (LINE ATTRIBUTE)、ティックマークの変更 (Ticks)、グリッド表示の変更 (Grids)、ロガスケール表示 (Logarithmic Scale) などが行えます。

そのほかにも、数値や文字上でダブルクリックすることにより、フォント、文字色、文字サイズなどを変更するダイアログが開きます (たとえば図 6(d))。

参考文献

- [1] 村田健史, 上田裕子, 上岡功治, 白井英之, 岡田雅樹, 大村善治, 松本紘, “オブジェクト指向開発技法によるプラズマ粒子シミュレーション,”電子情報通信学会論文誌 (B), Vol.J85-B, pp.1411-1425, Oct. , 2002.
- [2] <http://www.quinn-curtis.com>
- [3] Graphic Class Library Manual, Quinn-Curtis 社、2002
- [4] 村田健史, “プラズマシミュレーション支援環境 PocketPOM の試作”電子情報通信学会論文誌 (B), Vol.J85-B, pp.573-578, Apr. , 2002.
- [5] 村田健史, 上岡功治, 高橋誠治, 岡田雅樹, 上田裕子, 大村善治, 松本紘, “プラズマ電磁粒子コードの並列化手法と速度向上率の評価,”情報処理学会論文誌:数理モデル化と応用, Vol.43 , No.SIG7(TOM6) , pp,118-131 , 2002
- [6] 村田健史,Nuridiyana binti Abdul Gahni, 白井英之, 上田裕子, 岡田雅樹, 大村善治, 松本紘, “宇宙プラズマ計算機シミュレーションの問題解決環境の提案,”情報処理学会論文誌:数理モデル化と応用 , Vol.43 , No.SIG7(TOM6) , pp.105-117 , 2002
- [7] 愛媛大学工学部情報工学科 村田健史メールアドレス murata@cs.ehime-u.ac.jp
- [8] <http://www.infonet.cs.ehime-u.ac.jp/POM> (開設予定)
- [9] POM メーリングリスト POM@kahlua.cs.ehime-u.ac.jp (開設予定)

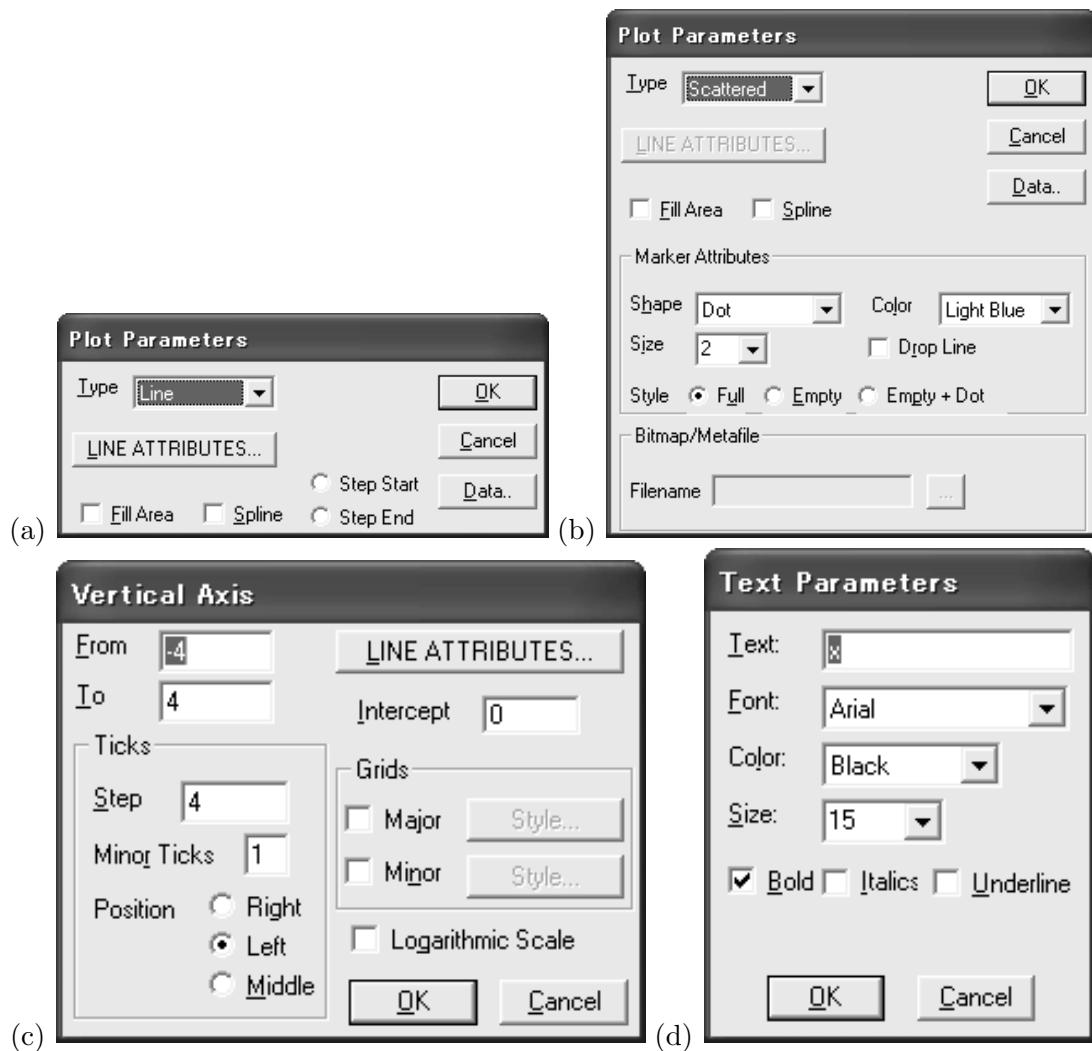


図 6: グラフ表示編集 : (a) 線表示の変更、(b) 点表示の変更、(c) 軸表示の変更、(d) フォントの変更

大規模粒子シミュレーションから見える新しい物理

篠原 育（宇宙科学研究所）

現在の国産のスーパーコンピュータの性能は、アカデミックな用途に使える計算機に限定すると言違いなく世界最高水準にあります。今後もこのような恵まれた状況が続くかどうかは自明ではありませんが、現時点ではこの状況を最大限活かす努力をすべきであることは間違ひありません。ここでは計算機能力を活かした大規模計算をどのような方向性で進めるのかについて、1つの可能性を紹介したいと思います。最近のシミュレーション研究からは、世界最大規模の大規模数値計算を実行することによって、宇宙プラズマの基礎物理に対して新しい描像が発信されつつあります。最先端の計算機は、従来の“理論や観測の追認”的なシミュレーションを超えて、新しい理解の仕方を提示し得る能力を持ち始めた、と私たちは考えています。

1. 大規模計算とはいっても…

無衝突プラズマの物理を、電子の運動論的效果まで含んで計算を行う場合、私たちは粒子法を選択する必要があります。ここではより現実の世界を理解するために、粒子計算であっても電子スケールの現象だけではなく、イオンスケールまでを含んだ計算を行えることが目標です。これまでの計算ではできなかった、電子スケールの現象がイオンスケールの現象とどのようにお互いに影響を及ぼしあう／あわない、のかを知りたいからです。現実の宇宙プラズマの物理を理解するために、実パラメータで粒子シミュレーションを行うことができれば嬉しいのですが、

まず最初に、現在のスーパーコンピュータではどのくらいの計算ができるかを確認しておきましょう。粒子シミュレーションの制約条件としては、

$$\omega_{pe} \Delta t \leq 1$$

$$\Delta x \leq \lambda_{De}$$

があります。また、特に電子の数値加熱の観点から、必要な計算タイムステップ数以内に数値加熱が十分抑えられるように粒子数を設定する必要があります。これは非常に大雑把にいえば

$$\omega_{pe} t_{heating} \sim 10^3 n_{ptcl} (\lambda_{De} / \Delta x)^2$$

です。その他、シミュレーションの初期条件を特定するためには $M = m_i / m_e, \sigma = \omega_{pe} / \Omega_e, v_e / c$

が必要です。できるだけ大きなグリッド数が取れるように $\lambda_{De} \sim \Delta x$ と考え、 $c = 1$ と規格化すると、

$\omega_{pe} \Delta t \sim \lambda_{De} / (c / \omega_{pe}) = v_e / c < 1$ となるので、条件は自動的に満たされます。

また、粒子の運動にとって $\Delta x / \Delta t > c$ が必要であるが、 $\Delta x = 1$ と規格化すれば、 $\Delta t < 1$ とすれば、条件を満たすことができます。

