



講座 高密度相対論プラズマの粒子シミュレーション技法

3. 広密度プラズマシミュレーションのための衝突モデル

3. Collision Models for Large Density Scale Plasmas

千徳 靖彦, 田口 俊弘¹⁾

SENTOKU Yasuhiko and TAGUCHI Toshihiro¹⁾

ネバダ州立大学リノ校物理学科, ¹⁾ 摂南大学理工学部電気電子工学科

(原稿受付: 2014年4月23日)

粒子コードにおけるクーロン衝突過程の計算手法を紹介する。レーザープラズマではレーザープラズマ相互作用領域から固体密度領域までの非常に幅広い密度領域を取り扱う。このため、密度の違いを粒子の重みにより表すことが多い。このような異なる重みをもつ粒子間の相対論的クーロン衝突過程をTakizuka-Abeモデル(2体衝突モデル)を発展させて取り扱う方法があり、一方で、2体衝突モデルとは別にLangevin方程式に基づいて解く、統計的手法も開発されている。本節ではそれぞれの手法の紹介とともに、利点ならびに問題点などについても触れる。

Keywords:

particle-in-cell, kinetic plasma, collisional plasmas

3.1 はじめに

本章ではプラズマ中の衝突過程について特に広密度プラズマを取り扱うための技法を紹介したい。ここで取り扱う広密度プラズマとは、例えば超高強度レーザーにより生成された固体プラズマのようなものである。レーザーは固体密度より低いレーザー光の臨界密度以下の無衝突プラズマ内で主に吸収され、吸収されたエネルギーは高速電子により衝突過程が重要となる高密度領域に輸送され固体は加熱される。吸収領域と固体内の密度比はターゲットの物質によって100から1,000倍超となる。前章で議論したように粒子シミュレーション(PIC)でこのような広密度プラズマを効率的に取り扱うには重みの異なる粒子を使うことになる。本章では2体衝突モデルと統計論的な衝突モデルを紹介し広密度プラズマに適用する方法を議論する。

クーロン衝突のシンプルな2体衝突モデルはShanny等[1]が提案し、TakizukaとAbeが複数の粒子種をもつプラズマに拡張した(1977, TA77モデル)[2]。TA77モデルは非相対論的なエネルギーの衝突において、その前後で運動量とエネルギーが完全に保存する。TA77モデルはSentoku等により弱い相対論的なエネルギー領域に拡張されている[3]。またNanbuとYonemuraが2体衝突モデルを異なる重みをもつ粒子間の衝突に拡張した(1998, NY98モデル)[4]。NY98モデルでは重みの異なる粒子間の衝突において、後で説明するようにリジェクション法を用いているので、個別の衝突では運動量とエネルギーは保存しない。しかし何度も衝突を繰り返すうちに統計的に運動量とエネルギーが保存されるように工夫されている。NY98は等しい重みの粒子間の衝突においてTA77に一致する。し

かし統計的な運動量とエネルギーの保存の精度を維持するためにはセルあたり100個以上のPIC粒子が必要となり、それ以下だと運動量/エネルギー保存の精度は悪くなり実用的でない。ちなみに異なる重みの粒子間の2体衝突で完全に運動量とエネルギーを保存し、正しく緩和過程を記述するスキームは存在しない。SentokuとKempはRef.[3]のモデルを強相対論的な領域まで拡張し、また異なる重みの粒子間衝突でエネルギーを完全に保存し、運動量を統計的に保存するスキームを開発した(2008, SK08モデル)[5]。SK08モデルではエネルギー保存が満たされることによりメッシュ当りの粒子数が少なくてもシステムのエネルギー保存性が高いことが最大のメリットである。次節ではSK08モデルを紹介する。

2体衝突モデルとは別にLangevin方程式に基づく統計的手法も開発されている。衝突モデルとは、結局のところ、高密度プラズマ中での速度緩和を模擬するためのものであり、粒子が実際にクーロン力で軌道を修正する様子を計算するわけではない。2体衝突モデルとは粒子のデータから直接速度緩和に相当する速度揺動を計算する手法である。これは保存性が良いという利点がある反面、粒子の識別が不要であるという粒子コードの特性が失われ、どの粒子が同じセル内に存在するかを探索するためのランダムペアリングのプロセスに時間を費やす。これに対し、Langevin方程式を用いた場合にはあくまでも粒子の平均量である平均速度と平均エネルギーのみで緩和計算が可能なので、粒子コード本来の構造を失わずに計算することが可能である。これについての詳細な議論は3.3節で述べる。

Department of Physics, University of Nevada, Reno, USA

¹⁾ Setsunan University, Neyagawa, OSAKA 572-8508, Japan

authors' e-mail: sentoku@unr.edu, taguchi@ele.setsunan.ac.jp

3.2 広密度プラズマのための2体衝突モデル

2体衝突モデルはセル内で起る可能性がある全ての衝突過程を衝突ペアのランダム選択によって表現している。そのため同種粒子間（電子-電子など）や異粒子種間（電子-イオン）の個々の衝突が等しい確率で選択されるように考慮して、ランダムソーティングによるペア選択を行う。ペアリング手法の詳細は参考文献[2]にあるのでそちらを参照のこと。また、非相対論的のTA77を相対論に拡張するには、速度による計算を運動量ベースに変更し、衝突する2粒子の重心系への変換をガリレオ変換からローレンツ変換に変えればよい。詳細は参考文献[5]にあるのでこれも割愛する。

衝突周波数の扱いについて述べておく。次式は二つの粒子種 α （電荷 e_α ）と β （電荷 e_β ）間の衝突における衝突周波数である。

$$\nu_{\alpha\beta} = \frac{4\pi(e_\alpha e_\beta)^2 n_l L}{p_{\text{rel}}^2 v_{\text{rel}}} \quad (1)$$

