

PIC法による磁気プラズマ シミュレーション

物理学類 4年

櫻井駿介

2015/10/30 天体形成研究会

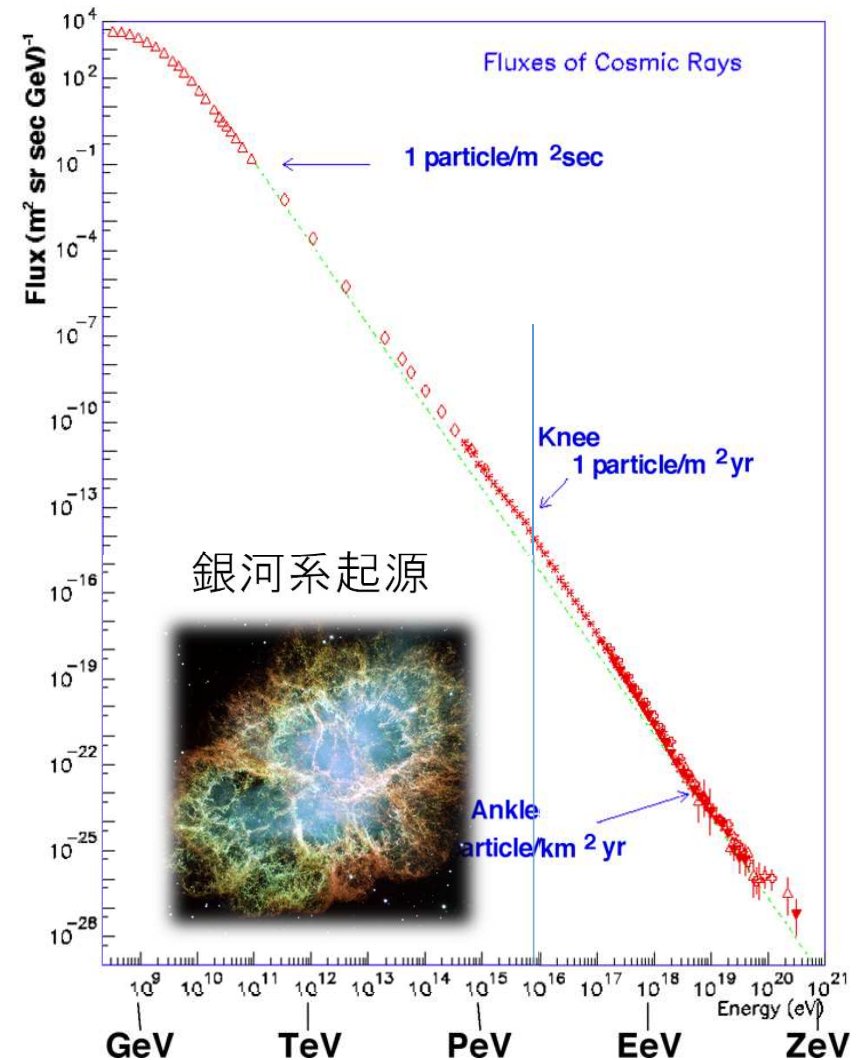
動機—宇宙線とプラズマシミュレーション

宇宙線(Cosmic Ray) 1912 Hess
90%H, 9%Heで非熱的スペクトルを持つ
 10^{15} eV以下のものは銀河系内起源

フェルミ加速 1949 Fermi
散乱体と粒子の弾性衝突の結果、
統計的に粒子が加速される

超新星残骸仮説
超新星爆発の際に発生した衝撃波が
散乱体となり効率よく加速

超新星残骸は希薄なプラズマ
→無衝突プラズマ計算が有効



図上：かに星雲©NASA

図下：宇宙線のエネルギースペクトル 2/25

Vlasovシミュレーション

Vlasov方程式

運動論方程式の中でも特に無衝突かつローレンツ力のみが働く場合に有効
→希薄なプラズマは無衝突かつ電磁場に支配されており最適

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} + \frac{q}{m} \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = 0$$

Vlasovシミュレーションでは分布関数 $f = f(t, \vec{x}, \vec{v})$ を解く

分布関数の性質は以下の通り

$$n(t, \vec{x}) = \int f(t, \vec{x}, \vec{v}) d\vec{v} \quad \text{粒子密度} n$$

$$n(t, \vec{x}) \vec{u}(t, \vec{x}) = \int f(t, \vec{x}, \vec{v}) \vec{v} d\vec{v} \quad \text{平均速度} u$$