ここでは、イオンスケールの現象を粒子法で計算することが目標ですから、システムの空間サイズを 10 倍のイオン慣性長としましょう。つまり、 $c / \omega_{pi} = M^{1/2} (c / v_e) \lambda_{De}$ から、

$$N_{grid} = L^3 \sim (10M^{1/2}(c/v_e))^3.$$

また、時間スケールも 10 倍のイオンジャイロ周期程度は必要なので、 $\Omega_i = \omega_{pe}/(M\sigma)$ より、

$$T = 10\Omega_i^{-1} = 10(M\sigma)\omega_{pe}^{-1}.$$

したがって、必要（グリッドあたりの）粒子数は

$$n_{ptcl} \sim \omega_{pe} t_{Heating} / 10^3 \sim 10^{-2} (M\sigma)$$

と見積もることができます。 $\Delta t \sim (v_e/c)\omega_{pe}^{-1}$ なので、総計算量は

$$\propto N_{grid} n_{ptcl} T / \Delta t \sim 10^2 M^{7/2} \sigma^2 (c/v_e)^4$$

となります。質量比が大きいほど、電子温度が冷たい程、計算量が膨大に膨れ上がることに注意してください。例えば、現状で名古屋大学計算センターの VPP5000 システムで実行可能な典型的な 3 次元粒子シミュレーションのパラメータは、 $M = 100, \sigma = 1, v_e/c = 0.3$ 程度です。即ち、

$$N_{grid} \sim 10^7, T/\Delta t = 10^4, n_{ptcl} = 10$$

程度の計算規模となります。VPP5000 の 16PE の並列計算を行うとおよそ 50 時間程度の計算になりますから、十分、実行可能な計算といえるでしょう。それでは、磁気圏プラズマシートの実際のパラメータを代入するとどうなるかを見ると、 $M \sim 1840, \sigma = 10, v_e/c = 0.1$ 程度になりますから、先程の計算量に対して、 $\sim 10^8$ もの大きな計算が必要となってしまうことが予想されます。これではいくら並列計算技術が進んだとしても現状の計算機システムでは到底実現できるような値ではありません。これはほんの 10 倍のイオン慣性長程度のサイズについての値にすぎませんから、磁気圏全体を実パラメータで粒子法のシミュレーションすることはとても考えることができません。

以上に見てきたように、私たちは限られた人工的に設定したパラメータによってのみでしか、無衝突プラズマの世界を粒子シミュレーションすることができません。それでも、質量比が 100 のオーダーまで取れるようになってきたことで、新しい視点が見えるようになってきています。一番大きな理由は、電子スケールとイオンスケールがはっきりと分離できることになったので、それぞれのスケール間の結合過程がはっきりと見えるようになったことです。実パラメータの世界を計算で再現することが絶望的に困難な現状では、シミュレーションによって質量比などに対するスケーリング則を見出すことによって、現実世界を垣間見る努力をすることがとても大事な視点です。

2. 大規模計算の目指すもの

一口に大規模計算といつても計算の目的は以下の 2 つを分けて考える必要があります。

- (1) 現実世界のシミュレートを目指す計算 - 地学的により現実に近い状況設定を計算機上に構築して宇宙空間に発生する現象を理解する。例えば、宇宙天気予報への応用を目指した地球磁気圏のグローバル MHD シミュレーション等、現実世界の予測を目指した計算。

- (2) 計算機上の物理実験 - 物理的により理想化されたプラズマ環境を計算機上に構築して宇宙プラズマの基礎物理を理解する。新しい物理過程の発見やより精密な理論体系構築を目指した計算。
 (1)とは異なった意味で、正しくプラズマ環境を計算機上に実現するために大きな計算機リソースを必要とする。

理想的な計算環境が整えば2者は同じ計算の中に共存できるかもしれません、計算機リソースは有限なので、(1)の意味で複雑な現実世界をシミュレートするためには何らかの近似が不可避です。それゆえ、(2)の基礎物理的な理解の進展なしには(1)のシミュレーションの精密化はありません。例えば、境界面を通したプラズマの輸送過程はMHD近似で取り扱うことができず、輸送係数（粘性、抵抗、熱伝導）としてモデル化してMHD方程式に組み込む手法が広く用いられていますが、輸送の物理過程の詳細が理解出来ていないためにモデルの妥当性を評価できません。両側面のシミュレーション研究を相補的に進めることが大切ですが、ここでは特に(2)の基礎物理的な理解の重要性を強調したいと思います。

3. 現在でもここまでできる！ ~ 新しい物理の発見

宇宙プラズマ中には様々な時空間スケールの複雑な現象が現れます、そのスケールのダイナミックレンジは非常に広いため、全てのスケールを同時に取り扱うことは困難です。これまでプラズマ物理学では、適切な近似によって各スケール階層に適切な数値計算コードを開発・利用することによって、シミュレーション研究を進めてきました。このようなコードには、計算が軽い順に、
 MHD（磁気流体近似） Hall-MHD（磁気流体近似にHall効果を組み込む） hybrid($m_e=0$)
 （イオンは粒子、電子は質量0の流体として扱う） two-fluid ($m_e \neq 0$)（2流体近似で電子の慣性効果も取り入れる） hybrid($m_e \neq 0$)（イオンは粒子、電子は流体、かつ、電子慣性効果も取り入れる） particle（イオン、電子共に粒子として取り扱う）の6種類があります。

~ のコードは最小空間スケールがイオンスケールなので、比較的大きな空間領域を取り扱うことができます。~ のコードでは、既に、地球磁気圏全体を十分取り扱えるようになっており、目的(1)の用途の研究に盛んに用いられ始めました。最近では Hall効果の重要性が認識されているので、~ を使った研究も始まりつつあります。

、の計算は目的(1)
 的な側面が強調され
 がちですが、目的(2)
 の研究にもまだまだ
 面白いテーマが潜んでいます。例えば、リ
 コネクション・ジェットの先端部がリヒトマイア・メッシュコフ不安定によって複雑な構造を示すことが、

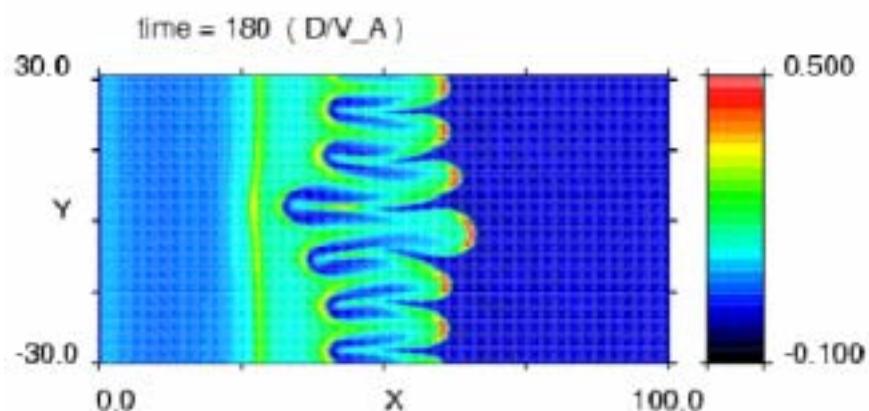


図1 ジェット先端部で発生するリヒトマイア・メッシュコフ不安定。
 色は密度を表す。

中村や丹所らの計算によって発見されました(図1)。ジェット先端部はこの不安定の非線形段階に分裂を起こすのですが、分裂したジェットは磁気圏で観測されるベースティ・バルク・フローに対応するのではないかと考えられています。一方、GEOTAIL衛星の観測結果等からイオンの

運動論的效果の重要性が示唆されて、(1)の意味でもを使った磁気圏スケールの計算が注目を浴びつつあります。宮城らは磁気圏尾部形状の初期条件からリコネクションを発生させる3次元のシミュレーションを行い、リコネクションに伴って発生するイオンビームと沿磁力線電流系の発達の関係について調べました。その結果、地球側境界に沿磁力線電流系の先端が到達するよりもイオンビームの方が早く到達することが明らかになったのです(図2)。これまで、リコネクションによって発生する沿磁力線電流系が電離層に到達してオーロラが発光すると考えられていましたが、シミュレーション結果はイオンビームが最初にオーロラを光らせる可能性を示しており、サブストームの発生機構を考える上で興味深い結果として注目されています。

