

相対論的プラズマ粒子シミュレーションのための 粒子計算アルゴリズム

銭谷 誠司^{1*}, 加藤 恒彦²

Numerical methods for charged particles in relativistic particle-in-cell simulation

Seiji Zenitani^{1*} and Tsunehiko Kato²

概要

宇宙プラズマ研究では、電磁場の中で荷電粒子の運動を解き進めるプラズマ粒子シミュレーション (Particle-in-cell; PIC シミュレーション) が広く活用されている。本稿では、相対論的な粒子運動および全体運動を伴う相対論的プラズマ系をPIC シミュレーションで扱うための数値解法を、大きく2つのカテゴリに分けて解説する。前半は、Sobol 法などの粒子分布を静止系で初期化する数値解法を紹介する。そして、このような粒子分布にローレンツ変換を施す方法を解説する。後半は、粒子運動の時間積分法としてBoris 法とVay 法を紹介し、相対論的プラズマ流に特有の数値問題を議論する。

This tutorial article describes numerical methods to deal with a relativistic plasma in particle-in-cell (PIC) simulation. We first overview numerical methods to initialize particles that follow relativistic velocity distribution functions. Then we describe how to Lorentz-boost the plasma distribution. Next, we introduce two particle integrators, the Boris method and the Vay method. We further present a numerical problem in a magnetized plasma flow at a relativistic speed. It is found that the Boris solver leads to a numerical boost in the momentum space, which depends on the square of the timestep.

1. はじめに

宇宙プラズマの研究では、電磁場の時間発展と、計算空間内に大量に配置した仮想荷電粒子の運動を並行して解き進めるプラズマ粒子シミュレーション (Particle-in-cell; PIC シミュレーション) が広く活用されている。PIC シミュレーションの原理や関連する数値解法は、1970～80 年代に整備が進み、その成果は Birdsall & Langdon¹, Hockney & Eastwood⁶ といった教科書にまとめられている。一方、レーザー物理や高エネルギー天体物理の文脈では、個々の粒子運動と粒子系全体の運動に相対論効果が働く相対論的プラズマ系を議論することが多い。当然ながら、相対論的プラズマ現象を扱う PIC シミュレーション研究も活発に進められている。しかし、PIC シミュレーションで相対論的プラズマを扱うための数値解法は、あまり知られていないのが現状である。本稿では、著者の最近の仕事 (Zenitani¹⁴)

2018 年 7 月 6 日受理。

¹〒611-0011 宇治市五ヶ庄 京都大学生存圏研究所 学際萌芽研究センター。

Research Institute for Sustainable Humanosphere, Kyoto University, Gokasho, Uji, Kyoto 611-0011, Japan

²〒181-8588 三鷹市大沢 2-2-1 国立天文台 天文シミュレーションプロジェクト

Center for Computational Astrophysics, National Astronomical Observatory of Japan, 2-21-1 Osawa, Mitaka, Tokyo 181-8588, Japan

* E-mail: zenitani@rish.kyoto-u.ac.jp

をベースに、相対論的プラズマ PIC シミュレーションに特有の数値解法を紹介する。
多くの場合、PIC シミュレーションは、

1. (初期化) 粒子群を初期化する。
2. (計算ループ) 粒子運動を解く。
3. (計算ループ) その結果を受けて電荷と電流を配分する。
4. (計算ループ) 電磁場の時間発展を解く。

のサイクルで計算を進めてゆく。3. については、これまでの研究でよく議論されており、相対論 PIC に特有の問題ではないため、本稿では議論しない。4. に関連して、相対論的プラズマ中では、光速に近い速度で運動する荷電粒子が、数値解法の都合で遅くなった電磁波成分に迫りついて非物理的に共鳴する数値チェレンコフ不安定が問題になる。数値チェレンコフ問題は、4. の電磁波の解法を工夫することで、ある程度対処できることが知られており、現在も活発に研究が行われている。

また、相対論的プラズマ現象では、シミュレーションを実行することに加えて、シミュレーション結果を解析すること自体も困難である。例えば、粒子データを集計して流体量を議論するために必要な相対論流体力学の基礎概念と解析手法は、PIC シミュレーション研究者の間ではあまり知られていない。この話題については、著者の最近の仕事 (Zenitani¹⁵) が参考になるだろうが、また機会を改めて解説・紹介できればと思う。

本稿では、上記の 1. 2. の粒子計算部分に関連して、相対論的プラズマを扱うための PIC アルゴリズムのポイントを解説する。具体的には、1. 粒子分布の初期化方法、および、2. 粒子の時間積分方法、を扱い、前者に関連して、分布関数のローレンツ変換、後者に関連して、相対論的プラズマ流特有の数値ドリフト問題を議論する。

2. 準備

本稿では、粒子の3次元速度を $\mathbf{v}$ 、ローレンツ因子を $\gamma = [1 - (v/c)^2]^{-1/2} = [1 + (u/c)^2]^{1/2}$ 、そして両者を掛け合わせた拡張速度を $\mathbf{u} = \gamma \mathbf{v}$ と表記する。そして、粒子の運動量が $m\mathbf{u} = m\gamma \mathbf{v}$ であることから、 $\mathbf{u}$ を運動量、あるいはモーメントと呼ぶことにする。荷電粒子の相対論的運動は、運動方程式

$$m \frac{d\mathbf{u}}{dt} = q \left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{u}}{\gamma} \times \mathbf{B} \right) \quad (1)$$

に従うものとする。記号は、特に指定しない限り、それぞれの標準的な意味を持つ。本稿では、以下の関係を多用する。

$$\gamma^2 = 1 + (u/c)^2. \quad (2)$$

3. 静止系における分布関数

PIC シミュレーションでは、同一セル内に大量の粒子を配置して、それぞれに適切な運動量を割り振る。速度の初期分布としては、Maxwell-Boltzmann 分布 (正規分布) を用いることが多い。

$$f(\mathbf{v})d^3v = N \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{m\mathbf{v}^2}{2T} \right) d^3v, \quad (3)$$

ここで T は温度 (ボルツマン定数を含む) である。(3) を積分すると数密度 $N \equiv \int f(\mathbf{u})d^3u$ を得る。

Maxwell-Boltzmann 分布を生成する方法としては、Box-Muller 法³ がよく知られている。区間 $(0, 1]$ の2つの一様乱数 X_1, X_2 を使って、以下の手順を踏むと、正規分布に従う2つの乱数 r_1, r_2 を生成するこ

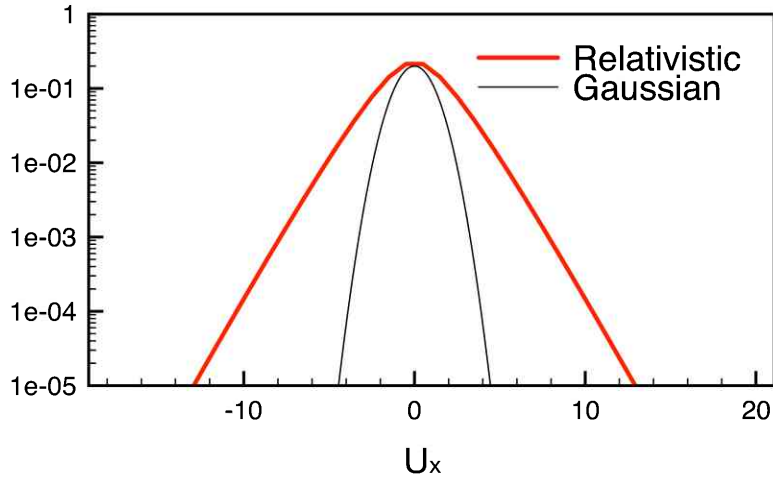


図 1: MAXWELL-JÜTTNER 分布 (RELATIVISTIC) と MAXWELL-BOLTZMANN 分布 (GAUSSIAN)。形状を比較するため、係数を変えて縦軸方向の位置を調整している。