ここで n_l は二つの電荷の密度のうち低い方の密度を示し、 L はクーロン対数、また p_{rel} と v_{rel} は2粒子間の相対的な運動量と速度である。これはプラズマ中の衝突周波数であるSpitzerの理論を使っている[6]。広密度プラズマでは高温低密度プラズマから、低温高密度プラズマを連続的に取り扱うが、低温高密度では縮退している場合Spitzerモデルが使えなくなる。Spitzerの衝突周波数は温度の2/3乗に反比例するので、エネルギーが低くなると衝突周波数は発散してしまう。物理的にはある温度以下では縮退が起り衝突周波数は発散しない。縮退状態への閾温度 T_0 は以下の式で計算される。

$$T_0 = \frac{\hbar^2}{2m_h} (2\pi^2 n_h)^{2/3} \quad (2)$$

ここで c は光速、 n_h (m_h)は電荷 e_α と e_β の密度のうち高い方の密度（質量）を表す。この温度以下では縮退した状態とし衝突周波数を以下の一定値とし発散を抑える。

$$\nu_{\alpha\beta} = \frac{4m_h (e_\alpha e_\beta)^2 L}{3\pi \hbar^3} \quad (3)$$

ここから広密度プラズマを取り扱う上で大切な異なる重みをもつ粒子間の衝突について説明する。まずNambu等によるNY98モデルについて説明し、その問題点を改善するための技法を紹介したい。

まず α 粒子種の i 番目の粒子の重みを $w_{\alpha i}$ とし、同様に $w_{\beta j}$ を β 粒子種の j 番目の粒子の重みとする。するとグリッド内の粒子種の密度 n_α と n_β はそれぞれ、

$$n_\alpha = \sum_i^{N_\alpha} w_{\alpha i}, \quad n_\beta = \sum_j^{N_\beta} w_{\beta j} \quad (4)$$

いま α 種の i 番目の粒子が β 種の j 番目の粒子と衝突したとすると、粒子 α_i の衝突確率は $P_\alpha = w_{\beta j} / \max(w_{\alpha i}, w_{\beta j})$ であり、一方の粒子 β_j の衝突確率は $P_\beta = w_{\alpha i} / \max(w_{\alpha i}, w_{\beta j})$ となる。わかりにくいと思うので図の例でこの確率を確認し

てみよう。

図1は重み2の粒子 α_i と重み6の粒子 β_j が衝突した場合である。イメージとして基準となる重み1を内包粒子1としている。 α_i 内の内包粒子数は相手側の β_j 粒子の内包粒子より少ないので、 $P_\alpha = 6/6 = 1$ となり、必ず衝突により散乱される。一方、 β_j 粒子の内包粒子は確率的に6つのうち2つしか衝突しない。 $P_\beta = 2/6$ となり散乱される確率は1より低い。そこでNY98モデルでは β_j 粒子が衝突により散乱される確率を $2/6$ とし、3回に1回しか散乱されず、他2回は α_i 粒子が散乱され運動量やエネルギーが変化しても β_j 粒子はそのまま変化しない。これがNY98がリジェクション法と呼ばれる理由である。リジェクション法はモンテカルロ法ではよく使われる手法であるが、この方法では運動量とエネルギーは個々の衝突で保存しない。しかしながら多くの粒子を同じように衝突させた後にエネルギーと運動量は統計的に保存する。ただし、あとに検証で示されるように、セル内の粒子数が100個以上と多くないと統計上保存性が悪い。

さて衝突の前後でエネルギーを保存するにはどうしたらいいだろうか。SentokuとKempにより提案された手法では両粒子は衝突において必ず散乱される（図1(b)を参照）。ただし重い方の β_j 粒子は $P_\beta = 2/6$ の確率で部分散乱されるものとする。そして β_j 粒子は内包粒子間でエネルギーと運動量を分ける。そのため衝突後(after)の β_j 粒子のエネルギーは確率 P_β を使い衝突の前(before)の値と散乱による変化した分(scattered)の平均値をとり

$$\epsilon_\beta^{\text{after}} = \epsilon_\beta^{\text{before}} \cdot (1 + P_\beta) + \epsilon_\beta^{\text{scattered}} \cdot P_\beta, \quad (5)$$

となり、同様に運動量は、

$$\mathbf{p}_\beta^{\text{after}} = \mathbf{p}_\beta^{\text{before}} \cdot (1 - P_\beta) + \mathbf{p}_\beta^{\text{scattered}} \cdot P_\beta, \quad (6)$$

となる。衝突の前後では2粒子の全エネルギーと全運動量は保存している。しかし式(6)の衝突後の運動量を使って計算したエネルギーは式(5)のエネルギー $\epsilon_\beta^{\text{after}}$ より小さくなってしまふ。つまり単純に確率 P_β にて運動量を分配するとエネルギーを失ってしまう。ここで物理的なイメージを考えてみると、一つのマクロ粒子で部分散乱が起ると、そのエネルギーはマクロ粒子内部の内包粒子が熱化し