～のコードでは電子慣性効果を取り扱う為に、時空間ス

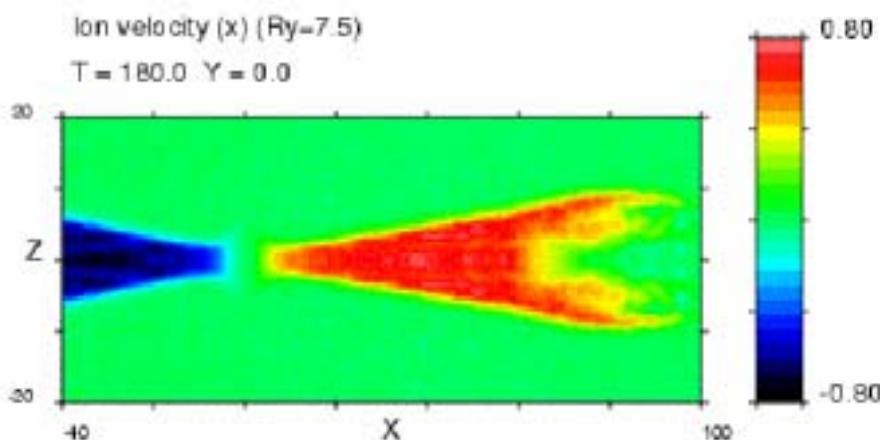


図2 磁気圏尾部配位を初期条件とする磁気リコネクション。色は速度のX成分を表す。

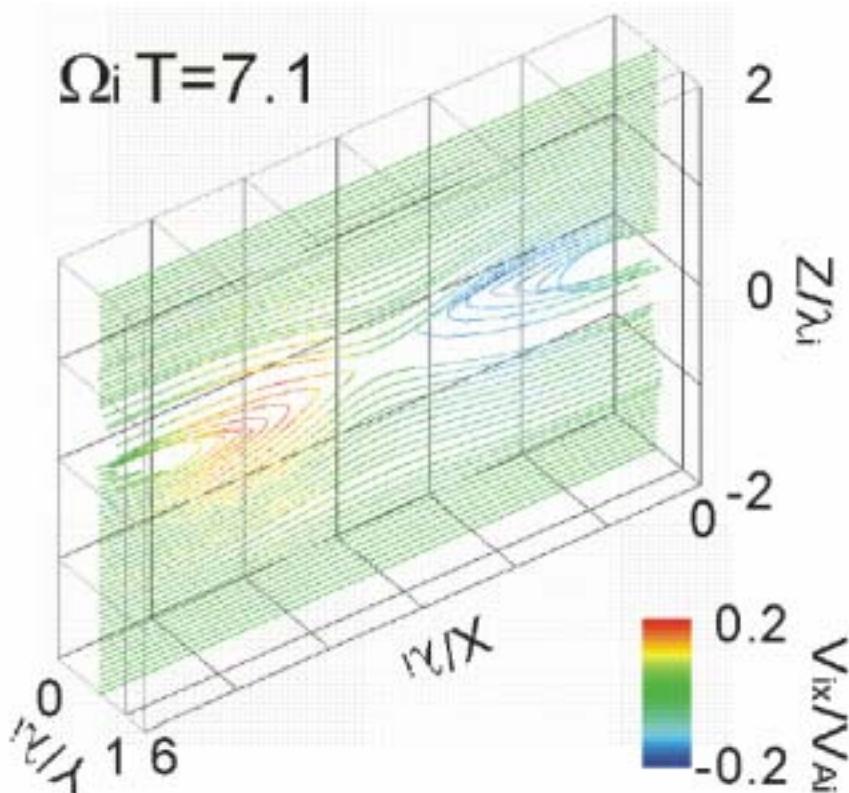


図3 3次元粒子シミュレーションによる磁気リコネクション。磁力線が示されており、磁力線上の色はイオン速度を表す。

ケールは電子を基準に考える必要があります。これまで大きな領域・時間を計算する際は小さなイオン - 電子質量比(m_i/m_e)しか取れなかったので、折角、電子慣性効果を取り入れてもイオンと電子の間のスケール分離を十分に行うことができませんでした。しかし、最初に考察したように現在では、イオン - 電子のスケール分離を十分に行った上で、イ

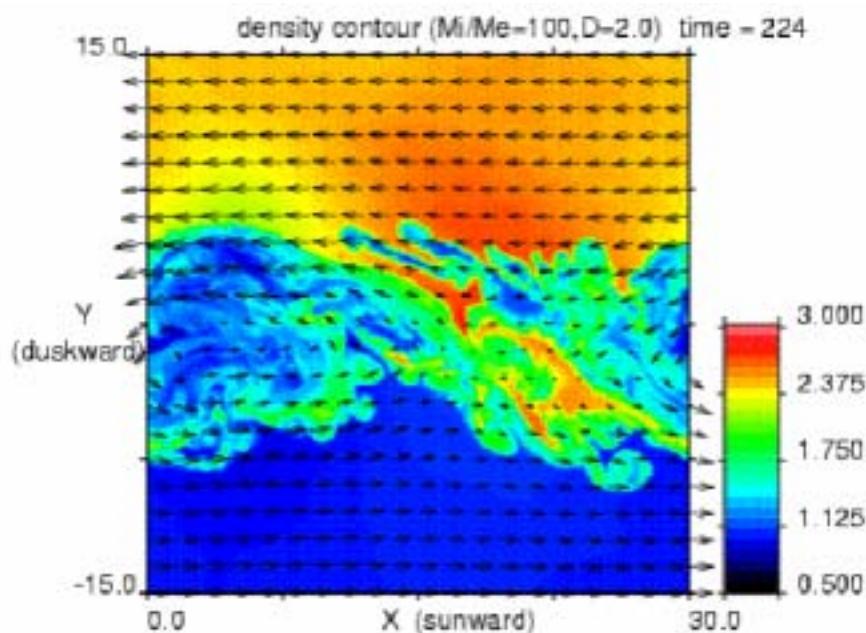


図 4 ケルビン・ヘルムホルツ不安定の 2 流体シミュレーション（電子慣性効果を含む）。色は密度を表し、矢印はイオンの流速ベクトル。

オンスケールの現象を扱うことができるようになりました。最近、私たちはこの最大規模の計算結果から新しい重要な物理過程を発見しました。従来のプラズマ物理学は、空間スケールの分離を基本とした階層構造（デバイ長、電子慣性長、イオン慣性長、MHD スケール）に依拠して構築されていますが、イオンと電子のスケールが十分分離できているように思える場合においてさえ、電子スケールとイオンスケールの現象はスケールの違いを乗り越えて動的に結合し得ることが明らかになりました。例えば篠原らは、従来の理論ではサブストームを説明できるような速い磁気リコネクションを引き起こす為には電子スケールの厚さの電流層が必要と考えられていたものを、スケールの異なる不安定の結合によってイオンスケールの厚さの電流層でも非常に速いリコネクションの成長が起こり得ることを コードのシミュレーションによって示しました（図 3）。また、ケルビン・ヘルムホルツ不安定によるプラズマ混合の問題についても、林や中村らの コードによる計算によって、電子慣性効果に起因する不安定との結合によって渦構造が崩壊する過程が発見されています（図 4）。これらの結果は、従来の考え方のように単純な輸送係数という形で静的にモデル化するのではなく、動的な結合過程をモデル化する必要があることを示しており、今後の研究の発展が強く望まれています。

4. まとめ

以上に紹介したように、現在の計算機資源を最大限に活用して、私たちは計算機シミュレーションから従来の理論や観測に無い新しい物理現象を発見できるようになりました。今後、登場する次世代・次々世代スーパーコンピュータの能力は、こうした新しい物理過程の発見や予測の道具として益々利用価値が高まるでしょう。また、精度の高い計算結果からは観測や実験に対して“何を観測すべきか？”という要請を出すことができるようになるはずで、これまで以上に計算機シミュレーションと観測データ解析の連携が重要になるでしょう。太陽地球系分野はこれまで「その場観測」

ができるという特色を最大限に活かして宇宙プラズマ物理の理解をリードしてきました。私たちは今後もこの優れた利点を継承し、観測的実証と理論・数値計算を車の両輪として、宇宙プラズマの精密な記述体系の構築を目指すことが私たちの1つの大きな使命だと思います。

非一様空間格子幅・時間ステップ幅および衝突効果

寺田 直樹（名大 STE 研）

1 Introduction

流れのシミュレーションを行う場合、流れ場の形が単純であれば直交格子を用いて計算ができる。しかし、実際に解きたい流れ場の多くは大変複雑である。例えば、飛翔体周りの流れ場を解くためには、計算格子を複雑な物体形状に沿って分布させることが要求される。また、物体形状が単純な場合においても、物体近傍などに発達する境界層を解像するためには計算格子を境界層周辺に局所的に集中させることが必要となる。

非一様な格子分布の利用は、数値流体力学の分野では 20 年以上にわたり盛んに研究が行われてきた。しかし、粒子・ハイブリッドモデルにおいては現在でも等間隔直交格子を用いることが一般的であり、今後非一様な計算格子を用いた研究が急速に発展していくことが予想される。

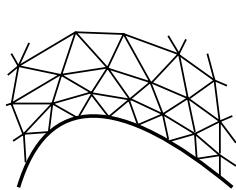
本稿では、非一様な空間格子幅 (Δx) 分布を粒子・ハイブリッドモデルで利用するための手法を紹介する。また、非一様格子上での計算を効率良く行うために必要となる、非一様時間ステップ幅 (Δt) の利用や粒子数の動的変更を行う手法も併せて紹介する。

2 非一様空間格子幅

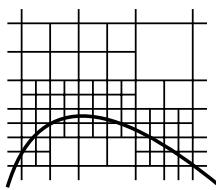
2.1 格子の種類

1. 非構造格子 (a)

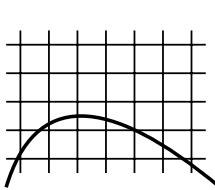
- ・格子点の並びに規則性をもたない
- ・格子の自由度が高い
- ・有限要素法や有限体積法で使用される
- ・三角形（三次元では四面体）が最も多く用いられるが、四角形（三次元では六面体）やその他のセル形状やその混在もしばしば用いられる