とができる。

$$r_1 = \sqrt{-2 \log X_1} \sin(2\pi X_2), \quad (4)$$

$$r_2 = \sqrt{-2 \log X_1} \cos(2\pi X_2), \quad (5)$$

実際には、一様乱数は区間 $[0, 1)$ の値をとることが多い。PIC シミュレーションで多くの粒子を扱う場合、 $\log 0$ を計算することを避けるため、

$$r_1 = \sqrt{-2 \log(1 - X_1)} \sin(2\pi X_2), \quad (6)$$

$$r_2 = \sqrt{-2 \log(1 - X_1)} \cos(2\pi X_2), \quad (7)$$

としてもよい。正規分布を生成するサブルーチンを数値計算ライブラリが提供することもある。

次に、Maxwell-Boltzmann 分布の相対論的延長である Maxwell-Jüttner 分布 (Jüttner-Synge 分布と呼ぶこともある)^{7,12} を紹介する。その関数形は

$$f(\mathbf{u}) d^3 u = \frac{N}{4\pi m^2 c T K_2(mc^2/T)} \exp\left(-\frac{\gamma mc^2}{T}\right) d^3 u, \quad (8)$$

と表される。 $K_n(x)$ は第 2 種修正 Bessel 関数である。これ以降、特に意図がない限り $m = 1$ 、 $c = 1$ と簡略化して議論する。図 1 の赤線は、温度 $T = mc^2 = 1$ の Maxwell-Jüttner 分布である。参考のため、非相対論の正規分布を黒線で示した。正規分布の裾野部分は、 $\propto \exp[-(v/v_{th})^2]$ であるため、 v の 2 次で急激に減少する。これに対して、Maxwell-Jüttner 分布の裾野は $\propto \exp(-u/T)$ で、 u の 1 次で減少することが特徴である。

次に、PIC シミュレーションで Maxwell-Jüttner 分布の粒子分布を生成することを考える。Maxwell-Jüttner 分布は関数形が複雑であるため、Box-Muller 法のような決定版ともいえる解法は、今のところ見つかっていない。Maxwell-Jüttner 分布が、全方向に一樣 (等方) であることを利用して、(8) 式の $\mathbf{u}$ を極座標 (u, θ, φ) で書き直すと

$$f(u) du = \frac{N}{TK_2(1/T)} \exp\left(-\frac{\sqrt{1+u^2}}{T}\right) u^2 du. \quad (9)$$

となる。そこで、(9) 式に従う u を数値的に生成したのち、以下のようにして $\mathbf{u}$ の各成分に展開すると、(8) 式に従う粒子分布を得ることができる。

$$\begin{cases} u_x = u (2X_3 - 1) \\ u_y = 2u \sqrt{X_3(1 - X_3)} \cos(2\pi X_4) \\ u_z = 2u \sqrt{X_3(1 - X_3)} \sin(2\pi X_4) \end{cases} \quad (10)$$

X_3, X_4 は、区間 $[0,1]$ の一様乱数である。(9) 式の u の分布を生成する計算方法については、逆変換法、Sobol 法、そして、Schnittman 法の 3 つの方法を紹介する。

A. 逆変換法

逆関数法は、累積分布関数 $F(u)$ に基づいて、 u の値を逆引きする方法である。累積分布関数は

$$F(u) \equiv \left(\int_0^u f(u) du \right) \left(\int_0^\infty f(u) du \right)^{-1} \simeq \left(\int_0^u f(u) du \right) \left(\int_0^{u_{\max}} f(u) du \right)^{-1}. \quad (11)$$

のように近似することができる。ここで、 $u_{\max}$ は実用上の上限速度である。非相対論的温度 $T \ll 1$ の正規分布では、高エネルギー成分が急激に減ることから、熱速度を $v_{\text{th}} = \sqrt{2T}$ として、 $u_{\max} = 5v_{\text{th}}$ 程度の値を採用すればよい。一方、先ほど触れたように、相対論的高温 $T \gtrsim 1$ の Maxwell-Jüttner 分布では、高エネルギー成分が緩やかに減衰するため、余裕をとって、 $u_{\max} = 20T$ とした方がよい。そして、2000 グリッド程度の $F(u)$ の数値テーブルを用意し、一様乱数 X_5 を用いて

$$u = F^{-1}(X_5) \quad (12)$$

として u を算出する。

B. Sobol¹⁰ 法

ロシアの数学者 Sobol が 1976 年に公表した数値解法である。Sobol は、(9) 式が 3 次のガンマ分布 (Erlang 分布) :

$$P(u; 3, T) = \left(\frac{1}{2T^3} \right) \exp \left(-\frac{u}{T} \right) u^2. \quad (13)$$

に似ていることに注目して、以下のようなアルゴリズムを考案した。導出は、ロシア語の原論文¹⁰あるいは Zenitani¹⁴ 論文に譲ることにして、本稿では具体的手順のみを紹介する。 $X_6 \cdots X_8$ の 3 つの一様乱数を用いて

$$u \equiv -T \ln X_6 X_7 X_8 \quad (14)$$

を生成すると、(13) 式のガンマ分布に従う u を得ることができる。さらに、追加の乱数 X_9 を用いて

$$\eta \equiv -T \ln X_6 X_7 X_8 X_9 \quad (15)$$

$$\eta^2 - u^2 > 1, \quad (16)$$

を満たす時の u を採用すれば、(9) 式に従う u の分布を得ることができる。(14), (15) で用いる一様乱数でも、Box-Muller 法の議論と同様、 $\log 0$ を避ける工夫をすべきであろう。(16) 式の採択率は、温度 T の

関数で

$$\frac{1}{2T^2} K_2(1/T). \quad (17)$$

となる。^{8,14}

C. Schnittman 法

Schnittman & Krolik⁹ の Appendix で議論されている方法で、フランスの研究グループが開発している SMILEI コード⁴ で利用されている。

(9) 式に $u = \gamma\beta$ を代入して

$$f(\gamma)d\gamma \sim \exp\left(-\frac{\gamma}{T}\right)\gamma^2\beta d\gamma \equiv f_2(\gamma)d\gamma \quad (18)$$

とする。簡単のため、規格化定数を取った分布関数を $f_2(\gamma)$ とした。次に、以下の関数形の γ の分布を考える。

$$g(\gamma) = \exp\left(-\frac{\gamma}{T}\right)\gamma^2. \quad (19)$$

(19) 式の累積分布関数は次のようになる。

$$G(\gamma) = \left(\int_1^\gamma g(\gamma)d\gamma\right)\left(\int_1^\infty g(\gamma)d\gamma\right)^{-1} = 1 - \frac{2T^2 + 2\gamma T + \gamma^2}{2T^2 + 2T + 1} \exp\left(-\frac{\gamma-1}{T}\right). \quad (20)$$

