

講座

プラズマ計算機シミュレーション入門Ⅱ

3. 静電粒子シミュレーション

Electrostatic Particle Simulation

ISHIGURO Seiji

Graduate School of Engineering, Tohoku University, Sendai 980-8579, Japan (Received 13 April 1998)

Abstract

Electrostatic particle simulation is used to study such plasma phenomena as nonlinear behavior of electrostatic instabilities, sheaths, electric double layers, and electrostatic potential structures. The electrostatic particle simulation code consists of establishing charge assignment, integration of Poisson equation, and employing the time integration of momentum equation. Each procedure is described along with the boundary conditions for field and particles.

Keywords:

particle simulation, electrostatic simulation, particle-in-cell, cloud-in-cell, leap-frog method, sheath, double layer, open boundary model

3.1 はじめに

静電粒子シミュレーションは、荷電粒子の運動、それらのつくる静電場、外部磁場等を取り入れたプラズマ粒子シミュレーションで、静電波および関連した運動論的不安定性、シース、ダブルレイヤーなどの静電電位構造に関連した研究に用いられています.

プラズマ粒子シミュレーションにおける超粒子,空間格子等の基本的考え方は第2章で説明されたので,本章では計算の具体的な手順について解説します.なお,粒子シミュレーションでは非常に多くの粒子を取り扱う必要があるため用いる手法は精度と計算コストの兼ね合いで決める必要があります.粒子の運動方程式の差分に蛙跳法が用いられるのは,差分の精度を必要以上にあげる

より、粒子の数を増して統計的な精度をあげた方がよい という考えに基づいています。同様な考えから粒子の電 荷の格子点への分配も一次補間に対応する方法がよく用 いられます。

最初にシミュレーションコードの構成について概観したあと、個々の粒子の座標から空間格子での電荷密度の 求め方、格子点上の電荷密度から電場を求める方法、運動方程式の差分、初期値の設定方法、さらに、境界での 粒子の吸収や粒子入射の手順を、一次元の静電シミュレーションを中心にして、多次元の場合についても説明します。

3.2 シミュレーションコードの構成

静電粒子シミュレーションでは,荷電粒子の運動方程 式

$$m\frac{\mathrm{d}^{2}\mathbf{x}}{\mathrm{d}t^{2}} = q\left(E(\mathbf{x}) + \mathbf{v} \times B(\mathbf{x})\right) \tag{1}$$

と粒子のつくる電場を求める

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0} \tag{2}$$

$$E = -\nabla \phi \tag{3}$$

を差分化して数値的に解いていきます. 具体的には Fig.1 のように,

- 1. 粒子座標から格子点での電荷密度を求める.
- 2. ポアッソン方程式を解いて格子点上での電位を求め、さらにそれから電場を求める.
- 3.格子点での電場から個々の粒子に加わる力を求め、その力で粒子を加速し、移動する.

という手順を繰り返します. 最初に, 一次元で磁場のない場合について詳しくその手順を解説することにします.

3.3 格子点上での電荷密度の求め方

粒子座標から空間格子上に電荷を割り振る方法はいく つかありますが、ここでは一次補間に対応する PIC

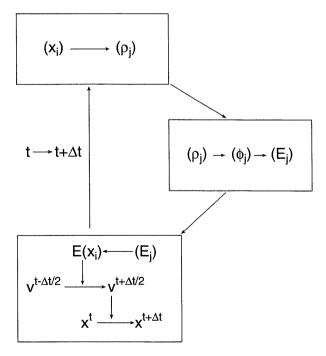


Fig. 1 A typical cycle in an electrostatic particle simulation.

(particle in cell) [1,2]あるいは CIC (cloud in cell) [3] と呼ばれる方法について説明します.この両者の方法の 実際の手続きはまったく同一で[4], 最近では PIC 法の 呼び名がよく使われます.