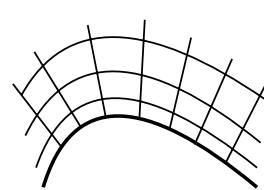
(a1) 非構造格子(三角)



(a2) 非構造格子(四角)



(b1) 直交格子



(b2) 境界適合格子

図 1 格子の種類

2. 構造格子 (b)

- 格子点の並びに規則性をもつ
- 差分法や有限体積法で使用される
- 境界適合格子

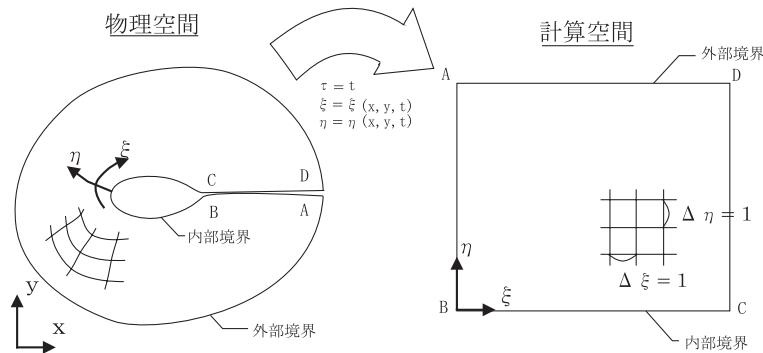


図 2 境界適合格子

格子に柔軟性はあるが、特定の領域に格子点を極端に集中させるのは困難な場合が多い。格子歪みは 45 度以下が望ましい。

- マルチブロック
- 重なり格子

3. 非構造格子と構造格子の組み合わせ

- 三角形（三次元では四面体）セルを用いると流束計算が多くなる。
→ 高い空間分解能が必要となる物体近傍にのみ構造格子（またはプリズム形状の非構造格子）を用いる

4. 解適合格子

- 流れの計算結果をもとに格子点を移動、または格子点を追加・削除

2.2 粒子コードへの適用

- 非構造格子

- 格子形状が三角形（四面体）→ e.g., Kazeminezhad et al. [1995]
プログラミングがやや複雑
物体形状が複雑な場合に使用（飛翔体環境など）
- 格子形状が四角形（六面体）→ e.g., Kallio and Janhunen [2001]
三次元で六面体を用いた場合は、 $+n$ レベルの格子では格子体積が $1/8^n$ に。
→隣接するグリッド間内の粒子数の変化が激しい。
粒子分割・合体 (section 3) が必要となる場合が多い。

- 境界適合格子

プログラミングが比較的容易で汎用性に富む
物体形状が相当複雑でない限り十分

- 解適合格子 → e.g., Lipatov [2002]

2.3 境界適合格子 + 粒子コード

- 境界適合格子における変換式 (Appendix 1)
- 粒子コードに境界適合格子を適用するためには、多数個の粒子量（ラグランジュ量）と非一様な格子点上の場の量（オイラー量）を効率的に結びつける方法が必要である（図 3）。

例えば、粒子量 (x_p, v_p) からソース項 (ρ, J) を格子点上でいったん求めれば、場の量に関する方程式については Appendix 1 の変換式がそのまま使用できる。

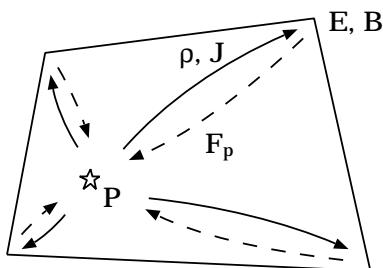


図3 粒子量と場の量のやりとり

- 境界適合格子 + 粒子コード の計算手順を具体的に書くと、

1. 粒子量 (x_p, v_p) を格子点上に集めてソース項 (ρ, J) を計算する
2. 格子点上で場の量 (E, B) を進める (計算空間, Appendix 1)
3. 格子点上の場の量 (E, B) から、粒子に働く力 F_p を計算する
4. 粒子量 (x_p, v_p) を進める (物理空間)

である。下線部分の粒子量と格子点上の場の量とのやりとりを行う方法は幾つかあるが、Appendix 2 に Westermann [1994] による PIC 法の area-weighting method を応用した「補間法」「粒子局在化法」を記した。この手法を用いることにより、境界適合格子の粒子コードへの適用が容易に行える。

適用例

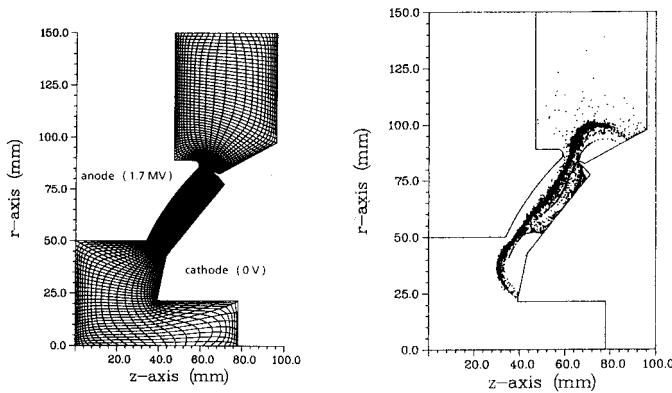


図 4 適用例 1

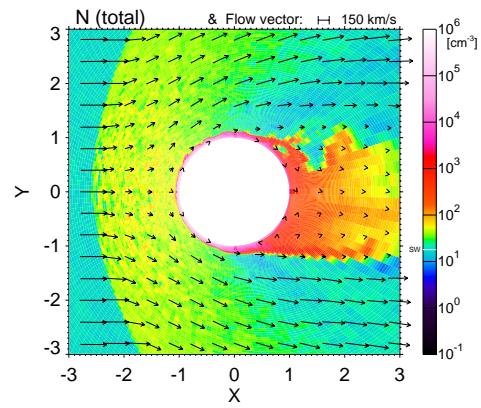


図 5 適用例 2

- 例 1. デバイス内での電子軌道計算 [Westermann, 1994]
 例 2. 金星電磁圏のハイブリッドシミュレーション [Terada et al., 2002]
 ・イオン慣性長の分布をもとに格子分布を決定
 ・球面上への準一様な格子分布

3 粒子分割・合体法

非一様格子を用いる際には、粒子数の動的変更が必要となる場合がある

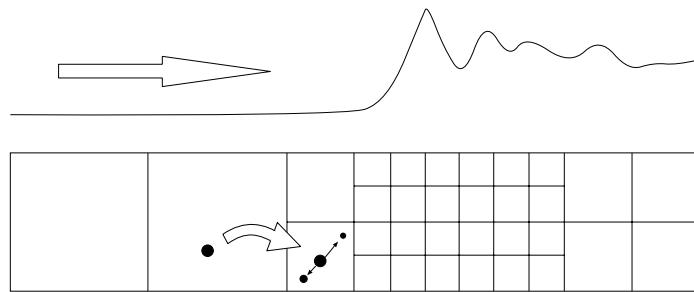


図 6 粒子分割

方法 (e.g., Lapenta and Brackbill [1994])

- 粒子分割

同一速度の 2 粒子に分割。

ソース項が変化しないように粒子を分割する。(例えば図 7 の P_0 から等距離の P_1, P_2 に、電荷と質量を二等分した粒子を置く)

- 粒子合体

運動量保存とエネルギー保存を共に満たしたまま合体することはほぼ不可能。

$$\delta = \frac{|v_1 - v_2|}{|v_1| + |v_2|} \ll 1 \text{ のものを合体。}$$

(他にも 3 粒子を合体させて 2 粒子を生成する方法 [Kallio and Janhunen, 2001] などもある)

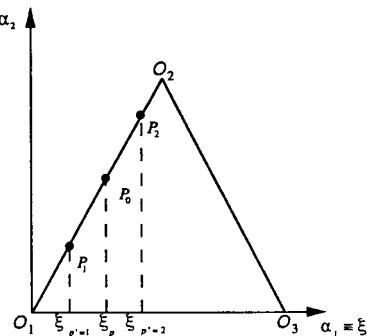


図 7 分割粒子の配置

TABLE I				
ϵ_{target}	ϵ_{21}	ϵ_{max}	K-S	χ^2
Before coalescence	—	—	100%	95%
10^{-1}	9.999×10^{-2}	1.060×10^{-1}	100%	95%
1	1.000	1.023	100%	94%
3	3.000	3.032	100%	91%
5	4.998	5.048	96%	89%
10	10.000	10.124	57%	32%

表 1 合体により粒子数を $1/2$ にした分布のテスト

問題点

- ・合体は近似でしかない(表 1)
- ・分割において、細かいグリッドでの速度分布に偏りが出ないようにする為には、上流の粗いグリッド内にも十分な数の粒子が必要
- ・分割・合体によって系の発展が変わる