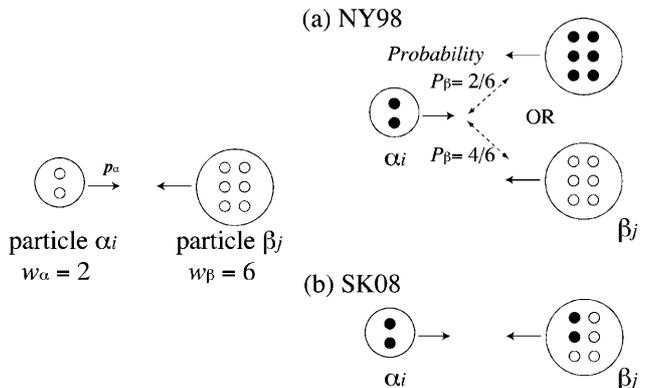


図1 異なる重みをもつ粒子間の衝突。(a)NY98：リジェクション法。(b)SK08：マージング法。

て内部エネルギーが増えているはずである。しかしPIC粒子に内部エネルギーは無いので、以下の式で重みの大きい粒子 β に熱化分の運動量を便宜上足し合わせエネルギーの不足分を補うこととする。

$$\mathbf{p}_{\beta}^{\text{final}} = \mathbf{p}_{\beta}^{\text{after}} + \Delta\mathbf{p}_{\beta\perp}. \quad (7)$$

$\Delta\mathbf{p}_{\beta\perp}$ の値はエネルギーが保存するように以下の式で決定し、方向は運動量 $\mathbf{p}_{\beta}^{\text{after}}$ に垂直なランダムな方向とする。

$$\Delta|p_{\perp}| = m_{\beta}c\sqrt{\gamma_{\epsilon_{\beta}^{\text{after}}}^2 - \gamma_{\mathbf{p}_{\beta}^{\text{after}}}^2}. \quad (8)$$

ここで m_{β} は粒子種 β の質量であり、また、

$$\gamma_{\epsilon_{\beta}^{\text{after}}}^2 = 1 + \epsilon_{\beta}^{\text{after}}/m_{\beta}c^2, \quad (9)$$

$$\gamma_{\mathbf{p}_{\beta}^{\text{after}}}^2 = \sqrt{1 + |\mathbf{p}_{\beta}^{\text{after}}|^2/m_{\beta}c^2}. \quad (10)$$

$\Delta\mathbf{p}_{\beta\perp}$ をランダムな方向に設定することで、足し合わせた時に $\Delta\mathbf{p}_{\beta\perp}$ はキャンセルし統計的に運動量保存が満たされる。

NY98には異なる重み間の衝突を確率的に正しく扱うために、マクロ粒子内の実粒子数を使った時間調整という大切なしかし判りづらい概念があるのでここで解説しておく。セル内のマクロ粒子が $N_{\alpha} > N_{\beta}$ であるとき、2体衝突するペア数は N_{α} である。また実粒子の全衝突数 $n_{\alpha\beta}$ は以下の式で与えられる。

$$n_{\alpha\beta} = \sum_i^{N_{\alpha}} \frac{w_{\alpha i} w_{\beta i}}{\max(w_{\alpha i}, w_{\beta i})}. \quad (11)$$

全衝突数を粒子の重みが一樣である場合と同等にするためにシミュレーションの時間ステップ Δt_0 を以下のように補正する。

$$\Delta t = \frac{n_{\alpha}}{n_{\alpha\beta}} \Delta t_0. \quad (12)$$

もし $N_{\beta} > N_{\alpha}$ であれば係数は $(n_{\beta}/n_{\alpha\beta})$ とする。この意味するところを図2のケースを例として説明する。図中二つのケース(a)同じ重みの衝突と(b)異なる重みの衝突で

N_{c_macro} : Number of binary collision
 $n_{\alpha\beta}$: Number of collision of real particles (defined by Eq. (28))

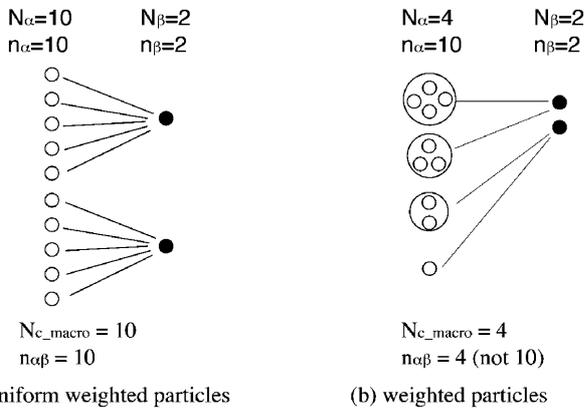


図2 サンプルケース：(a)一様な重みをもつ場合、(b)異なる重み粒子間の衝突の場合。

は、 α 種粒子と β 種粒子の数密度はそれぞれ同じである。

同じ重みの(a)の場合、マクロ粒子のペア数(N_{c_macro})はTA77のルールに従い10となり、衝突数 $n_{\alpha\beta}$ も10となる。異なる重みの(b)の場合マクロ粒子の衝突ペア数は4対であり $n_{\alpha\beta}$ は4となる。つまり実際に起こらなければいけない衝突数10に対してその数は2/5となっている。そこで時間ステップに $(n_{\alpha}/n_{\alpha\beta})=(5/2)$ 倍を掛けて、全衝突数を10に補正する。これにより物理的な衝突数は一様な重みの場合(a)と異なる重みの場合(b)は同等になる。もし α と β が同一種である場合、マクロ粒子のペア数 N は $N = N_{\alpha}/2$ (N_{α} が偶数のとき)か $N_{\alpha} = (N_{\alpha} + 1)/2$ (奇数のとき)であるので、全衝突数 $n_{\alpha\alpha}$ は

$$n_{\alpha\alpha} = 2 \sum_i^N \frac{w_{2i-1} w_{2i}}{\max(w_{2i-1}, w_{2i})}, \quad (13)$$