長さ L の系を NG 等分して格子間隔は Δx , j 番目の格子の座標を $X_j = j\Delta x$, $(j = 0, \dots, NG)$ とし、粒子種 s 粒子(超粒子)の電荷を q_s , その i 番目の粒子の座標を s_s , とすると、格子点での電荷密度は、

$$\rho_j = \sum_{s} \frac{q_s}{\Lambda x} \sum_{i} S(x_{s,i} - X_j) \tag{4}$$

となります。ただし、S(x) は分配関数で、一次補間に対応して PIC 法では

$$S(x) = \begin{cases} \frac{\Delta x - |x|}{\Delta x} & |x| < \Delta x \\ 0 & |x| > \Delta x \end{cases}$$
 (5)

です。ここでは,第2章で説明された粒子の形状因子と格子点への重み付けをひとまとめにしています。実際には,粒子の座標に最も近い二つの格子点に粒子と格子点の距離に応じて電荷を割り振ることになります。なお,境界の格子(j=0,j=NG)の電荷密度は境界条件と矛盾のないように処理する必要があります。たとえば周期境界条件の場合,電荷の分配が終了した後, $\rho_0+\rho_{NG}\to \rho_0$ としておく必要があります。

なお、空間格子の幅 Δx は数値的不安定性を避けるために $\Delta x \leq \lambda_{De}$ (λ_{De} : デバイ長) とする必要があります.

3.4 格子点上での電場の求め方

格子点上で与えられた電荷密度から格子点上での電場の求め方は種々あります。一次元の場合は電荷密度から直接電場を求める方法が用いられることもありますが、 多次元への拡張を考えて、ポアッソン方程式を解いて静電ポテンシャルを求め、さらにその静電ポテンシャルから電場を求める方法を説明します。

周期境界条件の場合、フーリエ変換を用いて以下のようにして静電ポテンシャルを得ることができます.一次元の場合 ∇^2 は $\partial^2/\partial x^2$ であり、フーリエ空間では $-k^2$ となります.そこで、電荷密度分布からフーリエ変換によりフーリエ空間での電荷密度分布を求め、 $\mathfrak{F}(k)=\widetilde{\rho}(k)/k^2$ (k は波数) よりフーリエ空間での電位分布を求めます.これを逆変換して静電ポテンシャルを得ることができます.

電荷密度は格子点上でのみ与えられているので, 微分 方程式の代わりに差分方程式を解くことになります. ポ アッソン方程式を中心差分を用いて差分化すると,

$$\frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{(\Delta x)^2} = -\frac{\rho_j}{\varepsilon_0} \tag{6}$$

となり、この差分方程式を解いて得られた格子点上での 静電ポテンシャルから

$$E_{j} = -\frac{\phi_{j+1} - \phi_{j-1}}{2\Delta x} \tag{7}$$

と、格子点上の電場 E_i を求めることができます.

差分化されたポアッソン方程式を離散フーリエ変換を用いて解きます.このとき,E(0)=E(L),から系の内部の正味の電荷は零,すなわち $\sum\limits_{j=0}^{NC^{-1}} \rho_j=0$ である必要があります.

離散フーリエ変換の数値アルゴリズムとしては高速フーリエ変換法 (FFT) (たとえば[5]を参照してください)を利用すれば非常に高速に計算することができます。格子点上の電荷密度 ρ_i から離散フーリエ変換

$$\widetilde{\rho}_n = \Delta x \sum_{i=0}^{NC-1} \rho_j e^{-ikX_j}, \quad k = \frac{2\pi n}{I}$$
(8)

により $\tilde{\rho}_n$ $(n = -NG/2, \dots, NG/2-1)$ を求め、式(6) をフーリエ変換した

$$\widetilde{\phi}_n = \frac{\widetilde{\rho}_n}{\varepsilon_0 K^2} \tag{9}$$

$$K_n^2 = k^2 \left[\frac{\sin(k\Delta x/2)}{k\Delta x/2} \right]^2, \quad k = \frac{2\pi n}{L}$$
 (10)

によりる。を求め、さらにこれを逆変換

$$\phi_{j} = \frac{1}{I} \sum_{n=-N/2}^{NG/2-1} \widetilde{\phi}_{n} e^{ikX_{j}}, \quad k = \frac{2\pi n}{I}$$
 (11)

することによって格子点上の静電ポテンシャル ϕ_i を得ることができます.