4 非一様時間ステップ幅

時間ステップ幅 Δt は、対象とするプラズマ現象を解くのに十分小さくなければならぬ。例えば一般的な陽解法ハイブリッドコードにおいては、

$$\begin{aligned}\Delta t &\leq 0.2 \Omega_i^{-1} = 0.2 m_i / q_i B \\ \Delta t &\leq \Delta x / 2V \text{ (クーラン条件)}\end{aligned}$$

を共に満たす必要がある。このことから、

1. 背景場 (B_0, ρ_0 など) が空間的に大きく変化する
2. グリッド幅 Δx が空間的に大きく変化する

などの場合は、小さな Δt が必要な領域でのみ小さな Δt を用いることによって、計算効率を大幅に改善することが期待できる。

1. 背景場が空間変化する場合

例. Wu [1985]

- ・地球磁気圏グローバルシミュレーションでは内部磁気圏領域で Δt を小さくしなければならない(強い固有磁場のために $\Omega_i^{-1}, 1/V_A$ が小さくなる)
- ・地球中心から $1R_E$ 地点でのアルベン速度は $V_A \sim 700 V_{sw} \sqrt{\rho_{sw}/\rho}$

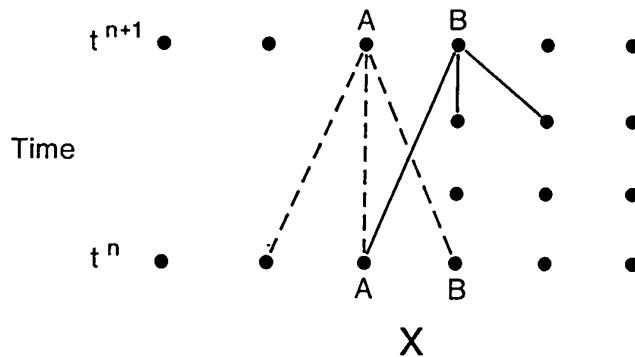


図 8 二領域で異なる Δt を用いたスキーム

問題点

小さな時間ステップ ($\Delta t' = \Delta t/n$ が n ステップ) の間に速いグリッド側から遅いグリッド側に伝搬していく短周期擾乱
→ 有限の伝搬速度の双曲型システムの場合、緩衝層(通常 2 ~ 3 グリッド)で対処

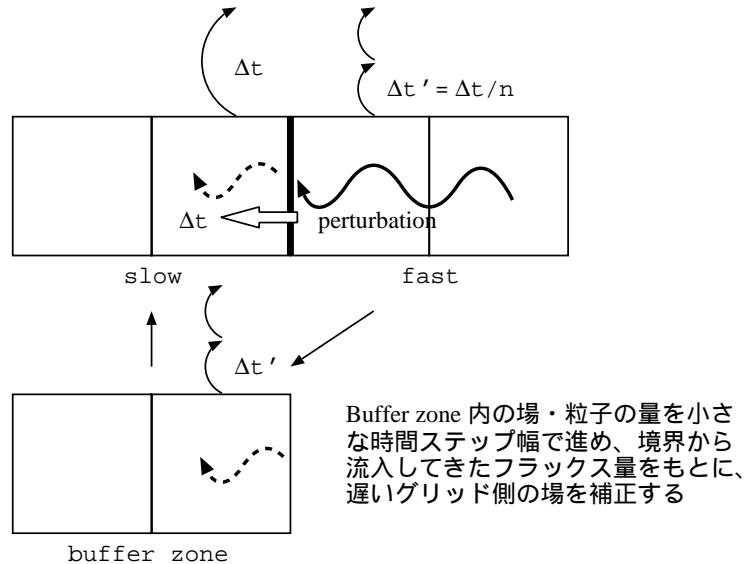


図9 緩衝層を用いた遅い格子上の場の補正

2. グリッド幅が空間変化する場合

例. Lipatov [2002]

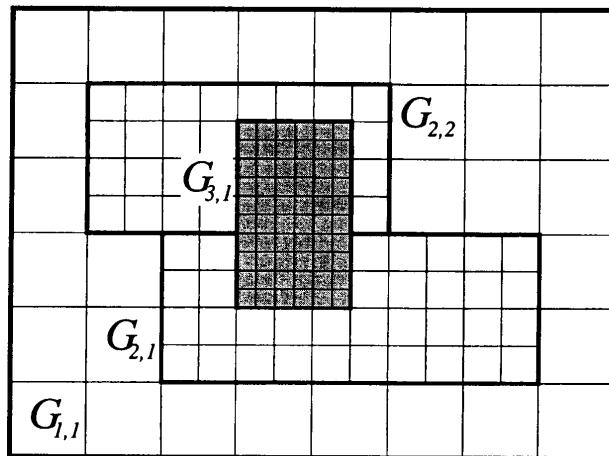


図10 非一様格子幅と非一様時間ステップ幅の併用

格子幅は $\Delta x_n = \Delta x_1 / 2^{n-1}$ (n は格子分割のレベル) で与えられる。格子幅が小さなところでは時間ステップ幅も小さくする ($\Delta t_n = \Delta t_1 / 2^{n-1}$)。緩衝層では格子幅・時間ステップ幅ともに元より小さいものを用いるので、一時的に粒子分割を行った上で小さな時間ステップ幅で進め、遅いグリッド側の場の量を補正する。

5 衝突効果

惑星電離圏領域での現象やデバイス内のプラズマ現象などの様々な現象において、プラズマ粒子が中性気体等と衝突する効果が重要な役割を果たすことがある（e.g., 図5）。従来、数値シミュレーションにおいて衝突の効果は流体モデルを用いて調べられてきた。しかし、複雑な物理過程や反応過程の結果、プラズマ粒子の速度分布は非マクスウェル分布となり得るので、そのような場合は自己矛盾のない粒子モデルを用いて調べる必要がある。この章では粒子モデルに衝突効果を組み込む手法について紹介する。

5.1 PIC + モンテカルロ衝突

ここでは Vahedi and Surendra [1995] に基づいて粒子コードに衝突効果を組み込む手法の一例（PIC + モンテカルロ衝突）をみていく。図11のフローチャートにあるように、衝突効果はモンテカルロ法を用いることによって PIC コードに容易に組み込むことができる。ここでは 1 タイムステップ (Δt) ごとに衝突粒子を決定する方式を採用している。

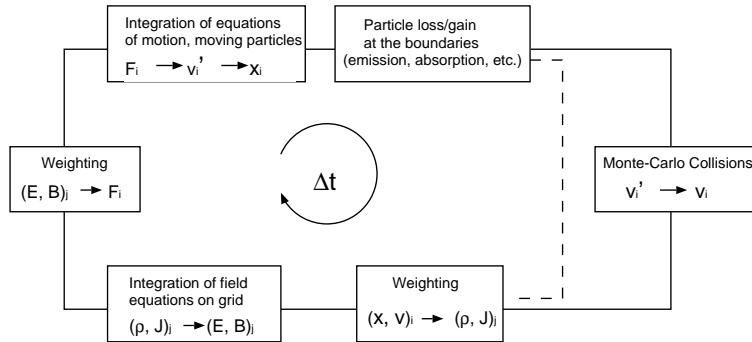


図11 PIC + モンテカルロ衝突のフローチャート

i 番目の粒子の衝突周波数は、

$$\nu_i = n_t \sigma_T v_i \quad (1)$$

で与えられる。ここに

$$\sigma_T(E_i) = \sigma_1(E_i) + \dots + \sigma_N(E_i) \quad (2)$$

で、 σ_j は j 型の衝突の衝突断面積 ($1 \leq j \leq N$)、 $E_i = \frac{1}{2}mv_i^2$ は粒子 i の運動エネルギー、 n_t は衝突対象の数密度である。この衝突周波数を用いて、タイムステップ Δt 間の粒子 i の衝突確率は、

$$P_i = 1 - \exp(-\nu_i \Delta t) \quad (3)$$

で与えられる。

モンテカルロ衝突のアルゴリズムは、基本的には以下の手順で成り立っている（計算効率を考慮したアルゴリズムは 5.2.1 参照）。

1. 全ての粒子に対して式 (1) より衝突周波数 ν_i を求める（個々の粒子の速度、エネルギーの値が必要）
 2. 全ての粒子に対して式 (3) より Δt 間の衝突確率 P_i を計算する
 3. 全ての粒子に対して $[0, 1]$ の一様乱数を発生させ、その乱数の値が P_i 以下であるならば、その粒子を衝突粒子とする
 4. 3. で衝突が決定した粒子に対して一様乱数を発生させ、衝突の型 (type 1, type 2, ..., or type N) を決定する（図 13 参照）
 5. 4. で衝突の型が決定した粒子に対して散乱角や衝突後のエネルギーの計算などをを行う
1. の衝突周波数の計算や 5. の衝突の処理などは、衝突粒子と衝突対象（電子、イオン、中性）との個々の衝突過程の特性に応じて計算方法を決定しなければならない。そこで以下で一例としてアルゴンイオンとアルゴン原子の衝突を見る。

例 (Ar⁺ と Ar の衝突)