となり、時間ステップを $\Delta t = (n_{\alpha}/n_{\alpha\alpha})\Delta t_0$ とすればよい。

ここからTA77, NY98, SK08をビーム緩和のシミュレーションに適用し、エネルギーと運動量の保存性について調べてみよう。熱速度 $0.001c$ の温度をもつ背景電子を考える。密度は 10^{25} cm^{-3} とし、 $t=0$ で背景電子の内10%に $0.7m_e c$ のドリフト運動量を与える。計算ではe-e衝突だけを考慮し電磁波は解かず、空間0次元運動量3次元の純粋なモンテカルロシミュレーションを行った。外部からエネルギーの注入はないのでトータルエネルギーは保存しなければならない。以下三つのケースを行った。

一様な重みのCase A (TA77)をこの計算の基準とする。図3に背景電子のエネルギーの時間発展をプロットした。粒子数がセルあたり250個のときはNY98もTA77に近い結果となっている。しかし10個になるとエラーが大きくなっていることが確認できる。一方SK08は10個でもエ

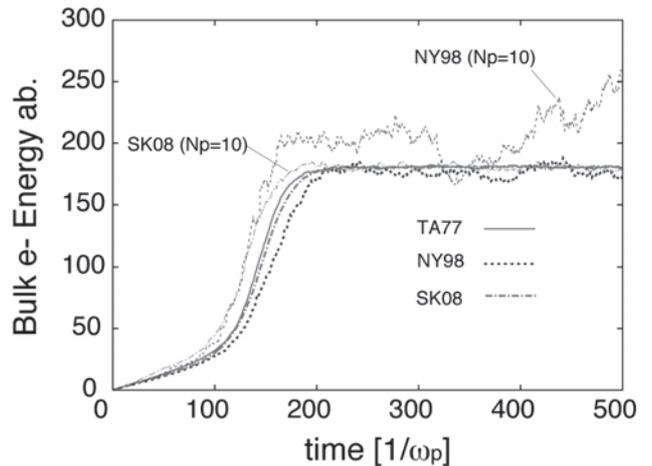


図3 ビーム緩和計算における背景電子のエネルギーの時間発展。
 Case A (TA77)：一様な重みの粒子、500粒子/セル (背景電子450, ビーム50)。
 Case B (NY98)：異なる重みの粒子、250粒子/セル (背景電子125, ビーム125)と10粒子/セル (背景電子5, ビーム5)。
 Case C (SK08)：異なる重みの粒子、粒子数はCase Bと同じ。

ラーは小さく抑えられ最終的な背景電子の温度も TA77 と一致している。

続いてシステムのエネルギーと運動量の時間発展をみよう (図 4)。TA77 はどちらも完全に保存する。図はセルあたりの粒子10個の時の NY98 と SK08 を比較している。SK08 は完全にエネルギーが保存し NY98 はエネルギーのエラーが振動し最終的に40%近いエラーとなっている。また SK08 は運動量でもよい保存性が確認できる。NY98 の場合このテスト計算の場合、セルあたり500個の粒子を使うことで良い結果を得られた。

本節をまとめると、TA77 と NY98 を発展させた SK08 のエネルギー保存性と運動量の統計的な保存性を確認できた。前章の高次補間と組み合わせることで数値加熱や数値エラーを抑制し計算精度を上げることができる。これでハッピーと言いたいところであるが、実はまだ一つ問題が残っている。シミュレーションは低密度領域と高密度領域で同じ時間ステップを使い進めるため、高密度領域では $\nu_{ei} \Delta t$ が大きくなり強く粒子が散乱されるためランダムノイズが発生し、電流にそのノイズがのってしまう。その結果電磁場と電流の一貫性が壊れ数値加熱によりエネルギーが増大する。これは強い散乱で発生したノイズで前章で紹介した粒子数依存のノイズと異なりグリッド計算で高次補間をしても落とせない。UCLA の OSIRIS では高次補間し、さらにグリッド間で電流の平滑化を取り入れていると聞いたが本質的な解決法ではない。このランダムノイズのため高密度のシミュレーションを行うとエネルギー保存性が極めて悪くなる。時間ステップを小さくし、高密度域で $\nu_{ei} \Delta t \ll 1$ とすればもちろん抑制できるが、それでは計算量が増えてしまう。これが当時の私を最後まで悩ましたが、解決方法はふとしたことから浮かんだ。どこかの会議の帰りの飛行機で、座席のシートポケットにある雑誌をぺらぺらやっていたら、ノイズキャンセリング機能をもつヘッド

ホーンの広告があった。ノイズをどう抑えるか仕組みの簡単な説明があったが、その中にランダムノイズは同じ周波数のノイズを足し合わせることで弱められるとあった。ひらめいて帰宅後、電流計算を衝突の前後で行いそれを足し合わせて平均を行ってみたら、驚くほどエネルギー保存が改善された。試されたい。

3.3 Langevin 方程式を用いた統計モデル

ここからは 2 体衝突モデルとは全く別の手法である統計モデルを紹介しよう。プラズマ粒子コードでは、粒子データと格子データをやり取りすることでプラズマの相互作用を計算する。この方法の利点は、計算量の低減である。もし粒子間力を 2 体相互作用で解くと、粒子数の 2 乗に比例する計算量が必要であるが、空間格子を導入して電場や磁場を格子点で解けば、粒子数に比例した計算量に格子点数に関係した計算量の加算で済む。格子点数は粒子数よりも少ないので、格子点に関連した計算量が格子点数に関する多少大きいべき乗依存性があっても問題にならない。