シミュレーションに用いる方程式系

Vlasov方程式(p は粒子種を表す)

$$\frac{\partial f_p}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f_p}{\partial \vec{x}} + \frac{q_p}{m_p} \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right) \cdot \frac{\partial f_p}{\partial \vec{v}} = 0$$

Maxwell方程式

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi \sum_p q_p \int f_p d\vec{v} \qquad \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -c \vec{\nabla} \times \vec{E}$$

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = c \vec{\nabla} \times \vec{B} - 4\pi \sum_p q_p \int f_p \vec{v} d\vec{v} \qquad \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$$

分布関数の代わりに、分布を満たす粒子の運動を解く方法(粒子法)

Particle In Cell法は粒子法的一种、位相空間上での粒子の運動方程式を解く

Particle In cell法(PIC)

PIC法

個々の粒子は空間を自由に動き回る一方、電磁場の計算には空間格子を利用し、粒子はその内部に存在

→Particle in Cell (Birdsall and Longdon”PLASMA PHYSICS VIA COMPUTER SIMULATION”1991)

超粒子

電子一つ一つの運動を計算することは不可能

→多数の電子(イオン)をまとめた超粒子が計算の対象

超粒子は近傍の格子点上の電磁場の影響を受ける

超粒子は位相空間内の特性線に沿って運動

これを表すのが超粒子の運動方程式

超粒子の従う運動方程式

超粒子は位相空間上で以下の運動方程式に従う(pは粒子種)

固有速度の時間変化(加速、相対論的運動方程式)

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = \frac{q_p}{m_p} \left(\vec{E} + \frac{\vec{u}_p}{\gamma_{u,p} c} \times \vec{B} \right) \quad \text{c.f. 一般の速度を用いた運動方程式} \quad \frac{d}{dt} \frac{\vec{v}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \frac{q}{m} \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right)$$

位置の時間変化(移動)

ローレンツ因子(固有速度)

$$\frac{d\vec{x}_p}{dt} = \frac{\vec{u}_p}{\gamma_{u,p}} \quad \gamma_{u,p} \equiv \sqrt{1 + \frac{u_p^2}{c^2}}$$

これと電磁場の時間変化の式

(Ampere-Maxwell & Faraday's law)を交互に計算する

時間更新及び求める物理量

計算順序は以下の通り

1. 速度の更新
2. 位置の更新
→ 運動方程式
3. 電流密度の計算
→ 電荷保存法(後述)
4. 電磁場の更新
→ Maxwell方程式(後述)