1. 衝突周波数の計算の例

アルゴン原子の熱速度がイオンのものに比べて無視できるほど小さい場合は、衝突周波数は個々のイオンの速度 v_i とエネルギー $E_i = \frac{1}{2}mv_i^2$ を用いて図 12 と式 (1) から求めることができる。

しかし、アルゴン原子の熱速度とアルゴンイオンの速度が同程度の場合は、アルゴン原子の速度分布の情報（例えばマクスウェル速度分布など）が必要となる。まず、アルゴン原子の速度分布から無作為に衝突対象となるアルゴン原子を一つ選ぶ。そしてその衝突対象原子の系でみた i 番目のイオンの速度から、衝突断面積を図 12 により求め、衝突周波数を式 (1) により求める。この手順を全てのイオンについて繰り返す。

5. 衝突の処理の例

衝突の型が図 12 の散乱 (scattering) の場合は、剛体球衝突であると仮定し衝突時のエネルギー損失率を

$$\Delta E/E = \frac{2m_i m_n}{(m_i + m_n)^2} (1 - \cos \Theta) \quad (4)$$

で計算する。ここに Θ は質量中心系での散乱角であり、散乱は等方一様であると仮定する。もし、1. で衝突対象原子の系に移していたならば、衝突処理後に元の系に戻す。

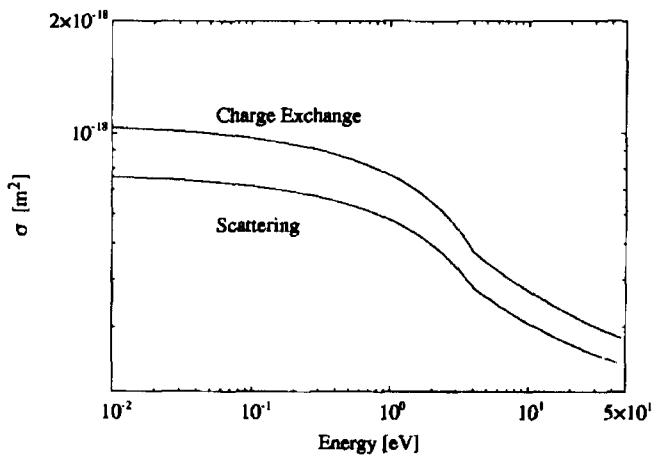


図 12 $\text{Ar}^+ \text{-} \text{Ar}$ 衝突断面積

衝突の型が電荷交換 (charge exchange) の場合は、アルゴン原子からアルゴンイオンに電子が移動するとする。生成されたアルゴンイオンの速度は、衝突対象原子の系で 0、すなわち衝突対象原子の入射速度とする。

5.2 テクニカルな話

5.2.1 空衝突

モンテカルロ衝突法は、直観的で、PIC コードに組み込むことは容易であるが、そのままでは計算量が膨大になってしまう（5.1 の手順において、全ての粒子について 1., 2., 3. を計算しなければならない）。そこで、空衝突 (null collision) を導入することにより計算の効率化を行う。

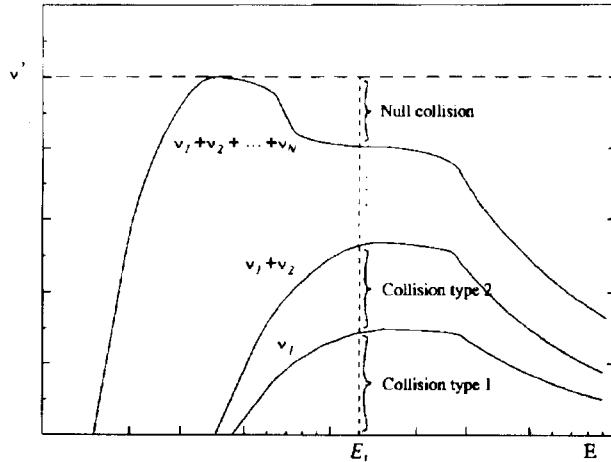


図 13 空衝突の導入

1. 図 13 にあるように、エネルギーに関して一定の値をとる仮の衝突周波数 $\nu' = \max(n_t \sigma_T v)$ を求める（空衝突周波数 $\nu_{null} = \nu' - (\nu_1 + \nu_2 + \dots + \nu_N)$ を導入）
2. $P_{null} = 1 - \exp(-\nu' \Delta t)$ を計算する
3. 全ての粒子に対して $[0, 1]$ の一様乱数を発生させ、その乱数の値が P_{null} 以下であるならば、その粒子を仮の衝突粒子とする
4. 3. で仮に衝突が決定した粒子に対して一様乱数を発生させ、図 13 を用いて衝突の型 (type 1, type 2, ..., type N , or null) を決定する
5. 4. で衝突の型が決定した粒子に対して散乱角や衝突後のエネルギーの計算などをを行う

このように空衝突を導入することによって、全ての粒子に対する計算は 3.のみとなり、4., 5. の計算は $N \times P_{null}$ 個の粒子について計算するだけでよくなる。通常 P_{null} は 10^{-2} のオーダーであるので (5.2.2 参照) 計算量の大幅な節約ができる。

5.2.2 Δt の制約

モンテカルロ衝突法では、タイムステップ Δt の間にそれぞれの粒子についての衝突を 1 回づつしか処理できない。しかし、有限の Δt を用いる限りは、1 タイムステップの間に複数回の衝突が含まれうる。複数回衝突による衝突のミスを減らすためには Δt を十分小さくしなければならない。

ある粒子の Δt 当りの衝突ミス回数は、

$$r \sim \sum_{k=2}^{\infty} P_i^k = \frac{P_i^2}{1 - P_i} \quad (5)$$

であるので、衝突ミスの回数を 1% 以下にするには $P_i \leq 0.1$ とする必要がある。空衝突を用いる場合は、 $P_{null} \leq 0.1$ すなわち $\Delta t \leq 0.1/\nu'$ とすればよい。

Appendix 1

境界適合格子での座標変換における基本式

簡単の為に二次元場で、 ξ, η は時間変化しない場合を考える。 (x, y, t) で定義される物理空間から計算空間 (ξ, η, τ) への写像関係式は、

$$\begin{cases} \tau = t \\ \xi = \xi(x, y) \\ \eta = \eta(x, y) \end{cases} \quad (6)$$

と書ける。この変換は図 2 にあるように、計算空間では $\Delta\xi = \Delta\eta = 1$ となる直交格子になるように選ぶ。

この変換はチェーン則より、

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial t} \\ \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \xi_x & \eta_x \\ 0 & \xi_y & \eta_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \tau} \\ \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{pmatrix} \quad (7)$$

また、式 (7) の (x, y, t) を (ξ, η, τ) に入れ替えて逆変換を求める

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial t} \\ \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & Jy_\eta & -Jy_\xi \\ 0 & -Jx_\eta & Jx_\xi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \tau} \\ \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{pmatrix} \quad (8)$$

ここで、

$$J^{-1} = (x_\xi y_\eta - y_\xi x_\eta) \quad (9)$$

は変換のヤコビ行列式である。式 (7), (8) を比較することにより、

$$\begin{aligned} \xi_x &= Jy_\eta, & \eta_x &= -Jy_\xi \\ \xi_y &= -Jx_\eta, & \eta_y &= Jx_\xi \end{aligned} \quad (10)$$

というメトリック関係式が得られる。

つぎに、次の形の方程式を考える。

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = 0 \quad (11)$$

この方程式は、式 (7) のチェーン則より、

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \tau} + \xi_x \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \xi} + \eta_x \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \eta} + \xi_y \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \xi} + \eta_y \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \eta} = 0 \quad (12)$$

と変換される。

ここで、式(10)のメトリックを用いると、式(12)は、

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \tau} + Jy_\eta \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \xi} - Jy_\xi \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \eta} - Jx_\eta \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \xi} + Jx_\xi \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \eta} = 0 \quad (13)$$

となる。

例えば点 (i, j) での x_ξ の差分式は

$$[x_\xi]_{i,j} = \left(\frac{x_{i+1,j} - x_{i-1,j}}{2\Delta\xi} \right) = \left(\frac{x_{i+1,j} - x_{i-1,j}}{2} \right) \quad (14)$$

などで与えられるので、このように物理空間上の格子点の座標 (x, y) からメトリックを数値的に評価してやると、座標変換後の方程式(12)を (ξ, η) の直交格子上で容易に解くことができる（実際にメトリックを評価する際には、有限体積法で行うようにコントロールボリュームの幾何学的関係から評価すべきであり注意が必要である）。変換式の詳細および格子生成の方法については Thompson et al. [1985] や藤井 [1994] を参照されたい。

Appendix 2

境界適合格子を PIC コードに適用するための手法

1. 「補間法」（補間係数の求め方）

通常の等間隔直交格子での area-weighting method では、粒子に働く場は格子点上の場 $E_{i,j}, E_{i+1,j}, E_{i,j+1}, E_{i+1,j+1}$ より、

$$\begin{aligned} E_p &= (1 - \alpha_1)(1 - \alpha_2)E_{i,j} + \alpha_1(1 - \alpha_2)E_{i+1,j} \\ &\quad + (1 - \alpha_1)\alpha_2E_{i,j+1} + \alpha_1\alpha_2E_{i+1,j+1} \end{aligned}$$