そして、一様乱数 X_{10} を用いて、逆関数から γ の分布を得ることができる。逆関数は数値テーブルを参照する。

$$\gamma = G^{-1}(X_{10}) \quad (21)$$

これとは別に、(20) 式の右边を

$$H(x) \equiv (x^2 + 2x + 2)e^{-x} \quad (22)$$

関数を導入して書き換えると

$$G(\gamma) = 1 - \frac{H(\gamma/T)}{H(1/T)} \quad (23)$$

となり、最終的に

$$\gamma = T H^{-1}\left((1 - X_{10})H(1/T)\right) \quad (24)$$

を得る。(21) あるいは (24) で得た γ は、(19) 式の分布に従う。そこで、乱数 X_{11} が

$$X_{11} < \frac{f_2(\gamma)}{g(\gamma)} = \beta = \frac{\sqrt{\gamma^2 - 1}}{\gamma} \quad (25)$$

の条件を満たす場合の γ を採用すると (棄却法)、 $f_2(\gamma)$ に従う γ の分布を得ることができる。最後に

表 1: アルゴリズムまとめ.

	Box-Muller 法	逆変換法	Sobol 法	Schnittman 法
実装の容易さ	◎	◎	◎	△
非相対論的温度 ($T \leq 0.1$) での効率	◎	◎	-	-
準相対論的温度 ($T \lesssim mc^2$) での効率	-	◎	△	○
相対論的温度 ($T \gtrsim mc^2$) での効率	-	◎	◎	◎
数値テーブルを利用	NO	YES	NO	YES

$u = \sqrt{\gamma^2 - 1}$ に直して、(10) から $\mathbf{u}$ の 3 成分を得る。(25) 式の採択率は

$$\langle \beta \rangle \equiv \left(\int f(\mathbf{u}) \beta d^3 u \right) \left(\int f(\mathbf{u}) d^3 u \right)^{-1} \quad (26)$$

であり、Maxwell-Jüttner 分布の温度 T に依存する。

D. 議論

ここで、本稿で紹介した手法の特徴をまとめておく。Box-Muller 法、逆変換法、Sobol 法はロジックが簡素であるため、実装が容易である。しかし、Box-Muller 法は原理的に相対論に対応していない。

Sobol 法と Schnittman 法は、内部で棄却法を利用している。その際の粒子の利用効率 ((17), (26) 式) を図 2 に示す。(26) 式の各点の値は、数値的に求めたものである。 $T \gtrsim mc^2$ の相対論的温度では両者とも良い性能を示している。 $T \lesssim mc^2$ の準相対論的温度では、Sobol 法の効率が下がっているのに対し、Schnittman 法は適度な効率を保っている。そして、 $T \ll mc^2$ の非相対論的極限では、両者とも効率が下がってゆく。

逆変換法および Schnittman 法は、累積分布関数の逆関数 $F^{-1}(x)$, $G^{-1}(x)$, $H^{-1}(x)$ を数値テーブルを参照して求めている。数値テーブルを利用する場合の計算精度は、テーブルの解像度と補間方法に大きく依存する。また、テーブルを参照するなら、複雑な処理を避けて、最初から逆関数法を採用するという考えもあるだろう。また、 $F(x) \cdot G(x)$ は相対論的温度 T に依存する関数であるため、パラメーター毎に数値テーブルを生成する必要がある。これに対して、 $H(x)$ 関数は T に依存しないため、予め固定テーブルを作っておくことができる。SMILEI コード⁴ では、 $H_1(x) \equiv \ln(x^2/2 + x + 1) - x$ という関数形を使って固定の逆関数テーブル $H_1^{-1}(x)$ を参照するようにしたうえで、テーブルの参照方法を工夫している。⁵

これらの手法の特徴を表 1 にまとめた。実用上は、プラズマ温度 T に応じて、それぞれ適したアルゴリズムを使い分ければ良いだろう。

4. 分布関数のローレンツ・ブースト

次に、粒子分布全体が一定速度で動いている場合を考える。例えば、 $+x$ 方向に速度 V_0 で移動する、Shifted Maxwell-Boltzmann 分布

$$f(\mathbf{v}) d^3 v = N \left(\frac{m}{2\pi T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(- \frac{m([v_x - V_0]^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2T} \right) d^3 v, \quad (27)$$

を考える。この分布を得るためには、Maxwell-Boltzmann 分布を初期化した後、 $v_x \leftarrow v_x + V_0$ と置きかえてガリレイ変換を行えば良い。しかし、バルク速度 V_0 が相対論的になる場合には、さらなる工夫が必要になる。

相対論的速度で $+x$ 方向に動く Maxwell-Jüttner 分布 (Shifted Maxwell-Jüttner 分布) は、観測者系

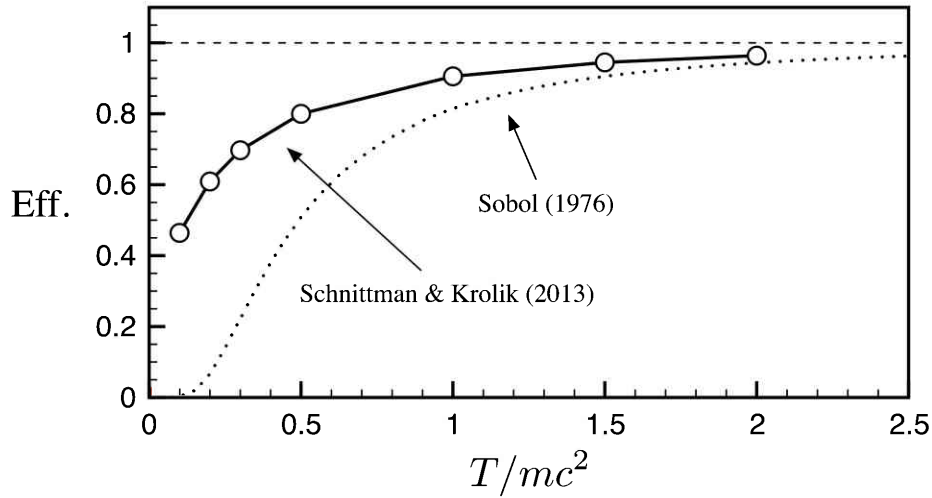


図 2: 棄却法の採択効率。

では

$$f'(\mathbf{u}')d^3u' = \frac{N'}{4\pi m^2 c T K_2(mc^2/T)} \exp\left(-\frac{\Gamma_0(\varepsilon' - \beta_0 m c u'_x)}{T}\right) d^3u', \quad (28)$$

と表すことができる。ここで Γ_0 および $\beta_0 = V_0/c$ は、バルクのローレンツ因子とバルク速度である。また、 $\varepsilon' = \gamma' m c^2$ は粒子のエネルギーである。後の議論と整合性を持たせるため、観測者系での物理量に ' を追加した。Shifted Maxwell-Jüttner 分布は、 $\exp$ の引数中の関数形が異なるため、Sobol 法などを適用するのは難しい。