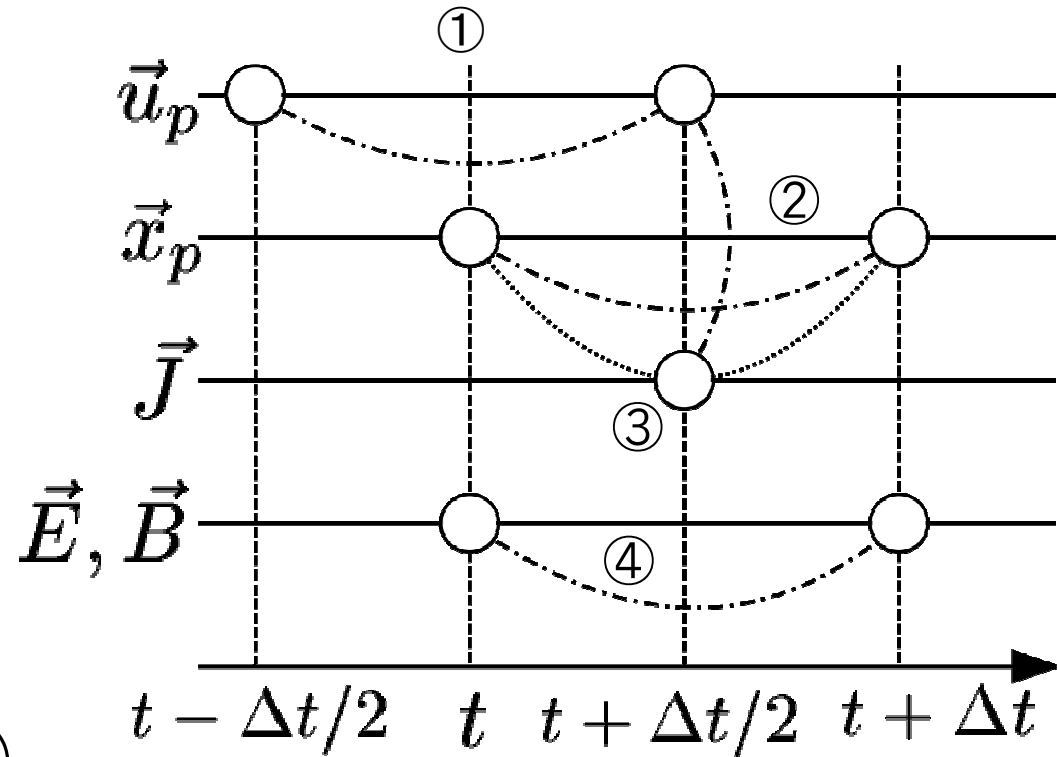


図: 時間更新概念図

速度と位置は互い違いに定義され、電流密度は半整数時間ステップ、電磁場は整数時間ステップに定義される
→ 各計算には工夫が必要、詳細に説明

運動方程式を解く

Buneman-Boris法

超粒子の運動方程式

差分化された運動方程式

加速

$$\frac{\vec{u}_p^{t+\Delta t/2} - \vec{u}_p^{t-\Delta t/2}}{\Delta t} = \frac{q_p}{m_p} \left(\vec{E}^t + \frac{\vec{u}_p^t}{\gamma_{u,p}^t c} \times \vec{B}^t \right)$$

移動

$$\frac{\vec{x}_p^{t+\Delta t} - \vec{x}_p^t}{\Delta t} = \frac{\vec{u}_p^{t+\Delta t/2}}{\gamma_{u,p}^{t+\Delta t/2}}$$

加算平均で置き換えた加速の式

$$\frac{\vec{u}_p^{t+\Delta t/2} - \vec{u}_p^{t-\Delta t/2}}{\Delta t} = \frac{q_p}{m_p} \left(\vec{E}^t + \frac{\vec{u}_p^{t+\Delta t/2} + \vec{u}_p^{t-\Delta t/2}}{2\gamma_{u,p}^t c} \times \vec{B}^t \right)$$

加速の式の固有速度は定義されていない

→前後の加算平均で置き換える

磁場と外積の為速度ベクトルは分離不可能

→Buneman-Boris法

Buneman-Boris法

変形した超粒子の加速の式

$$\vec{u}_p^+ - \vec{u}_p^- = \frac{q_p \Delta t}{2 \gamma_{u,p}^t m_p c} (\vec{u}_p^+ + \vec{u}_p^-) \times \vec{B}^t$$

ここで物理量の定義は

加速の式の右辺は $\vec{u}_p^+ + \vec{u}_p^-$
と直行するから

$$\vec{u}_p^- \equiv \vec{u}_p^{t-\Delta t/2} + \frac{q_p}{m_p} \frac{\Delta t}{2} \vec{E}^t$$

$$\vec{u}_p^+ \equiv \vec{u}_p^{t+\Delta t/2} - \frac{q_p}{m_p} \frac{\Delta t}{2} \vec{E}^t$$

$$|\vec{u}_p^+| = |\vec{u}_p^-|$$

\vec{u}_p^+ は \vec{u}_p^- を回転したベクトル、かつ \vec{u}_p^+ は更新後の速度を含む

→ \vec{u}_p^- を利用した回転ベクトルを考えれば速度の更新が可能

回転ベクトル

幾何学的な関係より

$$\vec{\alpha} \equiv -\tan \frac{\theta}{2} \hat{\vec{B}}^t = \frac{q_p \Delta t}{2\gamma_{u,p}^t m_p c} \vec{B}^t \quad \tan \frac{\theta}{2} = \frac{q_p B^t \Delta t}{2\gamma_{u,p}^t m_p c} = \frac{\Omega_{c,p}^t \Delta t}{2}$$

$$\vec{\beta} \equiv \frac{2\vec{\alpha}}{1 + \alpha^2} \quad \theta = \Omega_{c,p}^t \Delta t \left(1 - \frac{(\Omega_{c,p}^t \Delta t)^2}{12} + \dots \right)$$