ここで系内の全電荷が零であることから $\widetilde{\rho}_0$ =0 となることに注意してください. また ρ_i および ϕ_i が実の量であることを使うと FFT での計算量を減らすことが可能です.

両端接地の境界条件の場合は、フーリエ変換の代わり に sin 変換

$$\widetilde{\rho}_n = \Delta x \sum_{i=1}^{NC-1} \rho_i \sin(kX_i), \quad k = \frac{\pi n}{I}$$
(12)

を用いてポアッソン方程式を解くことができます.この場合は系内の正味の電荷が零である必要はありません.また,境界で電場が零の境界条件の場合は cos 変換

$$\widetilde{\rho}_n = \Delta x \sum_{i=0}^{NG-1} \rho_i \cos(kX_i) , \quad k = \frac{\pi n}{I}$$
(13)

を用いれば同じ手順で解くことができます. ただしこの

境界条件の場合、粒子の電荷を空間格子に割り振ったのち、境界での電荷密度を2倍にしておく必要があります。これは-L < x < L の系を考えてx = 0 で対称と仮定していることに対応しています。なお、 \sin 変換、 \cos 変換ともに FFT の手法を使って行えるので、非常に高速に計算することが可能です[5].

石黒

ポアッソン方程式を解く際にフーリエ変換の手法を用いることの利点は、高速であることのほかに、空間的なフィルタをフーリエ空間でかけることができる、電荷密度や静電ポテンシャルのフーリエ成分が同時に得られるといったことがあげられます.

3.5 運動方程式の積分

格子点上での電場が求められたら、次に運動方程式から粒子の加速、移動をします。運動方程式は二つの一階の微分方程式に分解し、蛙跳法(leap-frog)を用いて差分化します。

$$\frac{v_{s,i}^{t+\Delta t/2} - v_{s,i}^{t-\Delta t/2}}{\Delta t} = \frac{q_s}{m_s} E(x_{s,i}^t)$$
 (14)

$$\frac{x_{s,i}^{t+\Delta t} - x_{s,i}^t}{\Delta t} = v_{s,i}^{t+\Delta t/2} \tag{15}$$

ここで, 粒子位置での電場は

$$E(x_{s,i}) = \sum_{j} S(x_{s,i} - X_j) E_j$$
 (16)

より求め、式(14)から 速度を $t-\Delta t/2$ から $t+\Delta t/2$ まで進め、その速度を使って(15)によって粒子座標を t から $t+\Delta t$ まで進めます(Fig. 2). ここで S(x) は粒子の電荷の格子点への分配のときと同じようにとり、PIC 法では、粒子に最も近い二つの格子点の電場の値から線形補間により粒子座標での電場を計算します.

時間ステップ幅は数値的安定性の要請, さらには精度を確保するために, $\omega_{\rm pe} \Delta t = 0.2$ ($\omega_{\rm pe}$:プラズマ周波数)程度にとられます.

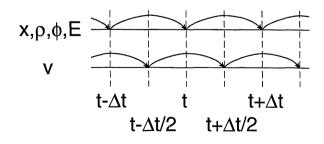


Fig. 2 Sketch of leap-frog integration method.