ただ、格子の導入とは空間を粗視化することであり、場の量の短波長成分が除去されることを意味する。短波長成分の除去は、粒子の近接的な相互作用を抑制するため、粒子コードが比較的大きなタイムステップでも安定に動作する方向に働く。しかし、衝突の効果が重要な高密度プラズマ領域では、この短波長成分の除去による近接相互作用の抑制は物理的に正しくない結果を生む。かといって、空間格子の間隔を狭くして短波長成分を含めるようにすると、タイムステップを小さくしなければならず、計算量の大幅な増加が避けられない。すなわち計算機シミュレーションとしての実用性を損なうことになる。

しかし、プラズマ粒子コードにおいて、個々の衝突における軌道の偏向は重要ではない。そもそも式(1)のクーロン衝突係数は小角度散乱の集積結果であり、2 個の実荷電粒子の衝突に要する時間は、プラズマ振動数やクーロン条件で決まる粒子コードのタイムステップに対して遙かに短く、マルコフ過程と考えて衝突計算をすることができる。コードとしては電場磁場中での粒子運動に衝突の効果による非可逆的な速度緩和や熱緩和の効果が入れればいいのであり、これが付加的に衝突モデルを導入すれば十分であることの原因である。

前節で説明した 2 体衝突モデルでは、粒子データを元に衝突計算をしているが、あくまでも緩和量を模擬するのが目的なので、軌道を正確に解く必要はなく、運動量の修正だけで事足りる。このため、2 体衝突で計算すべき必然性はなく、緩和を模擬できるような他のアルゴリズムを選択することは可能である。

さて、2 体衝突モデルは粒子データから緩和量を評価する方法である。そもそも粒子コードは粒子データと格子データのやり取りにより粒子間相互作用を計算する手法であるため、個々の粒子の識別は不要である。たとえば、電子密度を計算する場合、粒子の位置データを元に格子配分を行うが、このとき、粒子がどの格子に属するかをあらかじめ識別しておく必要はなく、粒子の番号順に計算するこ

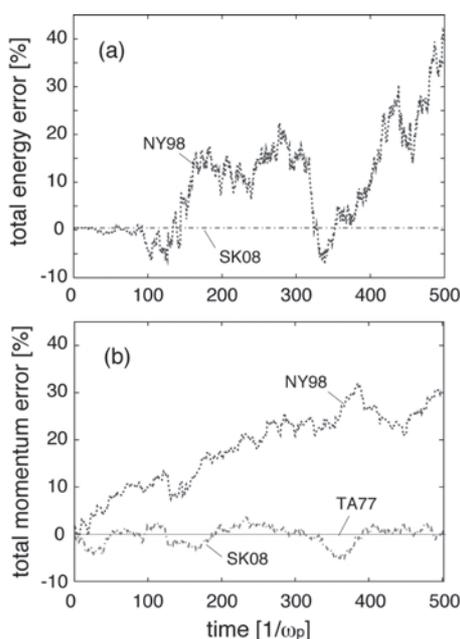


図 4 全システムのエネルギーと運動量の時間発展。

とが可能である。しかし、2体衝突モデルで計算する場合は、どの粒子とどの粒子が近いかという探索を行わねばならず、粒子のソーティングなどの余分な処理が必要となる。これは、粒子コードの本来の利点を損ねているといえる。また、前節で詳細に説明があったように、重みの違う粒子が存在する場合には、これを考慮して2体衝突計算を行う必要があるが、これも粒子に個性をもたせたために生じた問題点であると考えられる。

これに対し、格子データから緩和に必要な運動量の修正計算をすることを目的としたのが、Langevin方程式を用いたモデルである。Langevin方程式とは、粒子の運動方程式にランダムな揺動力を付加したものである。この方程式は、ブラウン運動を解析するために考えられたもので、次式の形式である。なお、本節では簡単のため非相対論的な記述で話をする。

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F} - m\nu(\mathbf{v} - \mathbf{u}) + \mathbf{R}(t). \quad (14)$$

式(14)で、 \mathbf{F} は電磁力などの外力であり、これに統計的平均値が0の揺動力 $\mathbf{R}(t)$ と速度緩和項 $-m\nu(\mathbf{v} - \mathbf{u})$ を加えたのがLangevin方程式である。ここで、 ν は速度緩和係数、 \mathbf{u} はセル内の平均速度である。揺動力は乱数を使って計算するが、これが粒子散乱項になる。しかし、ランダムな力を与えるので、平均的には粒子を加速させ、時間とともに平均エネルギーが増大する。すなわち加熱作用がある。この加熱を抑制するのが速度緩和項であり、こちらは冷却作用をもつ。この揺動力による加熱と速度緩和項による冷却が釣り合ったところで平衡分布が決まる。逆に言えば、最終的な緩和温度により、 $\mathbf{R}(t)$ と ν の関係が決まるようになっている。これはアインシュタインの関係に他ならない。

次に、緩和係数の計算について述べる。まず、運動論によれば、衝突過程は次式で表される[7]。

$$\frac{\partial f^{\alpha}}{\partial t} = - \sum_{\beta} \nabla_{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{J}^{\alpha\beta}. \quad (15)$$

ここで、 f^{α} は速度分布関数である。 α や β は粒子の種類を表す。この式は、 α 種の粒子の分布関数の時間変化が衝突相手の β 種の粒子(標的粒子)の速度分布で決まる緩和量を用いて計算されることを示している。

式(15)における $\mathbf{J}^{\alpha\beta}$ は、速度空間でのフラックスを与え、

$$\mathbf{J}^{\alpha\beta} = \frac{e_{\alpha}^2 e_{\beta}^2 L}{4\pi\epsilon_0^2 m_{\alpha}^2} \left\{ f^{\alpha}(\mathbf{v}) \nabla_{\mathbf{v}} H(\mathbf{v}) - \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{v}} \cdot [f^{\alpha}(\mathbf{v}) \nabla_{\mathbf{v}} \nabla_{\mathbf{v}} G(\mathbf{v})] \right\}, \quad (16)$$