図 3 に、バルクのローレンツ因子 $\Gamma_0 = 10$ で $+x$ 方向に流れている相対論的高温 $T = mc^2$ の粒子分布 ((28) 式) を赤線で示した。参考までに、 $T = mc^2$ の静止系の Maxwell-Jüttner 分布 ((8) 式) を赤の点線で示す。静止系では分布が等方であるから、 $u_x = 0$ を軸にして左右対称である。しかし、(28) 式の分布は、左右対称性が崩れて、大きく右に延びていることがわかる。

このような非対称性は、分布関数の $+x$ 方向へのローレンツ変換と対応している。ローレンツ変換には、エネルギー・運動量のローレンツ変換と、時間・空間のローレンツ変換の 2 種類がある。前者は、粒子（質

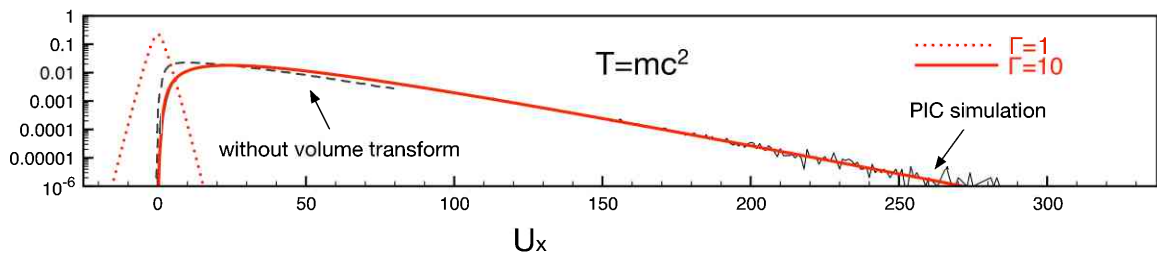
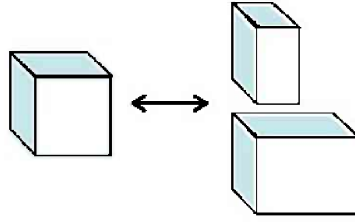


図 3: 相対論的高温分布関数のバルク・ローレンツ因子 Γ_0 に対する依存性。3次元の速度分布関数を、バルク流方向成分 $u_x = (\gamma v)_x$ に対して投影した。

図 4: 空間要素 d^3x のローレンツ収縮

点) のエネルギー・運動量を変換するもので、今回の場合は

$$\begin{cases} \gamma' = \Gamma_0(\gamma + \beta_0 u_x) \\ u'_x = \Gamma_0(u_x + \beta_0 \gamma) \\ u'_y = u_y \\ u'_z = u_z \end{cases} \quad (29)$$

となる。プラズマ分布関数を扱う場合は、これに加えて、時間・空間のローレンツ変換を考慮する必要がある。図 4 でイメージするように、同じ空間ボックス内のプラズマ分布をローレンツ変換する場合でも、対応する空間要素のローレンツ収縮の仕方は一定でない。観測者にとっては、注目している分布関数要素 (d^3u) の運動の仕方 (エネルギー・運動量) に応じて、空間要素 (d^3x) のローレンツ収縮の仕方が変わるため、結果的にプラズマの密度が違って見えることになる。この効果は

$$\gamma d^3x = \gamma' d^3x'. \quad (30)$$

あるいは

$$\frac{d^3u}{\gamma} = \frac{d^3u'}{\gamma'}. \quad (31)$$

と表される。静止系 (S 系) と観測者系 (S' 系) との間で分布関数を変換する際は

$$f'(\mathbf{u}') d^3u' = f(\mathbf{u}) \left(\frac{\gamma'}{\gamma} \right) d^3u. \quad (32)$$

となって、以下の補正項 (空間要素補正ファクター; volume transform factor) が必要になる。

$$\frac{\gamma'}{\gamma} = \Gamma_0(1 + \beta_0 v_x). \quad (33)$$

実用上、規格化定数 Γ_0 は粒子数を割り振る時点で調整することが可能である。一方、(33) には静止系分布関数のブースト方向の速度成分 v_x に依存する項が入っている。ブースト方向の分布関数要素は強い収縮を受けて密度が上がり、遠ざかる方向の分布関数要素は逆に密度が下がって見えるわけである。この補正の影響は、バルク速度 U_0 と静止系での粒子の熱速度の両方が相対論的である場合に顕著である。例えば図 3 では、静止系の Maxwell-Jüttner 分布 (赤の点線) を Shifted Maxwell-Jüttner 分布 (赤の実線) にローレンツ変換する際に密度補正を無視すると、図の左の黒の点線のようになり、エネルギー流などに最大 25% の誤差をもたらす。¹⁴

PIC シミュレーションでこの密度補正効果を取り入れるためには、4 つの方法がある。1 つめの方法は、ローレンツ変換後の表式 (例えば (28) 式) を使って、粒子を初期化することである。ローレンツ変換 ((29)) および密度補正 ((31), (33)) を使えば、任意の分布関数の観測者系での表式を得ることができる。特に、(28) 式の粒子分布を生成する方法については、Swisdak¹¹ が性能の良い手法を提案している。しかし、アルゴリズムが少し複雑であることや、exp 形の分布関数に特化しているため、本稿では議論しないことにす

る。2つめの方法は、ローレンツ変換の際に粒子の「重み」を調整することである。しかし、重みの違う粒子を混在させることは、計算精度や解析の手間を考えると望ましいことではない。そして、バルク流および粒子の熱速度のローレンツ因子 Γ_0, γ が大きい場合には、期待される重みの比も大きくなって、悩みも大きくなる。3つめの方法は、ローレンツ変換の際に棄却法で粒子数を調整することである。一定数の粒子を捨てるため、粒子を追加する処理が必要になるが、この方法を使うのは、シミュレーションの初期化の際であるから大きな問題にならないはずである。4つめの方法は、補正項が影響しないパラメーターを注意深く選び、何も対処しないことである。

最後に、3つめの密度調整処理を効率化する「符号反転法¹⁴」を紹介する。密度補正ファクター ((33) 式) を定数倍すると、

$$\frac{1}{\Gamma} \left(\frac{\gamma'}{\gamma} \right) = (1 + \beta_0 v_x). \quad (34)$$

となる。これに従って棄却法を検討する。 $\beta_0 v_x < 0$ の時、係数は $0 < (1 - |\beta_0 v_x|) \leq 1$ となるため、粒子を $|\beta_0 v_x|$ の確率で棄却して良い。一方、 $\beta_0 v_x > 0$ の時、係数は $1 \leq (1 + \beta_0 v_x) < 2$ の値をとる。棄却法の観点からは、全ての粒子を採用したうえで、 $|\beta_0 v_x|$ の確率で別の粒子を追加して良いことになる。分布関数がローレンツ変換の方向に対称である場合、具体的には $f(-u_x) = f(u_x)$ の場合、棄却する粒子数と追加すべき粒子数は一致する。そこで、棄却粒子の u_x 成分の符号を反転させて、 $\beta_0 v_x > 0$ 側に追加してやれば、粒子を棄却する必要がなくなる。一様乱数 X_9 を用いて

$$-\beta_0 v_x > X_9, \quad (35)$$

のとき、 $u_x \rightarrow -u_x$ のように符号を反転した後で、エネルギー・運動量の変換則 ((29) 式) に従って $\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{u}'$ を変換すれば良い。この手順を図 5 に示した。また、Sobol 法を用いて生成し、符号反転法でローレンツ変換した PIC 粒子の分布を図 3 の黒線で示した。この分布は、粒子数が少ない右方の低密度領域 ($u_x > 200$) も含めて、解析解 (赤線) とよく一致していることがわかる。