3.6 初期条件の設定

粒子シミュレーションの初期設定としては,系内をプラズマで満たした状態,粒子がない状態のどちらも可能です.初期条件として系がプラズマで満たされた状態を与える場合,t=0 での粒子の速度,座標を決める必要があります.与えられた粒子の速度分布 $f_0(v)$,空間分布 $n_0(x)$ から個々の粒子の速度,座標を決めるには累積分布関数(cumulative distribution function)を使う方法が一般的です.任意の分布関数 g(x) ($a \le x \le b$) に対して累積分布関数は

$$G(x) = \frac{\int_{a}^{x} g(x') dx'}{\int_{a}^{b} g(x') dx'}$$

$$\tag{17}$$

と定義できます。ここで G(a)=0, G(b)=1 となります。N 個の粒子の分布を決めるとすると,0<R<1 の範囲で一様になるように N 個の数を順番(N 個の一様乱数でもよい)につくり,G にあてはめ,それに対応する x を順番につくっていきます。そうすれば,最初に指定した分布関数 g(x) に対応する粒子の組が生成されます(Fig. 3)。

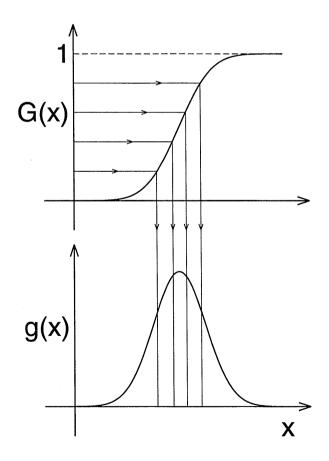


Fig. 3 Inversion of cumulative distribution function.

t=0 での粒子の座標,速度が与えられたら、蛙跳法による時間積分を開始するために $t=-\Delta t/2$ での速度を求める必要があります。これは、t=0 での電場を求めて半時間ステップだけ粒子の速度を戻します。

3.7 境界での粒子の取り扱い方

ここで粒子の境界での取り扱いについて説明します. 周期境界条件では,同じ系のコピーが連なっていると考えればよいので,系の長さを L として x=L の境界から粒子が飛び出したときは $x \rightarrow x - L$, x=0 の境界から飛び出したときは, $x \rightarrow x + L$ とします.

つぎに単純な境界条件は反射条件で、x=0の境界を粒子が横切った場合は、 $x \rightarrow -x$ 、 $v \rightarrow -v$ とします。この場合ポテンシャルの境界条件としては固定境界条件あるいは電場零の境界条件が適当です。

つぎに固体壁や電極とプラズマが接している場合について考えます。x=0 の境界が電気的に浮いている電極で、その境界を横切った粒子はその電極に吸収されると仮定します。その粒子の電荷はx=0 の格子点に割り振り、そこにとどまるとします。境界条件は境界で電場零の条件を採用し \cos 変換を用いてポアッソン方程式を解きます。その際 x=0 の格子点の電荷密度を 2 倍にしておく必要があります。これは \cos 変換が -L < x < L の系を仮想し、x=0 で対称としていることに対応しているからです。

固定境界条件で sin 変換を用いてポテンシャルを求める場合は、境界の電荷密度の情報は用いないので、境界を横切った粒子は単に系から取り去るだけで十分です.

境界から系内に指定した分布関数で粒子を入射する手 順について説明します. 個々の粒子の速度は、初期設定 の際に説明した累積分布関数を使って行えます. 分布関 数 f (v) に対応した速度分布で粒子を入射する場合 $F(v) = \int_0^v v' f(v') dv' / \int_0^\infty v' f(v') dv'$ を計算し、その逆関 数から個々の粒子の速度を求めます.たとえば、f(v)が半マクスウェル分布の場合は、粒子の熱速度を v_t, R を 0 < R < 1 の一様乱数として $v = v_{+} \sqrt{-2 \ln R}$ から粒子 の速度を求め、境界から粒子を入射します(Fig. 4). 一方, f(v) がシフトマクスウェル分布などのように F(v) が解析的に表わされない場合は数値的に積分して F(v) を求めておき,0 < R < 1 の一様乱数 R から F(v)に対応する v を求めます。時間的に一定の粒子を入射 する場合, 各時間ステップごとに入射する粒子の数はフ ラックス $\Gamma = \int_0^\infty v f(v) dv$ から求めておきます. また, x=0から入射したときの最初の座標は新たな一様乱数