ここで α 及び β は回転ベクトル
これらと新たなベクトル \vec{u}_p^* を用いると
回転の計算が可能になる

$$\vec{u}_p^* \equiv \vec{u}_p^- + \vec{u}_p^- \times \vec{\alpha}$$

$$\vec{u}_p^+ = \vec{u}_p^- + \vec{u}_p^* \times \vec{\beta}$$

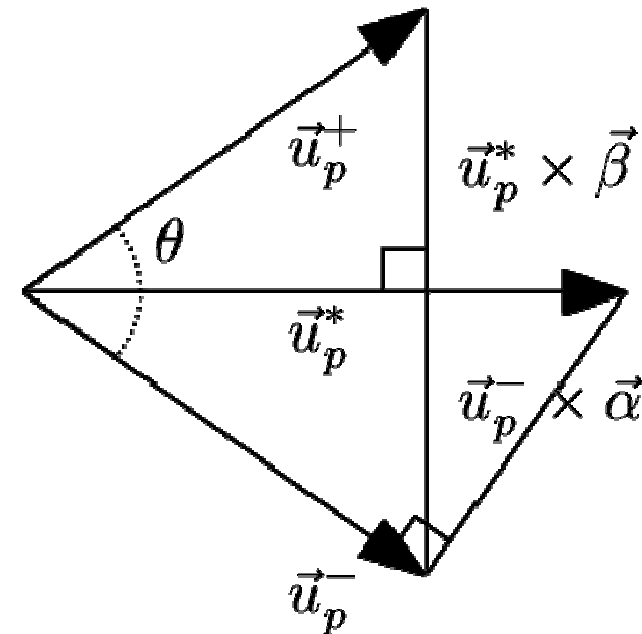


図: 幾何学的関係図

超粒子の運動方程式解法まとめ

回転ベクトルを求めた後以下の式に従い計算を行うことによって
速度の更新は4ステップで完了する

$$\begin{array}{ccc} \vec{u}_p^- = \vec{u}_p^{t-\Delta t/2} + \frac{q_p}{m_p} \frac{\Delta t}{2} \vec{E}^t & & \vec{u}_p^+ = \vec{u}_p^- + \vec{u}_p^* \times \vec{\beta} \\ \downarrow & \nearrow & \downarrow \\ \vec{u}_p^* = \vec{u}_p^- + \vec{u}_p^- \times \vec{\alpha} & & \vec{u}_p^{t+\Delta t/2} = \vec{u}_p^+ + \frac{q_p}{m_p} \frac{\Delta t}{2} \vec{E}^t \end{array}$$

速度の更新後、位置の更新は容易に行える

$$\vec{x}_p^{t+\Delta t} = \vec{x}_p^t + \frac{\vec{u}_p^{t+\Delta t/2}}{\gamma_{u,p}^{t+\Delta t/2}} \Delta t$$

以上の量を用いて電磁場の計算を行う

電磁場を解く

電荷保存法

電磁場の陰解法

差分化された電磁場の方程式

電流密度

各格子点に定義、先に更新した速度を用いて計算を行う
→超粒子と格子点の情報のやり取りには形状関数を用いる

$$\vec{J}^{t+\Delta t/2} = \sum_p q_p \frac{\vec{u}_p^{t+\Delta t/2}}{\gamma_{u,p}^{t+\Delta t/2}}$$

電磁場

各格子点に定義、電流密度を含めてMaxwell方程式を解く
今回は陰解法である、星野法を用いる

$$\frac{\vec{B}^{t+\Delta t} - \vec{B}^t}{\Delta t} = -c \vec{\nabla} \times \vec{E}^{t+\Delta t/2}$$

$$\frac{\vec{E}^{t+\Delta t} - \vec{E}^t}{\Delta t} = c \vec{\nabla} \times \vec{B}^{t+\Delta t/2} - 4\pi \vec{J}^{t+\Delta t/2}$$