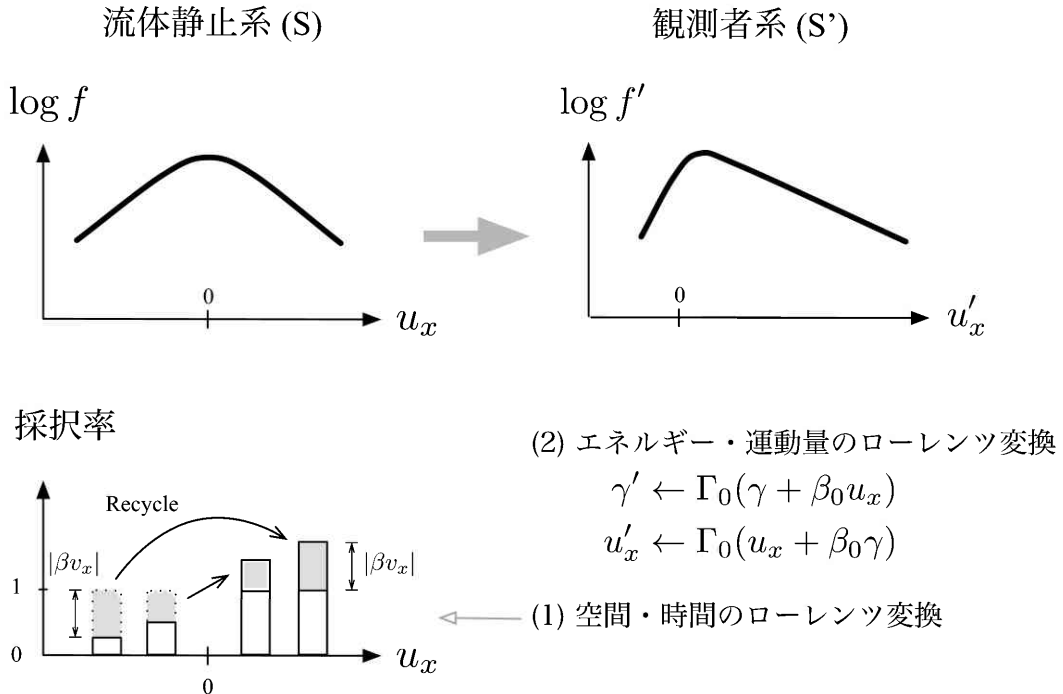


図 5: 相対論的高温プラズマ分布のローレンツ変換手順。¹⁴ 下図は、密度を補正する (34) の手法を図解したもの。

5. 粒子計算アルゴリズム

次に、PIC シミュレーションにおける粒子運動の計算方法を考える。多くの場合、以下のように位置と速度を離散化して、leap-frog 方式で粒子運動を解き進めてゆく。

$$\frac{\mathbf{x}^{t+\Delta t} - \mathbf{x}^t}{\Delta t} = \mathbf{v}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} \quad (36)$$

$$m \frac{\mathbf{u}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} - \mathbf{u}^{t-\frac{1}{2}\Delta t}}{\Delta t} = q(\mathbf{E}^t + \mathbf{v}^t \times \mathbf{B}^t) \quad (37)$$

ここで、上付き添字 ($t, t + \Delta t, \dots$) は時間ステップを意味している。電磁場は、粒子の位置 $\mathbf{x}^t$ に基づいて、グリッド上の値から補完する。

このうち、粒子の加速に関わる (37) 式を解くためにさまざまな解法が提案されている。本項では、代表的な例として、Boris² 法と Vay¹³ 法を解説する。

A. Boris 法

Boris 法は、PIC シミュレーション研究の草創期に開発された手法である。粒子運動を適度な精度で解くことができ、ロジックが簡素で、安定しているなどの利点がある。そして、Birdsall & Langdon¹, Hockney & Eastwood⁶ などの教科書でも丁寧に解説されていることもあって、広く使われている。本項執筆時点では、PIC シミュレーションの事実上の業界標準解法だと言える。Boris 法では、運動方程式を (1) 電場による加速 1/2 ステップ、(2) 磁場によるジャイロ回転 1 ステップ、(3) 電場加速の残り 1/2 ステップの順に分割して解いている。この手順は、それぞれ (38)–(40) 式のようになる。

$$\mathbf{u}^- = \mathbf{u}^{t-\frac{1}{2}\Delta t} + \frac{q}{m} \mathbf{E}^t \frac{\Delta t}{2} \quad (38)$$

$$\frac{\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^-}{\Delta t} = \frac{q}{m} (\mathbf{v}^t \times \mathbf{B}^t) \quad (39)$$

$$\mathbf{u}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} = \mathbf{u}^+ + \frac{q}{m} \mathbf{E}^t \frac{\Delta t}{2} \quad (40)$$

$\mathbf{u}^-$ と $\mathbf{u}^+$ は2つの中間状態である。Boris 法の (2) ステップめでは、ジャイロ回転がエネルギーを保存することを考慮して、 $\mathbf{v}^t = \frac{1}{2}(\mathbf{u}^+ + \mathbf{u}^-)/\gamma^- = \frac{1}{2}(\mathbf{u}^+ + \mathbf{u}^-)/\gamma^+$ とする。そして、ジャイロ回転を以下の手順で近似する。

$$\mathbf{t} \equiv \frac{q\Delta t}{2m\gamma^-} \mathbf{B} \quad (41)$$

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u}^- + \mathbf{u}^- \times \mathbf{t} \quad (42)$$

$$\mathbf{u}^+ = \mathbf{u}^- + \frac{2}{1+t^2} \mathbf{u}' \times \mathbf{t}. \quad (43)$$

このアルゴリズムの概要を図 6 に示す。詳細は Boris² の原論文や Birdsall & Langdon¹, Hockney & Eastwood⁶ を参照していただきたいが、元の状態 $\mathbf{u}^-$ からの差分 $\mathbf{u}^- \times \mathbf{t}$ (緑) を計算して中間状態 $\mathbf{u}'$ を求めたうえで、 $\mathbf{u}'$ に直交する方向に $\mathbf{u}^- \rightarrow \mathbf{u}^+$ の差分 (ピンク) を計算するというものである。