である。ここで、 H や G はRosenbluthポテンシャルと呼ばれ、次式で与えられる。

$$H(\mathbf{v}) = \left(1 + \frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}} \right) \int \frac{f^{\beta}(\mathbf{v}')}{|\mathbf{v}' - \mathbf{v}|} d\mathbf{v}', \quad (17)$$

$$G(\mathbf{v}) = \int f^{\beta}(\mathbf{v}') |\mathbf{v}' - \mathbf{v}| d\mathbf{v}', \quad (18)$$

式(15)は、見てわかるように分布関数 f^{α} に関しての非線形方程式であり、これを直接解くのは数値解析でもかなり難しい作業である。まして、粒子コードにおける粒子データはセルごとの粒子数が少なく、意味のある分布関数の形状を求めるのさえ困難である。

この係数を計算する手法はいくつか提案されているが[8,9]、ここではメリーランド大学のAntonsenが提案した簡易モデル(簡易Langevinモデル)を紹介しよう[10]。衝突モデルは、要するに熱緩和、すなわち非平衡状態から平衡状態への状態変化を解くのが目的である。今、現在の分布が平衡状態からそれほど大きく外れてはいないと考える。上記のように、この問題はあくまでも緩和係数が実際と大きく異ならなければよい。そこで、終状態までの熱緩和時間がある程度の誤差内で評価すればいいと考えれば、Rosenbluthポテンシャルの計算に必要な β 種粒子の分布関数を、現時点ではなく終状態の平衡分布関数で評価すればいいだろうというのがAntonsenのアイデアである。この考えに基づき、 β 種粒子の平均速度 \mathbf{v}_{β} と温度 T_{β} で指定されるマクスウェル分布でRosenbluthポテンシャル H と G を評価すると、速度空間フラックスは次式のようになる。

$$\mathbf{J}^{\alpha\beta} = - \frac{e_{\alpha}^2 e_{\beta}^2 n_{\beta} L}{4\pi\epsilon_0^2 m_{\alpha}^2 |\mathbf{v} - \mathbf{v}_{\beta}|^3} \times \left\{ \frac{m_{\alpha}}{m_{\beta}} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_{\beta}) f^{\alpha} + \frac{k_B T_{\beta}}{m_{\beta}} \nabla_{\mathbf{v}} f^{\alpha} \right\} \phi(x). \quad (19)$$

ここで、 $\phi(x)$ は以下で与えられ、誤差関数を使って計算することができる。

$$\phi(x) = \frac{4}{\sqrt{x}} \int_0^x \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi. \quad (20)$$

ただし、 x は次式で与えられる。

$$x = \sqrt{\frac{m_{\beta} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_{\beta})^2}{2k_B T_{\beta}}}. \quad (21)$$

以下、簡単のため、電子1種類の緩和について考える。この場合、 α 種と β 種が同じ粒子なので、分布関数の時間変化は次式のように単純化される。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \left\{ \nu_s(\mathbf{v}) \left[\mathbf{v} f + \frac{k_B T}{m_e} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \right] \right\}. \quad (22)$$

ここで、 $\nu_s(\mathbf{v})$ は次式で与えられる。

$$\nu_s(\mathbf{v}) = \frac{n_e e^4 L}{4\pi\epsilon_0^2 m_e^2 v^3} \phi(x). \quad (23)$$

この分布関数の時間変化に関する方程式は、Fokker-Planck方程式、

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot (\mathbf{F}f) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} : (Df), \quad (24)$$

と比較することで、緩和時間と拡散係数を評価できる。ただし、計算の途中で等分布に近いと仮定して、テンソル

やベクトルに関する量をスカラー量に低減している。まず式(14)における速度緩和係数 ν は、

$$\nu = \nu_s + \nu_D, \quad (25)$$

で与えられる。ここで、

$$\nu_D = -\frac{k_B T}{m_e v} \frac{\partial \nu_s}{\partial v}, \quad (26)$$

である。また、拡散係数 D は、

$$D = \frac{k_B T}{m_e} \nu_s(v), \quad (27)$$

である。この拡散係数 D は、式(14)の揺動力の相関関数と以下のような関係をもつ。

$$\langle \mathbf{R}(t_1) \mathbf{R}(t_2) \rangle = 2D \mathbf{I} \delta(t_1 - t_2). \quad (28)$$

実際のプログラムは、各格子における平均速度と平均エネルギーを計算し、これから計算される速度緩和係数 ν と拡散係数 D を使って、速度緩和と揺動力を計算し、速度に修正を加える、という過程を経て次ステップに進む、という流れになる。

ここで問題がある。前節で詳しく議論したように、このモデルで重要なのは保存量である。基本的に運動量とエネルギーが保存しなければならないが、Langevin方程式は個々の粒子に独立した修正を加えるので、そのままでは運動量やエネルギーは保存しない。このとき、あくまでもブラウン運動による平衡状態への緩和さえ合っていればよいと考えれば、厳密に保存する必要はなく、平均量がある誤差範囲で評価できればよいとも言える。しかし、粒子コードの場合、平衡性を評価する局所領域のサイズが小さく、それに含まれる粒子数が少ないので、大きな揺らぎの発生が避けられない。揺らぎの大きさは、電磁場の揺らぎに直接影響を及ぼし、新たな不安定性や人工的な加熱を引き起こす。そこで、緩和を評価するセルごとに修正前と修正後の運動量とエネルギーを計算し、それらが等しくなるように補正を施す。具体的には、各粒子の速度 v_i に与える修正量を以下の式で評価する。

$$\Delta v_i = [e^{-(\nu_s + \nu_D) \Delta t} - 1] v_i + (\nu_s + \nu_D) \Delta t a v_i + \sqrt{\frac{2 \Delta t k_B T \nu_s}{m_e}} (\xi_i + \xi_c). \quad (29)$$