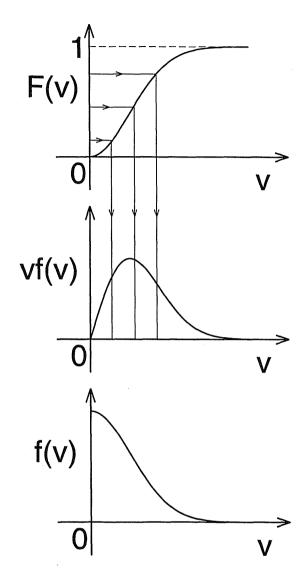


Fig. 4 Flux distribution function for emitting particles.

R を生成し $x=v\Delta tR$ とし、入射した粒子が適度に分散 するようにします (Fig. 5).

境界が固体壁や電極ではなく無限プラズマと接している場合を模擬する場合はその境界にシースができたり援乱が生じるのは好ましくありません。このような擾乱を持ち込まずかつシースも生じない自己無撞着開境界モデルが最近開発されました[6]. ここでは境界を横切る粒子の正味のフラックスが時間的に一定となるように入射する粒子の数を決めます。一例として、粒子の速度分布がマクスウェル分布からずれており上流から下流に流れている場合を考えます。擾乱のない場合に、その速度分布で時間ステップあたりに境界を横切る正味の粒子の数を計算しておき $N_{\rm net}$ とします。各時間ステップごとに

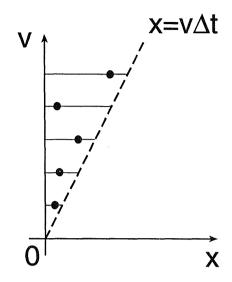


Fig. 5 Particle loading at a particle emissive wall.

上流の境界から系外に出る粒子の数 $N_{\rm int}^{\rm up}$ をかぞえ,上流の境界から入射する粒子数 $N_{\rm int}^{\rm up}$ を

$$N_{\rm in}^{\rm up} = N_{\rm net} - N_{\rm out}^{\rm up} \tag{18}$$

として求め,指定した速度分布関数で粒子を入射します. 下流の境界に関しても同様に下流の境界から系外に出る 粒子の数 $N_{
m out}^{
m down}$ をかぞえ,下流の境界から入射する粒 子数 $N_{
m in}^{
m down}$ を

$$N_{\rm in}^{\rm down} = N_{\rm out}^{\rm down} - N_{\rm net} \tag{19}$$

として求め、指定した分布関数で粒子を入射します.このとき、各時間ステップに系から出る粒子の数は系の内部の状態に依存し、時間ステップごとに異なります.その数に応じて入射する粒子の数を調整しますので系の内部の粒子の数は常に一定値となります.この方法によると境界にシースをつくらず、非物理的な擾乱を与えることなく指定した分布関数で系の内部に粒子を入射できます.このモデルでは、静電ポテンシャルに対しては電場が境界で零となる境界条件が用いられます.

3.8 多次元のシミュレーション

静電粒子シミュレーションにおいてはこれまで述べてきた一次元モデル(空間一次元,速度空間一次元)の様々な拡張がおこなわれています。空間一次元速度空間三次元(1D3V),空間二次元速度空間三次元(2D3V,2½次元),さらに三次元(空間三次元速度空間三次元)といったモデルが用いられます。ここで、空間の次元より速度空間の次元が大きいモデルは外部磁場による粒子の

サイクロトロン運動を考慮したものです.

多次元で磁場が存在する場合の運動方程式の差分化お よびその解法,電荷の格子点への分配については第2章 をご覧ください.