図 6 から伺い知ることができるが、ジャイロ回転の本来の回転角を θ と、この Boris 法の近似回転角 θ' の間には

$$\theta \approx \theta' = 2 \tan^{-1}(|t|) \quad (44)$$

の関係が成立する。 $\omega_c \Delta t \lesssim 0.35$ のとき、 θ と θ' の差は 1% 未満になる。¹

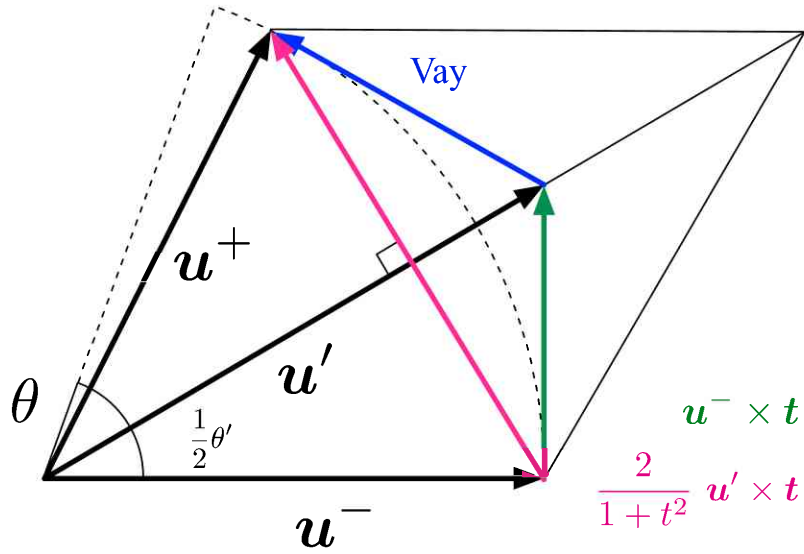


図 6: BORIS 法および VAY 法の原理。

B. Vay 法

Vay¹³ 法は 2008 年に発表された解法で、レーザープラズマや磁化プラズマ中の相対論衝撃波の研究で用いられている。計算手順は次の 2 段階に分けられる。1 段階めは電場による加速と、ジャイロ回転の前半部分である。

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u}^{t-\frac{1}{2}\Delta t} + \frac{q\Delta t}{m} \left(\mathbf{E}^t + \frac{\mathbf{v}^{t-\frac{1}{2}\Delta t}}{2} \times \mathbf{B}^t \right) \quad (45)$$

この後、ジャイロ回転の残り半分を解く。

$$\mathbf{u}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} = \mathbf{u}' + \frac{q\Delta t}{m} \left(\frac{\mathbf{v}^{t+\frac{1}{2}\Delta t}}{2} \times \mathbf{B}^t \right) \quad (46)$$

この (46) 式は、 $\mathbf{u}^{t+\frac{1}{2}\Delta t}$ についての陰解法の式であり、以下の手順で解くことができる。

$$\gamma^{t+\frac{1}{2}\Delta t} = \sqrt{\frac{\sigma + \sqrt{\sigma^2 + 4(\tau^2 + (\mathbf{u}' \cdot \boldsymbol{\tau})^2/c^2)}}{2}} \quad (47)$$

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{q\Delta t}{2m} \mathbf{B}^t, \quad \sigma = 1 + (\mathbf{u}'/c)^2 - \tau^2, \quad \mathbf{t} = \boldsymbol{\tau}/\gamma^{t+\frac{1}{2}\Delta t} \quad (48)$$

$$\mathbf{u}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} = \frac{1}{1+t^2} \left(\mathbf{u}' + (\mathbf{u}' \cdot \mathbf{t})\mathbf{t} + \mathbf{u}' \times \mathbf{t} \right) \quad (49)$$

導出方法は Vay¹³ 論文の Appendix A. を参照されたい。

電場がない場合 ($\mathbf{E} = 0$)、Vay 法は Boris 法と一致する。両者とも、定義に従って次のステップの状態を計算すると、

$$\mathbf{u}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} = \frac{1}{1+t^2} \left((1-t^2)\mathbf{u}^{t-\frac{1}{2}\Delta t} + 2(\mathbf{u}^{t-\frac{1}{2}\Delta t} \times \mathbf{t}) + 2(\mathbf{u}^{t-\frac{1}{2}\Delta t} \cdot \mathbf{t})\mathbf{t} \right) \quad (50)$$

と表すことができる。Vay 法の 1 段階目 ((45) 式) は Boris 法の回転部 1 ステップ目 ((42) 式) と同様、図 6

の緑線部に相当する。Vay 法の 2 段階目 ((46) 式) の陰解法で次ステップの $\mathbf{u}^+$ を求める操作は、図 6 の青線部に相当する。(46) 式からは、次ステップ $\mathbf{u}^+$ と青線部が直交することが読み取れて、図 6 の解釈と一致する。

有限の電場がある場合 ($\mathbf{E} \neq 0$)、(45) 式を

$$\mathbf{u}'' = \mathbf{u}^{t-\frac{1}{2}\Delta t} + \frac{q\Delta t}{m} \left(\frac{\mathbf{v}^{t-\frac{1}{2}\Delta t}}{2} \times \mathbf{B}^t \right) \quad (51)$$

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u}'' + \frac{q\Delta t}{m} \mathbf{E}^t \quad (52)$$

と分割して、(46) 式と合わせて考えると、Vay 法は (1) 磁場 $\frac{1}{2}\Delta t$ ステップ、(2) 電場 Δt 、(3) 磁場の残り $\frac{1}{2}\Delta t$ 、という順の計算法であることがわかる。Boris 法と比べて、電場と磁場の計算順序 (演算子の分割順) を入れ替えているわけである。図 6 では、Vay 法は緑線と青線の間で電場による加速を考慮する、と考えれば良い。(1) が陽解法、(2) が時間対称、(3) が陰解法であるから、(1~3) 全体の手順は時間反転可能である。

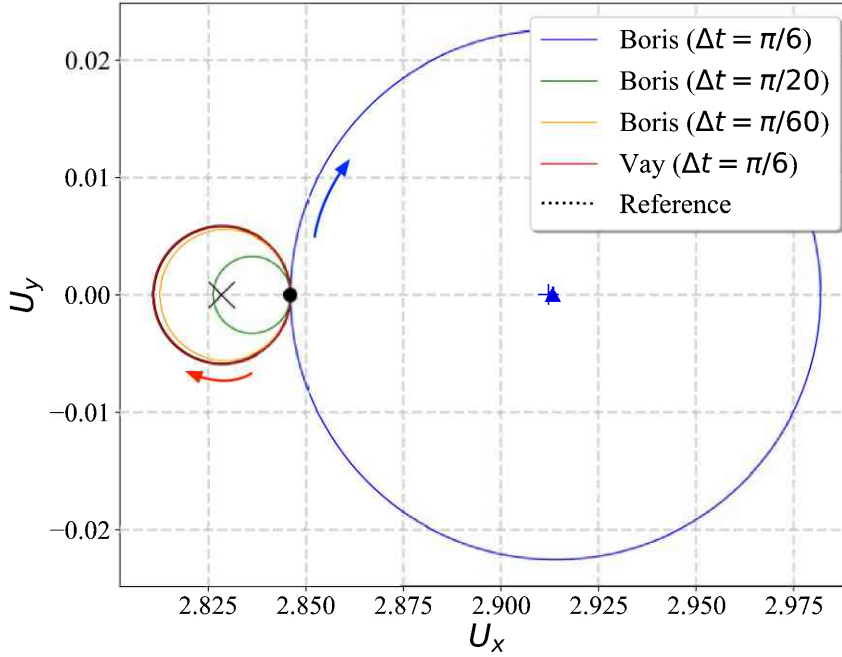


図 7: モーメント空間におけるテスト粒子の軌跡。× がフロー速度で、● が数値計算の起点。BORIS 法 ($\Delta t = \pi/6$) の軌道の旋回中心を + で、数値的な静止点を ▲ で示す。