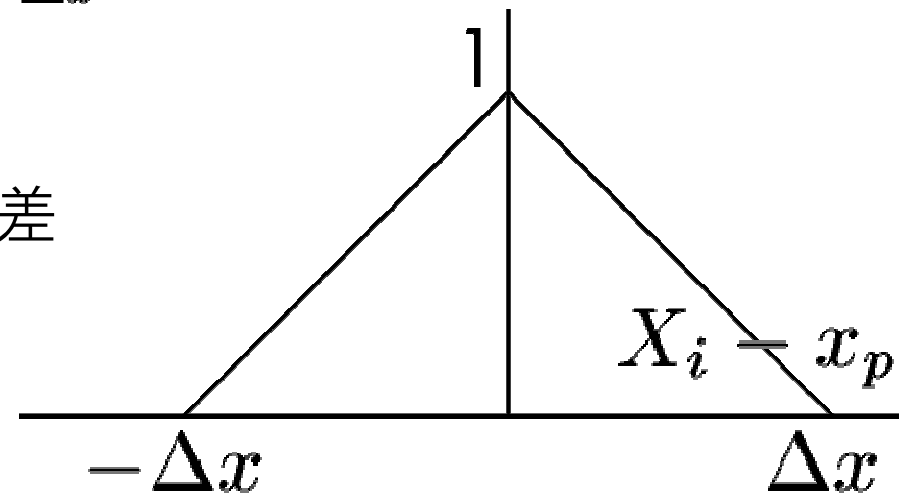
形状関数

超粒子が格子点と情報をやり取りする際に、各格子点に対してどれだけ寄与するかを表す指標

例.CIC関数

$$S_i(x_p) = \begin{cases} 1 - \frac{|X_i - x_p|}{\Delta x}, & \text{if } |X_i - x_p| \leq \Delta x \\ 0, & \text{else} \end{cases}$$

CICの場合格子点と超粒子の位置の差の大きさによって寄与を増減させる
→ 超粒子の大きさを考える事に相当
より実際の現象に近づける



図：一次元形状関数概念図

電荷保存法

電場から求める電荷密度と超粒子の速度から求める電流密度

は連続の式を満たすとは限らない

これを防ぐため電荷保存法を用いる

差分化された連続の式(二次元)

$$\frac{\rho_{e,i+1/2,j+1/2}^{t+\Delta t} - \rho_{e,i+1/2,j+1/2}^t}{\Delta t} + \frac{J_{x,i+1,j+1/2}^{t+\Delta t/2} - J_{x,i,j+1/2}^{t+\Delta t/2}}{\Delta x} + \frac{J_{y,i+1/2,j+1}^{t+\Delta t/2} - J_{y,i+1/2,j}^{t+\Delta t/2}}{\Delta y} = 0$$

この式から電荷密度を求める

ここで電流密度は超粒子の位置、速度、形状関数を用いて

以下の様に表される

$$\vec{J}^{t+\Delta t/2}(X_{i,j}) = \frac{1}{\Delta x \Delta y} \sum_p q_p \frac{\vec{u}_p^{t+\Delta t/2}}{\gamma_{u,p}^{t+\Delta t/2}} S_i(x_p) S_j(y_p)$$

$$\text{ここで } x_p = \frac{x_p^{t+\Delta t} + x_p^t}{2}$$

電磁場の計算

電磁場の数値解法としては一般にFDTD法(Yee,1966)が知られているが電場と磁場の定義される時間ステップをずらす必要がある
→これを防ぐため、東京大学の星野真弘氏が開発(博士論文, 1986)した方法を用いる(以下星野法)

$$\frac{\vec{B}^{t+\Delta t} - \vec{B}^t}{\Delta t} = -c\vec{\nabla} \times \vec{E}^{t+\theta\Delta t}$$

$$\frac{\vec{E}^{t+\Delta t} - \vec{E}^t}{\Delta t} = c\vec{\nabla} \times \vec{B}^{t+\theta\Delta t} - 4\pi\vec{J}^{t+\Delta t/2}$$

$$g^{t+\theta\Delta t} \equiv (1 - \theta)g^t + \theta g^{t+\Delta t}$$

星野法

電場及び磁場の時間変化量を以下の様に定義し、Maxwell方程式を変形、かつ連立すると最終式が得られる

$$\delta \vec{E} \equiv \vec{E}^{t+\Delta t} - \vec{E}^t \quad \delta \vec{B} \equiv \vec{B}^{t+\Delta t} - \vec{B}^t$$

$$\delta \vec{B} = -\theta c \Delta t \vec{\nabla} \times \delta \vec{E} - c \Delta t \vec{\nabla} \times \vec{E}^t$$

$$\delta \vec{E} = \theta c \Delta t \vec{\nabla} \times \delta \vec{B} + c \Delta t \vec{\nabla} \times \vec{B}^t - 4\pi \Delta t \vec{J}^{t+\Delta t/2}$$

$$\begin{aligned} & \left[1 - (\theta c \Delta t)^2 \vec{\nabla}^2 \right] \delta \vec{B} \\ &= \theta (c \Delta t)^2 \left(\vec{\nabla}^2 \vec{B}^t + \frac{4\pi}{c} \vec{\nabla} \times \vec{J}^{t+\Delta t/2} \right) - c \Delta t \vec{\nabla} \times \vec{E}^t \end{aligned}$$