ここでは、二次元空間のポアッソン方程式の解法を説明します。x 方向の系の長さを L_x , y 方向の系の長さを L_y , それぞれの方向の格子点の分割数を NG_x , NG_y , 格子間隔を Δx , Δy とすると、ポアッソン方程式

$$\nabla^2 \phi(x, y) = -\frac{\rho(x, y)}{\varepsilon_0} \tag{20}$$

は、中心差分の形で

$$\frac{\phi_{j-1,k} - 2\phi_{j,k} + \phi_{j+1,k}}{(\Delta x)^{2}} + \frac{\phi_{j,k-1} - 2\phi_{j,k} + \phi_{j,k+1}}{(\Delta y)^{2}} = -\frac{\rho_{j,k}}{\epsilon_{0}}$$
(21)

となり、ポテンシャルから電場

$$E(x, y) = -\nabla \phi(x, y) \tag{22}$$

のx方向成分は

$$(E_x)_{j,k} = -\frac{\phi_{j+1,k} - \phi_{j-1,k}}{2A_x}$$
 (23)

となります。電場のy成分も同様に求められます。また, 角度誤差の少ない差分式として,

$$(E_x)_{j,k} = -\frac{1}{3} \left(\frac{1}{2} \frac{\phi_{j+1,k+1} - \phi_{j-1,k+1}}{2\Delta x} + 2 \frac{\phi_{j+1,k} - \phi_{j-1,k}}{2\Delta x} + \frac{1}{2} \frac{\phi_{j+1,k-1} - \phi_{j-1,k-1}}{2\Delta x} \right)$$
(24)

を使うこともできます.

周期境界条件の場合は一次元の場合と同様に、離散フーリエ変換を使ってポアッソン方程式を解くことができます。 $X_j = j\Delta x$, $Y_k = k\Delta y$, $k_x = 2\pi l/L_x$, $k_y = 2\pi m/L_y$ として、格子点上の電荷密度 $\rho_{i,k}$ から離散フーリエ変換、

$$\tilde{\rho}_{l,m} = \Delta x \Delta y \sum_{k=0}^{NG_{v}-1} e^{-ik_{v} Y_{h} \sum_{i=0}^{NG_{v}-1} e^{-ik_{x} X_{j}} \rho_{j,h}$$
 (25)

により、電荷密度のフーリエ成分 $\widetilde{
ho}_{l,m}$ を求め、さらに

$$\widetilde{\phi}_{l,m} = \frac{\widetilde{\rho}_{l,m}}{\varepsilon_0 K_{l,m}^2} \tag{26}$$

からポテンシャルのフーリエ成分 $\widetilde{\phi}_{l,m}$ を求めます.ここで, $K_{l,m}$ は

$$K_{l,m}^{2} = k_{x}^{2} \left(\frac{\sin(k_{x} \Delta x/2)}{k_{x} \Delta x/2} \right)^{2} + k_{y}^{2} \left(\frac{\sin(k_{y} \Delta y/2)}{k_{y} \Delta y/2} \right)^{2}$$
(27)

です. さらにフーリエ逆変換,

$$\phi_{j,k} = \frac{1}{L_x L_y} \sum_{l=-NG/2}^{NG/2-1} e^{ik_x X_j} \sum_{m=-NG/2}^{NG/2-1} e^{ik_y Y_k} \widetilde{\phi}_{l,m}$$
 (28)

により格子点上でのポテンシャル $\phi_{j,k}$ が得られます. なお、x、y 両方向とも周期境界条件の場合、 $0=\int_{境界} E \cdot dS = \int \rho dV$ より系内の全電荷は零ですから $\widetilde{\rho}_{0,0}=0$ となることに注意してください。逆に、全電荷が零でない系で x、y 両方向ともに周期境界条件を使うのは誤りです。

x 方向は接地境界,y 方向は周期境界とする場合はそれぞれの方向に,フーリエ変換,sin 変換を用いて解くことができます.境界を任意の電位分布に指定する場合には,系の内部に電荷がない条件でかつ境界条件を満たす $\nabla^2\phi=0$ の解を一度求めておき[7],x 方向,y 方向ともに sin 変換で求めた両端接地条件に対応する解と重ね合わせれば,各時間ステップごとには両端接地の解を求めるだけで済みます.さらに複雑な条件,たとえば系の内部に電極などがある場合の取り扱いについては文献[8]をご覧ください.