C. 相対論的プラズマ流における数値誤差問題

Boris 法および Vay 法の特徴を理解するため、磁化された相対論的プラズマ流を想定して、テスト計算を行った。磁場 $\mathbf{B} = (0, 0, 1)$ 、電場 $\mathbf{E} = (0, V_0/c, 0)$ の固定電磁場の中では、荷電粒子群は、+x 方向にバルク速度 V_0 でドリフトすることが期待される。特に、ドリフト系で静止している粒子は、観測系でも一定速度 $\mathbf{u} = (U_0, 0, 0)$ で動くことが期待される。ここで $U_0 = \Gamma_0 V_0$ 、 $\Gamma_0 = [1 - (V_0/c)^2]^{-1/2}$ である。この電磁場の中で、 $m = 1$ 、 $c = 1$ 、 $q = 1$ 、バルクローレンツ因子 $\Gamma_0 = 3$ 、初速度 $\mathbf{u}_{t=0} = (\sqrt{8.1}, 0, 0)$ として、Boris

法と Vay 法を用いてテスト粒子シミュレーションを行った。時間ステップは $\Delta t = \pi/6$ である。Boris 法では $\Delta t = \pi/6, \pi/20, \pi/60$ の 3 ケースを計算した。

粒子のモーメント空間での軌跡を図 7 に示す。初速度の位置は●で、粒子は×で示すフロー速度 ($U_0 = (\sqrt{8}, 0, 0)$) の周りを時計回りに運動することが期待される。解析解 (黒・点線) は、Vay 法の結果 (赤線) とよく一致している。一方、Boris 法では、特に Δt が大きな場合に、回転中心が $+U_x$ 方向にスライドしている。我々は、この現象が Boris 型解法に特有の数値的問題であると考えている。

本稿では、この数値ドリフト問題を理解するための糸口として、モーメント空間内で粒子がジャイロ回転せず、数値的に静止する点の位置を、Boris 法の計算手順に立ち戻って評価してみる。言うまでもないことであるが、物理的な静止点の位置は、フロー速度 U_0 と一致するはずである。

モーメント空間で

$$\mathbf{u}^{t-\frac{1}{2}\Delta t} = (U_X, 0, 0) \quad (53)$$

のテスト粒子の運動を考える。このとき、 $\delta u = U_X - U_0$ は小さいものとする。この粒子は、(38)–(40) の各ステップで以下のように進む。

$$\mathbf{u}^- = (U_X, \frac{1}{2}U_0\theta_0, 0) \quad (54)$$

$$\mathbf{u}^+ = \left(U_X \cos \theta' + \frac{1}{2}U_0\theta_0 \sin \theta', -U_X \sin \theta' + \frac{1}{2}U_0\theta_0 \cos \theta', 0 \right) \quad (55)$$

$$\mathbf{u}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} = \left(U_X \cos \theta' + \frac{1}{2}U_0\theta_0 \sin \theta', -U_X \sin \theta' + \frac{1}{2}U_0\theta_0(1 + \cos \theta'), 0 \right) \quad (56)$$

ここで $\theta_0 = \frac{qB}{m\Gamma_0}\Delta t$ 、 θ' は前々節で議論した Boris 法の近似回転角である。粒子のモーメントが (数値的な) 静止点に位置している場合、(53) と (56) は一致するはずである。このとき u_y 成分に注目すると

$$U_X \sin \theta' = \frac{1}{2}U_0\theta_0(1 + \cos \theta') \quad (57)$$

が成立する。これを三角関数の公式を使って整理すると、以下の関係を得る。

$$U_X \tan \frac{\theta'}{2} = U_0 \frac{\theta_0}{2} \quad (58)$$

前々節の (44) で触れたように、Boris 法の近似角 θ' は以下の関係を満たしている。

$$\tan \frac{\theta'}{2} = t \quad (59)$$

ここで、 t は (41) の定義を借りたもので

$$2t = \frac{qB}{m\gamma^-}\Delta t \quad (60)$$

であり、 γ^- は (54) から直ちに求まる。

$$(\gamma^-)^2 = 1 + U_X^2 + \frac{1}{4}U_0^2\theta_0^2 \quad (61)$$

(59)–(61) を用いて (58) を整理すると

$$U_X = U_0 \sqrt{1 + \frac{1}{4}U_0^2\theta_0^2} \quad (62)$$

を得る。さらに、 $\delta u = U_X - U_0$ が小さい場合は、以下の関係を得ることができる。

$$\frac{\delta u}{U_0} \approx \frac{1}{8} U_0^2 \theta_0^2 = \frac{1}{8} V_0^2 \left(\frac{qB}{m} \right)^2 \Delta t^2 \quad (63)$$

従って、Boris 法では、モーメント空間での静止点の位置が、時間ステップの 2 乗に比例して数値的にずれることがわかる。非相対論の場合は、ローレンツ因子 $\gamma^- = \Gamma_0 = 1$ を考慮して (58) 式以降を展開すると $U_X = U_0$ が求まるから、静止点のずれは相対論的運動に特有の数値効果だと言える。

テスト粒子シミュレーションによる静止点のずれ δu の推定値と、 Δt との関係を図 8 に示す。ここで議論している静止点の位置は、図 7 の回転中心とは厳密には一致しない。Boris 法 ($\Delta t = \pi/6$) の軌道の場合、回転中心 (×) と静止点 (▲) の位置は 10^{-3} 程度ずれている。そこで、テスト粒子シミュレーションで求めた軌跡中心を起点に、何度も繰り返しテスト粒子シミュレーションを実行することで、十分な精度で δu を推測した。結果は、(63) の見積りとよく一致している。

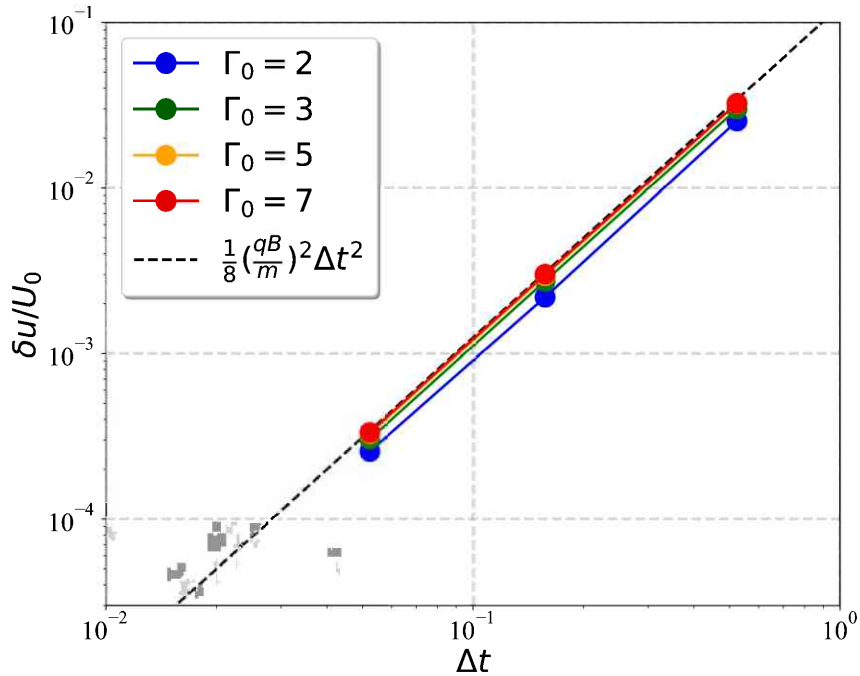


図 8: Boris 法の静止点のずれ δu と Δt との関係。

最後に、Vay 法に対して同様の検討を行う。数値的な静止点に位置するテスト粒子の時間発展を (45), (46) に従って展開すると、

$$\mathbf{u}^{t-\frac{1}{2}\Delta t} = (U_X, 0, 0) \quad (64)$$

$$\mathbf{u}' = (U_X, -U_X t + U_0 \theta_0, 0) \quad (65)$$

$$\mathbf{u}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} = (U_X, 0, 0) \quad (66)$$