で与えられる（図 14）。

今、境界適合格子上の任意の四辺形 Q を単位区間 $I^2 = [0, 1] \times [0, 1]$ に変換する際に、線形関数が保たれているとして area-weighting method を適用すると、補間係数 α_1, α_2 は、

$$\begin{aligned} \alpha_2 &= \frac{-p + (p^2 + q)^{1/2}}{x_{i+1,j+1}^s - 1}, \quad (x_{i+1,j+1}^s \neq 1 \text{ のとき}) \\ &= \frac{y^s}{1 + x^s(y_{i+1,j+1}^s - 1)}, \quad (x_{i+1,j+1}^s = 1 \text{ のとき}) \\ \alpha_1 &= \frac{x^s}{1 + \alpha_2(x_{i+1,j+1}^s - 1)} \end{aligned}$$

と求められる。ここで、

$$x^s = \frac{(x - x_{i,j})(y_{i,j+1} - y_{i,j}) - (y - y_{i,j})(x_{i,j+1} - x_{i,j})}{(x_{i+1,j} - x_{i,j})(y_{i,j+1} - y_{i,j}) - (y_{i+1,j} - y_{i,j})(x_{i,j+1} - x_{i,j})}$$

$$y^s = \frac{(x_{i+1,j} - x_{i,j})(y - y_{i,j}) - (y_{i+1,j} - y_{i,j})(x - x_{i,j})}{(x_{i+1,j} - x_{i,j})(y_{i,j+1} - y_{i,j}) - (y_{i+1,j} - y_{i,j})(x_{i,j+1} - x_{i,j})}$$

$$p = (1 + x^s(y_{i+1,j+1}^s - 1) - y^s(x_{i+1,j+1}^s - 1))/2, \quad q = y^s(x_{i+1,j+1}^s - 1)$$

である。

実際の計算では、 $x_{i+1,j+1}^s \simeq 1$ を避けるためにニュートン法を用いて、

$$\alpha_2^0 = \frac{y^s}{1 + x^s/x_{i+1,j+1}^s(y_{i+1,j+1}^s - 1)} \quad (15)$$

$$\alpha_2^i = \frac{y^s(1 + \alpha_2^{i-1}(x_{i+1,j+1}^s - 1))}{1 + \alpha_2^{i-1}(x_{i+1,j+1}^s - 1) + x^s(y_{i+1,j+1}^s - 1)}, \quad (i \geq 1) \quad (16)$$

という繰り返し演算を行う。

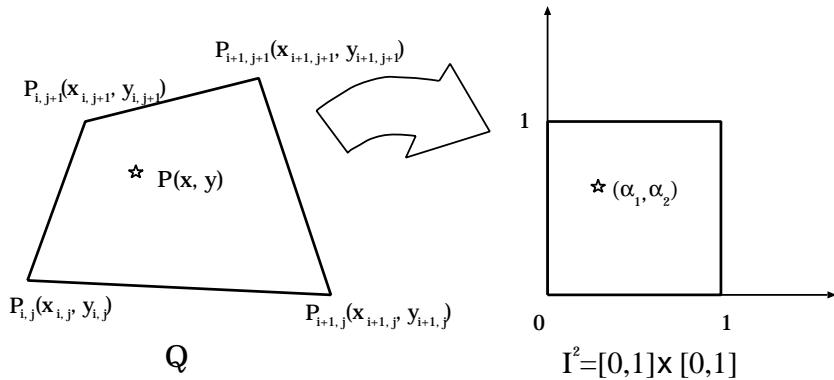


図 14 四辺形 Q の単位区間 $I^2 = [0, 1] \times [0, 1]$ への変換

2. 「粒子局在化法」（粒子が所属するセルを同定する手法）

非一様格子上では、粒子の位置情報 $P(x, y)$ のみから、その粒子が所属するセルを割り出すのは困難である。そこで、以下の step 1 ~ 6 から成る粒子追跡アルゴリズムを用いて、粒子が所属するセルの同定を行う。この粒子追跡アルゴリズムは、「補間法」の α_1, α_2 を用い、粒子が所属するセル番号 (i, j) を効率的に求めるアルゴリズムである。

注) ここでは、セル (i, j) は格子点 $P_{i,j}, P_{i+1,j}, P_{i,j+1}, P_{i+1,j+1}$ に囲まれた領域としている。

step 1: 仮のセル番号 (i, j) に粒子が 1 ステップ前にいたセルのもの (i_0, j_0) を代入する

step 2: セル (i, j) で式 (15) を実行し、補間係数 α_1^0, α_2^0 を計算する

step 3: セル番号 (i, j) に補間係数を加える $(i + \alpha_1^0, j + \alpha_2^0)$

step 4: $(i, j) = (\text{INT}(i + \alpha_1^0), \text{INT}(j + \alpha_2^0))$ とする

step 5: セル (i, j) で式 (15), (16) を用いて、 α_1, α_2 を求める

step 6: $(\alpha_1, \alpha_2) \in I^2$ なら O.K.。違うなら step 3 に戻り、step 3 ~ 6 を繰り返す。

step 6 の条件判断を行わず、step 3 ~ 5 を 2 ~ 4 回繰り返す場合もある（通常 3 回の繰り返しで充分である）。

参考文献

Kazeminezhad, F., S. Zalesak, and D. Spicer, A particle model on an unstructured mesh, *Comput. Phys. Commun.*, 90, 267–292, 1995

Kallio, E., and P. Janhunen, Atmospheric effects of proton precipitation in the Martian atmosphere and its connection to the Mars-solar wind interaction, *J. Geophys. Res.*, 106, 5617–5634, 2001.

Lipatov, A., *The hybrid multiscale simulation technology*, Springer, 2002.

Westermann, T., Numerical modelling of the stationary Maxwell-Lorentz system in technical devices, *Int. J. Numer. Modelling. Electron. Networks, Devices*

and Fields, 7, 43–67, 1994.

Terada, N., S. Machida, and H. Shinagawa, Global hybrid simulation of the Kelvin-Helmholtz instability at the Venus ionopause, *J. Geophys. Res.*, in press.

Lapenta, G., and J. Brackbill, Dynamic and selective control of the number of particles in kinetic plasma simulations, *J. Comput. Phys.*, 115, 213–227, 1994.

Wu, C. C., MHD modelling of the earth's magnetosphere, in *Computer Simulation of Space Plasmas*, edited by H. Matsumoto and T. Sato, p. 155–177, Terra Sci./D. Reidel, 1985.

Vahedi, V., and M. Surendra, A Monte Carlo collision model for the particle-in-cell method: Applications to argon and oxygen discharges, *Comput. Phys. Commun.*, 87, 179–198, 1995.

Thompson, J. F., Z. U. A. Warsi, and C. Wayne Mastin, *Numerical grid generation: foundations and applications*, North-Holland, New York, 1985.

藤井孝蔵, 流体力学の数値計算法, 東京大学出版会, 1994.

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つても過言ではない。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ないに置く必要がある。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 ϕ にあてはめると、システムの両端における電位 ϕ は同じでなければならず、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たために、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る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 ρ が、 $\rho(x = L) = \rho(x = 0)$ を仮定する必要がある。非周期的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_p を持つことができる。この特解 ϕ_p 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

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

さらに中心差分の原理と周期性 $p(x+L) = p(x)$ を利用すると

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

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

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

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。

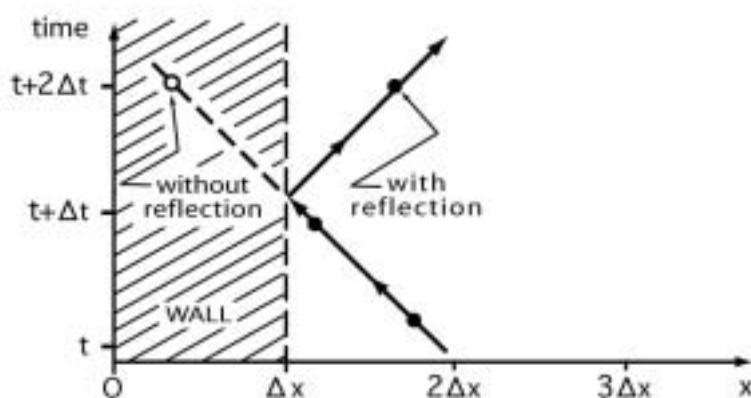


図1 . 拘束プラズマ境界条件を扱う場合の境界近傍での粒子の取り扱い

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ッ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