周期境界条件の場合の粒子の境界での取り扱いは y, z 方向にも x 方向と同様に取り扱います。磁場がないときの反射の場合は平面の板に粒子が当たった場合と同様な取り扱いができますが、磁場がある場合は境界で非物理的な効果が起きないような工夫が必要です[9]. 境界での粒子吸収、系内への粒子入射は静電ポテンシャルの境界条件と矛盾のないように取り扱う必要があります。開境界モデルの多次元への拡張は境界をいくつかに分割して行うことができます[10].

3.9 おわりに

静電粒子シミュレーションについて一次元モデルを中 心に説明してきました. 陽解法による PIC 静電粒子シ ミュレーションは手法としてはほぼ確立されており、そ の性質,数値的特性は詳細に調べられています.ただし, シミュレーションコードを初めて作成した場合は, その コードの正しさを確認するために多くのテストをする必 要があります. 周期境界条件の場合, エネルギー保存, 揺動レベル、ランダウ減衰等も含めた波動の分散などが 最初にテストする項目となります。 境界から粒子を入射 したり、粒子吸収壁を設定したりした場合はシースの深 さ等が理論値と一致するかを確かめたりします.一方, 他で開発されたシミュレーションコードを用いる場合に おいても、その適用条件に十分な注意を払う必要があり ます. シミュレーションコードは適用条件, 適用限界を 正しく把握した上で利用して初めて物理的に正しい結果 を与えるからです.

なお,ここで粒子シミュレーションについて触れられ

なかった事項,実際のプログラム例については本「入門」 の他の章ならびに文献[4]等を参考にしてください.

铭 槟

本稿をまとめるに際し、東北大学大学院工学研究科の 佐藤徳芳教授、畠山力三教授、核融合科学研究所の佐藤 哲也教授、上村鉄雄教授、渡邉國彦教授、カリフォルニ ア大学のバーザル教授、山口大学の内藤裕志博士、名古 屋大学の大澤幸治博士のシミュレーション研究に関する ご指導、ご支援に感謝いたします。

参考文献

- [1] F.H. Harlow, *Meth. Comput. Phys.* 3, B. Akderm, S. Fernbach, and M. Rotenberg, eds. (Academic, New York, 1964) p. 319.
- [2] R.L. Morse and C.W. Nielson, Phys. Fluids **12**, 2418 (1969).
- [3] C.K. Birdsall and D. Fuss, J. Comput. Phys. 3, 494 (1969).

- [4] C.K. Birdsall and A.B. Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation* (McGraw-Hill Book Company, New York, 1985 and Adam Hilger, Bristol, Philadelphia and New York, 1991).
- [5] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling and B.P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran* (Cambridge University Press, 1986).
- [6] H. Takamaru, T. Sato, R. Horiuchi, K. Watanabe and the Complexity Simulation Group, J. Phys. Soc. Jpn. 66, 3826 (1997).
- [7] 寺沢寛一:自然科学者のための数学概論(岩波書店, 東京, 1954) p. 359.
- [8] R.W. Hockney and J.W. Eastwood, *Computer Simulation Using Particles* (Adam Hilger, Bristol and Philadelphia, 1988).
- [9] H. Naitou, S. Tokuda and T. Kamimura, J. Comput. Phys. **33**, 86 (1979).
- [10] S. Ishiguro, T. Sato, H. Takamaru and the Complexity Simulation Group, Phys. Rev. Lett. 78, 4761 (1997).