ここで、 ξ_i は平均が0で2乗平均が1になるような成分を持つ3次元一様乱数である。また、 ξ_c と α は補正パラメータであり、

$$\sum \Delta v_i = 0 \quad (30)$$

$$\sum (v_i + \Delta v_i)^2 = \sum v_i^2 \quad (31)$$

の2式を満足するように選ぶ。式(30)、(31)は、相対論的公式ではないので、温度が相対論的な場合には使えない。しかし温度が非相対論的で平均速度が相対論的な場合には、平均速度の系にローレンツ変換をすれば使用すること

が可能である。

いくつか結果を示す。図5(a)-(d)は、初期値としてフラットトップな速度分布を与えた粒子群が時間的に緩和していく様子を示したものである。この図で破線は初期値と総エネルギーが等しいマクスウェル分布、すなわちこのエネルギーでの終状態である。この終状態は、Rosenbluthポテンシャルを評価した標的粒子分布でもある。図よりわかるように、徐々に終状態分布に漸近して最終的に一致する。なお、緩和の様子は2体衝突モデルで計算した結果とほぼ同じであり、時間的な変化もよく再現している。

次に、もう少し平衡状態からずれた初期条件として、2温度分布、すなわち、速度の速い成分と遅い成分の混じった初期分布にした結果を図6に示す。この場合も、マクスウェル分布への漸近の様子は2体衝突モデルとほぼ同じであることを確認している。このことから、緩和過程は分布の形状に敏感ではないので、標的粒子の分布を終状態マクスウェル分布で評価すれば十分である、というAntonsenの仮定が正しいことがわかる。

ただし、この仮定は等方分布の場合には2温度分布のように非平衡性が多少強くても問題ないが、プラズマ中の

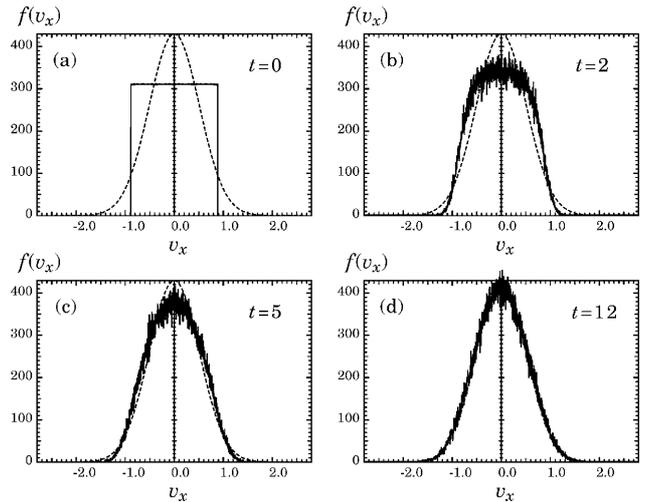


図5 Langevin モデルによる速度緩和の様子1。

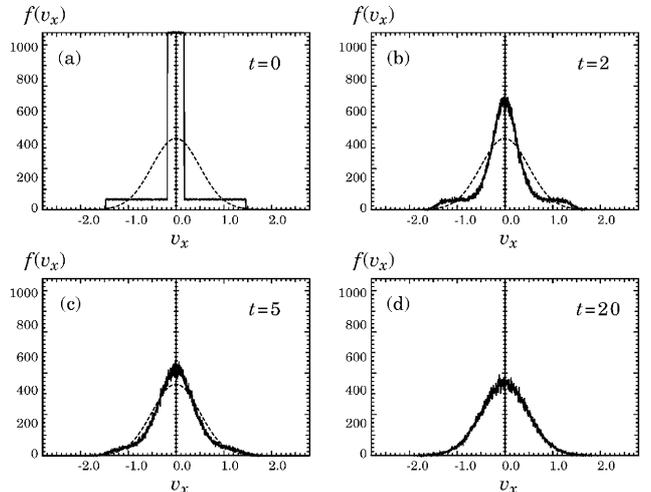


図6 Langevin モデルによる速度緩和の様子2。

ビーム伝播のような非等方2速度分布ではうまくいかない[11]。図7はこれを示した図である。

図7(a)は初期分布で、図7(b)はある程度の時間が経過した後の図である。図7(b)には比較のため、2体衝突モデルの結果をグレーの細線で示している。この比較からわかるように、簡易 Langevin モデルは2体衝突モデルよりも緩和が速い。ただし、時間が経過すれば、破線のマクスウェル分布に漸近するので、ビーム伝播問題でも簡易 Langevin モデルが有効であることは確かである。緩和が速い理由は、図7(a)のように破線の標的粒子分布が初期の2速度分布の中間に位置しているためである。標的粒子分布の平均速度と、初期の2速度分布のピークでの速度との差が実際に衝突するピーク間の速度差より小さくなり、速度の3乗に反比例する衝突周波数において無視できない差違となって現れるのである。

ただし、問題になるのは図7のように2個のマクスウェル分布が十分離れている場合、すなわち各ピークの間隔がより二つの山の速度差が十分大きい場合である。そこで、速度拡がりから二つの速度分布を分離することが可能であると仮定すれば、粒子を二つの群に分離して、それぞれの群での緩和と、異なる群間の緩和の3種類を計算すれば良いという考えが得られる。ここではその詳細を示すことはできないので、結果だけを示す。