右辺は既知量、しかし左辺は求めたい格子点の前後の情報も用いる
→反復法を用いて計算を行う

磁場の発散の考慮

差分化したFaradayの法則を磁場の発散の式へ代入すると時間更新前後で磁場の発散が保存されていることがわかる

$$B_{x,i+1/2,j}^{t+\Delta t} = B_{x,i+1/2,j}^t - c\Delta t \frac{E_{z,i+1/2,j+1/2}^{t+\Delta t/2} - E_{z,i+1/2,j-1/2}^{t+\Delta t/2}}{\Delta y}$$

$$B_{y,i,j+1/2}^{t+\Delta t} = B_{y,i,j+1/2}^t + c\Delta t \frac{E_{z,i+1/2,j+1/2}^{t+\Delta t/2} - E_{z,i-1/2,j+1/2}^{t+\Delta t/2}}{\Delta x}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}^{t+\Delta t} = \vec{\nabla} \cdot \vec{B}^t$$

初期条件で発散が0である状態を与えれば保存される

→磁場の発散の維持

pCANSについて

pCANS

VlasovシミュレーションをPICを用いて行う為に開発されたパッケージであり、千葉大学の松本洋介氏らによって開発されている

予め一次元及び二次元の典型的な物理課題に対して利用可能なコードが搭載されており、無償で利用可能

詳細はpCANSのサイトを参照

テスト計算及びまとめ

二流体不安定性

異なる粒子が相対速度を持つ場合、平衡状態にあるにもかかわらず擾乱が成長してしまう現象

イオンは定常、電子が相対速度 v_0 をもつ一様なプラズマを考える
擾乱が小さいとして電子とイオンの運動方程式を線形化すれば

$$m_i n_0 \frac{\partial v_{i1}}{\partial t} = e n_0 E_1 \quad m_e n_0 \left[\frac{\partial v_{e1}}{\partial t} + v_0 \frac{\partial v_{e1}}{\partial x} \right] = -e n_0 E_1$$

擾乱が以下の固有関数で展開出来ると仮定し、電子、イオンに対する連続の式とPoissonの式を用いると

$$E_1 = E \exp(ikx - i\omega t)$$

擾乱が線型近似の
範囲で満たすべき
分散関係式である

$$1 = \omega_{pe}^2 \left[\frac{m_e/m_i}{\omega^2} + \frac{1}{(\omega - kv_0)^2} \right]$$

主なパラメータの設定

セルサイズ

$$\Delta x = \lambda_D = \sqrt{\frac{k_B T_e}{4\pi n_e e^2}}$$
$$\Delta t = \Delta x / 2$$

粒子密度

$$n_0 = 100 \text{ particle/cell}$$

イオン電子質量比

$$m_i = \frac{m_i}{m_e} = 100$$

相対速度

$$v_0 = 20 \text{ velocity}$$

規格化定数

$$c = 1.0 \quad m_e = 1.0 \quad \Delta x = \Delta y = 1.0$$

初期速度はBoltzmann分布をボックス=ミュラー法で設定(v_1)