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

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

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。

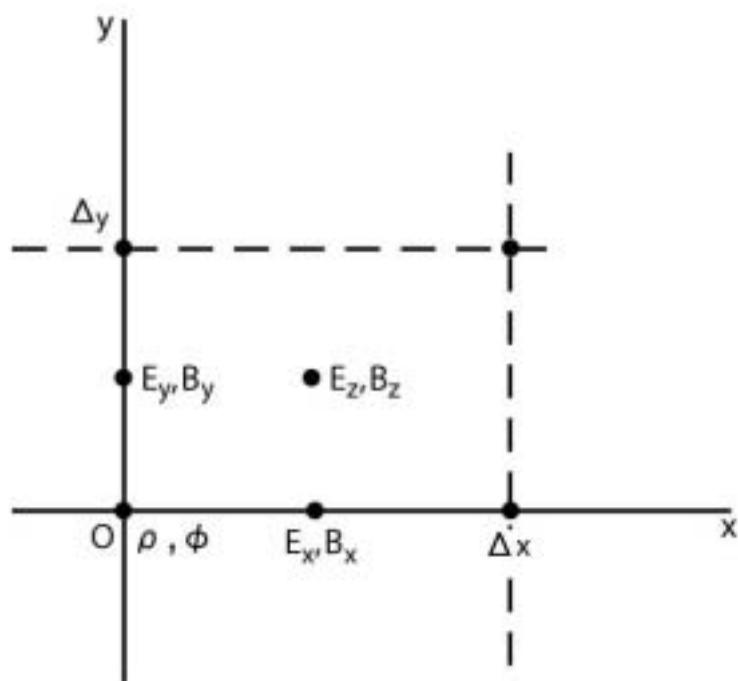


図2 . 導体境界条件を使用する場合の境界($x=0$)近傍のグリッド配置

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、大きくわ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、仮想的に磁気单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てい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。

さらに純粹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ので、興味深い方法であるといえる。

いづ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。

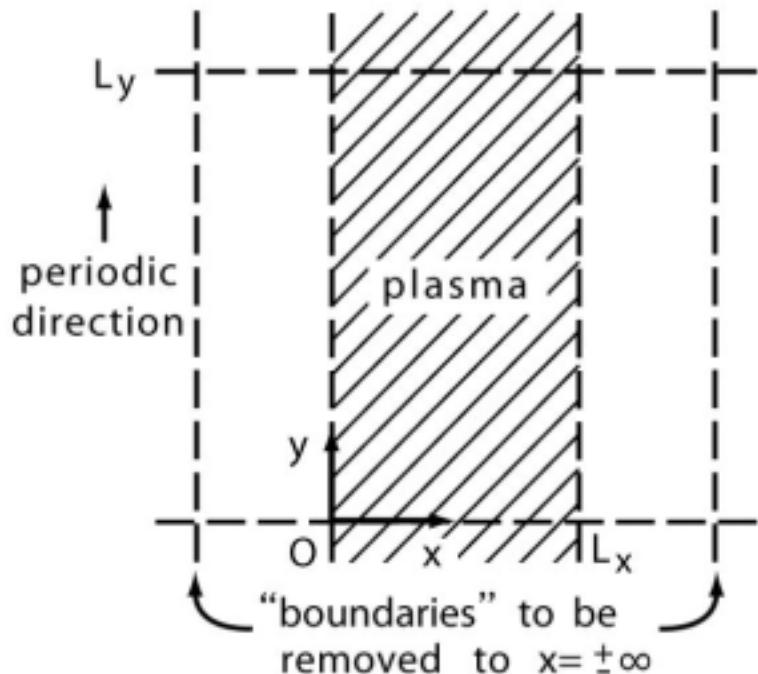


図3 . 2次元のシミュレーション空間の $x < 0, x > L_x$ の領域に吸収境界を取り付け、y方向は周期境界を設定した例。

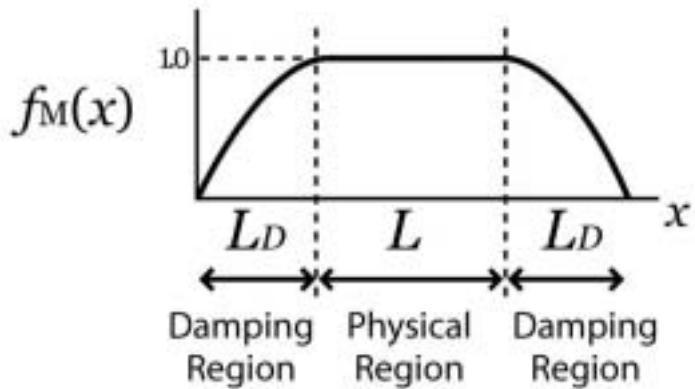


図4 . 吸收境界を物理領域の両側に設け、この領域では電界、磁界を減衰させることによって反射を抑える。

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。

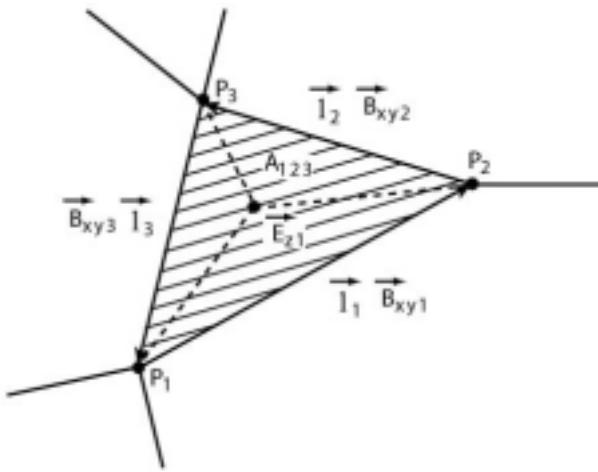


図5 . 三角形要素上における電界、磁界の離散化。

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。

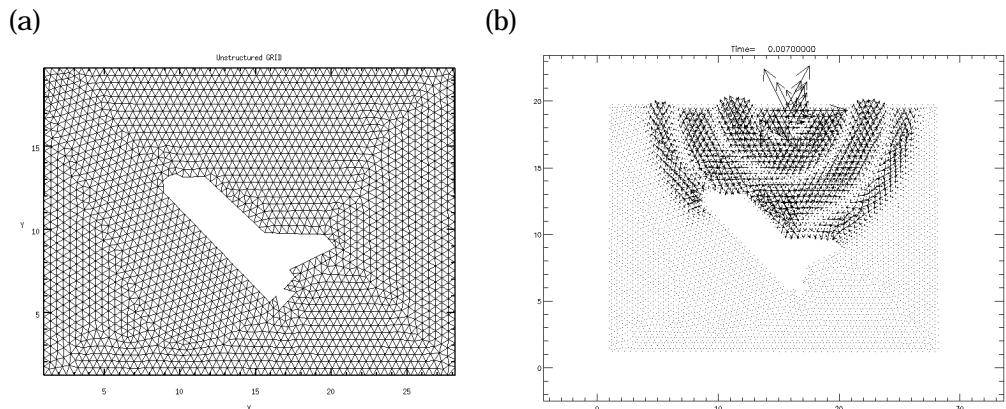


図6 . 2次元のシミュレーション空間に導体境界条件を内部境界として使用して飛翔体をモデル化(a)を行い、電磁波の伝播実験を行った例(b)

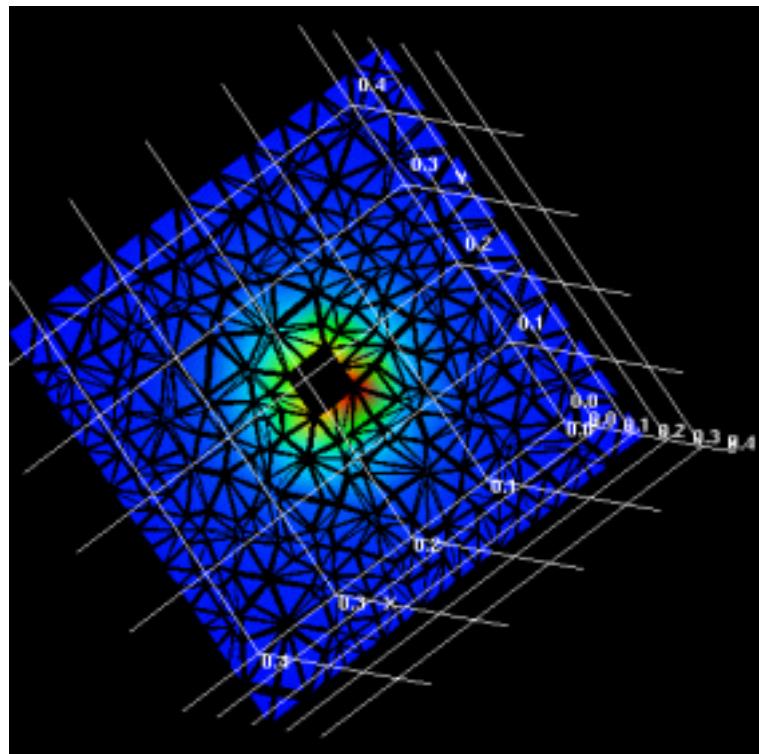


図7 . 3次元の飛翔体環境シミュレーションコードの例。4面体によってシミュレーション空間を離散化をあこなっている。

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