となる。 t の定義は (41) の通りであるが、ローレンツ因子 γ^- は U_X に対応するものを利用する。(46) 式を考慮して、(66) から $\mathbf{u}'$ を逆算すると

$$\mathbf{u}' = (U_X, +U_X t, 0) \quad (67)$$

となる。(65) と (67) が一致する条件は

$$\frac{U_X}{\gamma^-} = \frac{U_0}{\Gamma_0} = V_0, \quad (68)$$

であり、これを満たす U_X は $U_X = U_0$ に限られる。従って、Vay 法は静止点の位置を厳密に解くことがわかる。

Vay¹³ 論文では、この性質を次のように説明している。計算手順 ((45), (46)) を

$$\mathbf{u}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} - \mathbf{u}^{t-\frac{1}{2}\Delta t} = \frac{q\Delta t}{2m} \left(\mathbf{E}^t + \mathbf{v}^{t-\frac{1}{2}\Delta t} \times \mathbf{B}^t \right) + \frac{q\Delta t}{2m} \left(\mathbf{E}^t + \mathbf{v}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} \times \mathbf{B}^t \right) \quad (69)$$

と置き換えると、物理的な静止点にいる粒子にとっては、そもそも右辺の第1項はゼロであった。そして、右辺第2項もゼロになる場合に、粒子のモーメントは静止点から変化しない。Vay 法は、これらの条件を満たす $\mathbf{u}^{t+\frac{1}{2}\Delta t} = \mathbf{u}^{t-\frac{1}{2}\Delta t}$ をうまく選んでいるのである。

6. まとめ

本稿では、プラズマ粒子 (PIC) シミュレーションにおいて、相対論的速度で運動する粒子を扱うために必要な数値解法を大きく2つに分けて解説した。

前半では、粒子の相対論的な初期分布関数を生成する方法として、Sobol 法などの手法を解説して、それらの性質・得失を議論した。次に、静止系の分布関数を相対論的 shifted 分布にローレンツ変換する数値解法を紹介した。このとき、エネルギー・運動量のローレンツ変換に加えて、時間・空間のローレンツ変換を考慮した密度補正を行う必要があり、その解決策として符号反転法を紹介した。プラズマの密度補正問題は、粒子群のエネルギー・運動量のみならず、電荷密度・電流密度を通じて、電磁場にも影響を及ぼすため、適切に対策を行うことが必須である。

後半では、個々の粒子運動を解く手段として、Boris 法と Vay 法の2つの数値解法を紹介した。そして、相対論的ドリフト運動のテスト粒子シミュレーションで、Boris 法では、時間ステップの2乗 (Δt^2) に比例して、静止点が数値的にずれることを明らかにした。このずれは、予期せぬジャイロ回転と、その周期平均の結果として、数値的なドリフト運動を引き起こすことが予想される。また、プラズマ系全体として見た場合に、予期せぬバルク加速・プラズマ熱化を引き起こす可能性がある。Vay 法はこの数値問題を起こさないため、少なくとも静止点付近では Boris 法より高精度である。しかし、著者らの経験では、Vay 法よりも Boris 法の方が精度が高いパラメーター領域もあり、一概に Vay 法が良いとは言い切れない。両数値解法の性質は、今後の研究でさらに明らかになってゆくであろう。

本稿が相対論的 PIC シミュレーションの基礎知識を得るきっかけとなり、多くの研究者の方々がパラメーター・文脈に応じた適切な数値解法を選択して、より良いシミュレーション研究を進めてくだされば幸いである。

7. 謝辞

本研究は、科学研究費助成事業若手研究 (B) 25871054 および基盤研究 (C) 17K05673 の支援を受けて行われたものである。

参考文献

- ¹Birdsall, C. K. and Langdon, A. B., *Plasma Physics via Computer Simulation*, McGraw-Hill, New York (1985).

- ²Boris, J. P., *Relativistic Plasma Simulation—Optimization of a Hybrid Code*, in Proceedings of 4th Conference on Numerical Simulation of Plasmas, Naval Research Laboratory, Washington D. C., pp. 3–67 (1970).
- ³Box, G. E. P. and Muller, M. E., *A note on the generation of random normal deviates*, Annals of Mathematical Statistics **29**, 610 (1958).
- ⁴Derouillat J., et al., *SMILEI: a collaborative, open-source, multi-purpose particle-in-cell code for plasma simulation*, Comput. Phys. Commun. **222**, 351–373 (2018).
- ⁵<http://www.maisondelasimulation.fr/smilei/maxwell-juttner.html>, 2018 年 7 月 16 日閲覧
- ⁶Hockney, R. W. and Eastwood, J. W., *Computer simulation using particles*, McGraw-Hill, New York (1981).
- ⁷Jüttner, F., *Das Maxwellsche Gesetz der Geschwindigkeitsverteilung in der Relativtheorie*, Ann. Phys. **339**, 856 (1911).
- ⁸Pozdnyakov, L. A., Sobol, I. M., and Sunyaev, R. A., *Comptonization and the shaping of X-ray source spectra - Monte Carlo calculations*, Astrophys. Space Phys. Rev. **2**, 189 (Translation) (1983).
- ⁹Schnittman J. D. and Krolik J. H., *A Monte Carlo Code for Relativistic Radiation Transport around Kerr Black Holes*, Astrophys. J. **777**, 11 (2013).
- ¹⁰Sobol, I. M., *On Modeling Certain Distributions Similar to Gamma Distribution*, in Monte Carlo Methods in Computational Mathematics and Mathematical Physics (Novosibirsk, 1976), pp. 24–29 [in Russian] (1976).
- ¹¹Swisdak, M., *The generation of random variates from a relativistic Maxwellian distribution*, Phys. Plasmas **20**, 062110 (2013).
- ¹²Synge, J. L., *The Relativistic Gas*, New York: Interscience (1957).
- ¹³Vay, J. L., *Simulation of beams or plasmas crossing at relativistic velocity*, Phys. Plasmas **15**, 056701 (2008).
- ¹⁴Zenitani, S., *Loading relativistic Maxwell distributions in particle simulations*, Phys. Plasmas **22**, 042116 (2015).
- ¹⁵Zenitani, S., *Dissipation in relativistic pair-plasma reconnection: revisited*, Plasma Phys. Control. Fusion **60**, 014028 (2018).