ビーム速度はビーム密度比に応じて分配 $v_b = v_o(1 - n_b/n_o)$

計算結果

理論式との比較は現在進行中

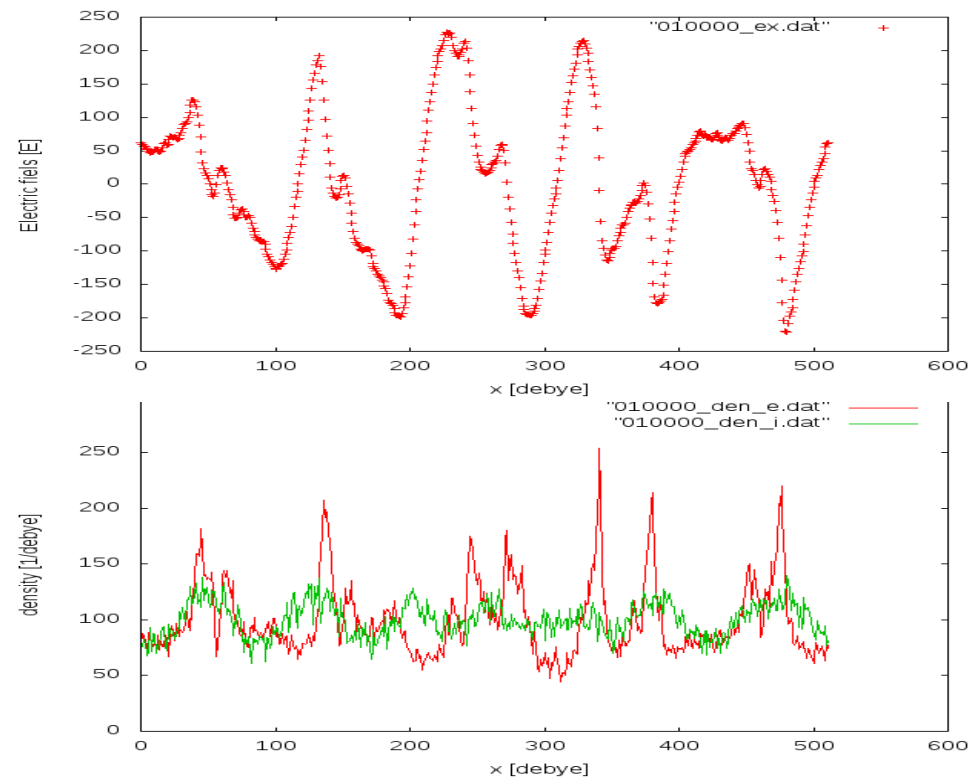
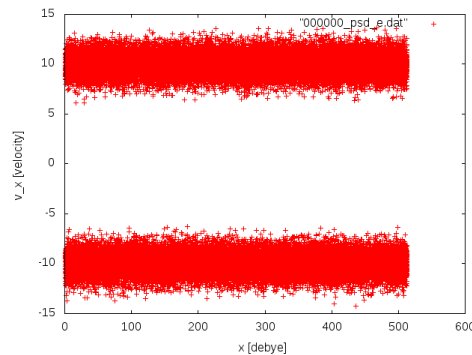
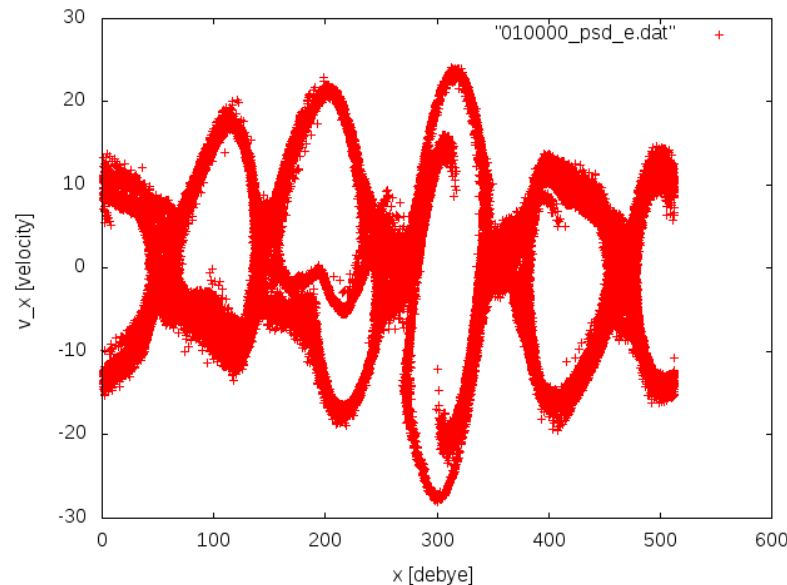
→データから波数、角振動数、分散関係を求めたい

図左上: $t=10000dt$ 位相空間

図左下: 初期状態の位相空間

図右上: $t=10000dt$ 電場

図右下: $t= //$ 粒子密度分布



今後の課題

より高度な計算に必要なこと

→計算コードのより深い理解

→解析手法の開発(Fourier変換etc...)

粒子加速の検証の為に

→一次元及び二次元での無衝突衝撃波の計算

多様な不安定性が存在する

→数値チェレンコフ不安定(Godfrey et al., 1974)

差分近似によって電磁場の速度が光速を下回り、その内部
を相対論的なプラズマが流れた際に生じる数値不安定性

→Weibel不安定性(Weibel, 1959)

速度分布関数のずれによって生じる不安定性

→これらの知識の学習、理解が必要！！