図8は、初期分布を2群に分けて緩和計算を行った図である。図7(b)と比較してわかるように、緩和が遅くなっている。この図には、2体衝突モデルも同時に描いているが、隠れて見えない。すなわち、ほぼ一致している。このことから、ビーム分布の場合も、適切な群に分離できれば、簡易 Langevin モデルが有効であることがわかる。なお、2群間の緩和を考えると、2群の相対速度方向に平行な拡散と垂直な拡散の相違も考慮する必要がある。図8の計算ではこれも含めている。

問題は、レーザープラズマ相互作用で発生する電子ビームの場合には、最初から2群に分離できないことである。ただ、ここまで見てきたように標的粒子分布の形状には鈍感なのであまり精度よく分離する必要はない。経験的には、粒子群をその平均速度の上位と下位に分離するだけで十分である。衝突緩和の問題は粒子コードにとっては付加価値に過ぎない。さほど精度よく解く必要はなく、あくまでも粒子の運動に補正を与えればよいのである。

また、群に分けるのが3個以上だと、相互緩和の計算量が増え、群に分離するのも難しくなる。この辺りはトレードオフで、2体衝突モデルの計算量を凌駕する場合にはエネルギーや運動量の保存が保証されている2体衝突モデルに軍配が上がる。どちらがよいかは難しいところだが、エネルギーや運動量を自動的に保存するという意味では2体衝突モデルが良い。しかし、粒子の識別が必要なランダムペアリングに時間がかかると共に、衝突計算は重心系に移動して散乱させてまた戻すという作業をそれぞれの粒子について計算せねばならず、計算手順は多い。これに対して、簡易 Langevin モデルは温度や流速計算のような加算計算は必要だがそれほど複雑ではなく、計算にかかる労力は少

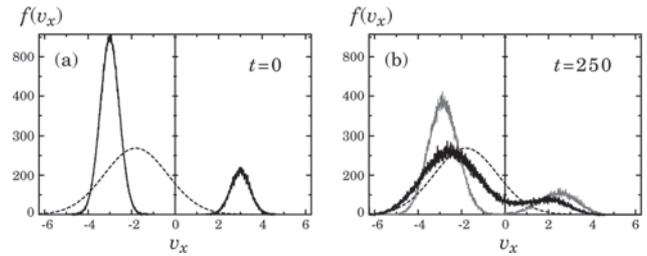


図7 Langevin モデルによる速度緩和の問題点。

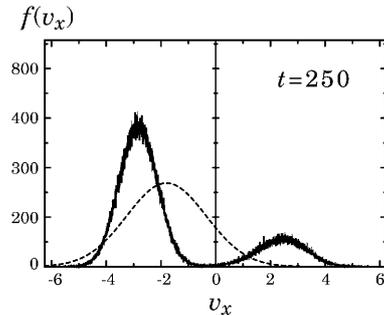


図8 2群簡易 Langevin モデルによる速度緩和の様子。

ない。ただしエネルギーや運動量の保存のための修正にもう一度加算計算が必要なので、若干煩雑である。またビーム相互作用問題のような非等方性の強い分布に対しては、同種粒子でも標的粒子の分類が必要になるなどの問題も生じる。

最終的には、衝突計算がどの程度重要か、プラズマの非平衡性、非等方性がどの程度強いかなどに応じて使い分けられたいと思われる。

3.4 まとめ

今回は、密度が高い領域のシミュレーションに不可欠な衝突計算を粒子コード中に導入する技法の詳細について述べた。レーザープラズマの解析では、密度変化が大きく、単に高密度領域における衝突を考えるだけではだめで、低密度領域とのスムーズな接続がポイントである。

2体衝突モデルは、運動量とエネルギー保存則を満足させるのが比較的容易であり、現在もっともよく使われている。ただし、重みの異なる粒子が混在している場合には保存性を保つために付加的な計算が必要となる。また、粒子をランダムに2個ずつ選択して衝突させる必要があるため、どの粒子が近傍に存在するかを確認する前処理も必要で、粒子コードというフレームワークからやや逸脱した感がある。

これに対し、Langevin 方程式を用いたモデルは、あくまでも格子量で速度揺動を計算しようというもので、粒子コード本来の構造を保っている。ただし、ここで述べた簡易モデルでは、運動量とエネルギー保存に関する相対論的な拡張が不完全な上に、ビーム伝播のように分布関数が2峰性をもつ場合には Rosenbluth ポテンシャルを評価する分布の設定が難しい。ただし、粒子間の直接衝突を計算するわけではないので、異なる重みが混在することによる問題は発生しない。このあたりも含めて、今後の発展が待

たれるところである。

参考文献

- [1] R. Shanny *et al.*, Phys. Fluids **10**, 1281 (1967).
- [2] T. Takizuka and H. Abe, J. Comput. Phys. **25**, 205 (1977).
- [3] Y. Sentoku *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn **67**, 4084 (1998).
- [4] K. Nanbu and S. Yonemura, J. Comput. Phys. **145**, 639 (1998).
- [5] Y. Sentoku and A.J. Kemp, J. Comput. Phys. **227**, 6846 (2008).
- [6] L. Spitzer Jr., *Physics of Fully Ionized Gases* (Interscience, New York, 1956) (Chapter 5).
- [7] M.N. Rosenbluth *et al.*, Phys. Rev. **107**, 1 (1957).
- [8] W.M. Manheimer *et al.*, J. Comput. Phys., **138**, 563 (1997).
- [9] A. Zhidkov : 放電研究 **50**, 2, 31 (2007).
- [10] T. Taguchi *et al.*, Optics Express **18**, 2380 (2010).
- [11] H. Sakagami *et al.*, Laser Part. Beams **30**, 243 (2012).

