研究内容紹介

Buneman-Boris Method

1. 理論

Buneman-Boris 法は、Newton-Lorentz 方程式を 2 次の精度をもつ中心差分法を用いて解く方法である。

$$m\frac{d\boldsymbol{v}_i(t)}{dt} = q\Big\{\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}_i,t) + \boldsymbol{v}_i(t)\times\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}_i,t)\Big\} \tag{1}$$

この式を中心差分法で差分化することを考える。右辺の速度 $\boldsymbol{v}_i(t)$ を線形補間で展開すると

$$\frac{\boldsymbol{v}^{n+1/2}-\boldsymbol{v}^{n-1/2}}{\Delta t} = \frac{q}{m}\Big\{\boldsymbol{E}_i^n + \frac{\boldsymbol{v}_i^{n+1/2}+\boldsymbol{v}_i^{n-1/2}}{2}\times\boldsymbol{B}_i^n\Big\} \tag{2}$$

となる。しかし右辺に未知数である $\boldsymbol{v}_i^{n+1/2}$ を含むため、このままでは解くことができない。そこで電場による力と磁場による力を分離することによって $\boldsymbol{v}_i^{n+1/2}$ を算出することを考える。まず、次のような $\boldsymbol{v}^-$ と $\boldsymbol{v}^+$ を導入する。

$$\boldsymbol{v}_i^- = \boldsymbol{v}_i^{n-1/2} + \frac{q}{m}\frac{\Delta t}{2}\boldsymbol{E}_i^n \tag{3}$$

$$\boldsymbol{v}_i^+ = \boldsymbol{v}_i^{n+1/2} - \frac{q}{m}\frac{\Delta t}{2}\boldsymbol{E}_i^n \tag{4}$$

$\boldsymbol{v}_i^-$ を見ると、$\boldsymbol{v}_i^{n-1/2}$ が $\Delta t/2$ 時間だけ電場による加速を受けた速度とみなすことができる。定義した $\boldsymbol{v}^-$ と $\boldsymbol{v}^+$ を (2) 式に代入すると

$$\boldsymbol{v}_i^+ - \boldsymbol{v}_i^- = \frac{q\Delta t}{2m}(\boldsymbol{v}_i^+ - \boldsymbol{v}_i^-)\times\boldsymbol{B}_i^n \tag{5}$$

となり、電場を消去することができる。$\boldsymbol{v}_i^-$ と $\boldsymbol{v}_i^+$ は電場による加速と磁場による回転をそれぞれ与える。定義した $\boldsymbol{v}_i^-$ と $\boldsymbol{v}_i^+$ の定義時間には意味はなく、$\boldsymbol{v}_i^{n-1/2}$ と $\boldsymbol{v}_i^{n+1/2}$ に対してのみ意味をもつこととなる。式によって与えられる回転角 θ は、

$$\Big|\tan\frac{\theta}{2}\Big| = \frac{|\boldsymbol{v}_i^+ - \boldsymbol{v}_i^-|}{|\boldsymbol{v}_i^+ + \boldsymbol{v}_i^-|} = \frac{q|\boldsymbol{B}_i^n|}{m}\frac{\Delta t}{2} = \frac{\omega_c}{2}\Delta t \tag{6}$$

となる。

$\omega_c\Delta t \ll 1$ の場合の回転角 θ は、

$$\theta = \omega_c\Delta t\Big(1 - \frac{\omega_c\Delta t}{12} + \cdots\Big) \tag{7}$$

となり、2 次の精度をもつ。

次の時間の速度 $\boldsymbol{v}_i^+$ を求めるためには、$\boldsymbol{v}_i^-$ と $\boldsymbol{B}_i^n$ から $\boldsymbol{v}_i^+$ の関係式が導ければ良い。そこで次のような磁場方向ベクトル $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ を定義する。

$$\boldsymbol{\alpha} = -\frac{\boldsymbol{B}_i^n}{|\boldsymbol{B}_i^n|}\tan\frac{\theta}{2} = \frac{q\Delta t}{2m}\boldsymbol{B}_i^n \tag{8}$$

$$\boldsymbol{\beta} = -\frac{\boldsymbol{B}_i^n}{|\boldsymbol{B}_i^n|}\sin\theta \;\; = \frac{2}{1+|\boldsymbol{\alpha}|^2}\boldsymbol{\alpha} \tag{9}$$

定義した $\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ は、$\boldsymbol{v}_i^-,\boldsymbol{v}_i^+$ と次のような関係にある。

$$\boldsymbol{v}_i' = \boldsymbol{v}_i^- + \boldsymbol{v}_i^-\times\boldsymbol{\alpha} \tag{10}$$

$$\boldsymbol{v}_i^+ = \boldsymbol{v}_i^- + \boldsymbol{v}_i'\times\boldsymbol{\beta} \tag{11}$$

従って、$\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}$ を求め、式 (10), (11) を解けば、$\boldsymbol{v}_i^-$ から $\boldsymbol{v}_i^+$ を求めることができる。求まった $\boldsymbol{v}_i^+$ から (4) 式を計算すれば、速度 $\boldsymbol{v}_i^{t+1/2}$ を算出することができることになる。この計算アルゴリズムを **Buneman-Boris 法**という。

2. 幾何学的意味

(10), (11) 式を見ただけでは、式がどのような意味を成しているのか直感的に理解するのは難しい。そこで幾何学的に式の意味を考えていくことにする。特にここでは、イメージし易い 2 次元の場合について考えることにする。

今 Fig.1 の (a) における $\boldsymbol{X}$ を、求まっている $\boldsymbol{v}^-$ と $\boldsymbol{B}$ で表したい。いきなり $\boldsymbol{X}$ ベクトルについて考えることは難しいので、まず (b) のような $\boldsymbol{v}^-$ を底辺とする直角三角形を考える。三角形の高さは、磁場 $\boldsymbol{B}$ と速度 $\boldsymbol{v}^-$ に垂直であることから、磁場と速度の外積をとればよいことが分かる。高さの大きさは直角三角形の性質から $|\boldsymbol{v}^-|\tan\theta/2$ となればよいから、($\boldsymbol{e}$ は磁場 $\boldsymbol{B}$ と速度 $\boldsymbol{v}^-$ に垂直な方向の単位ベクトルである。)

$$\boldsymbol{v}^-\times\boldsymbol{\alpha} = |\boldsymbol{v}^-||\boldsymbol{\alpha}|\sin\frac{\pi}{2}\boldsymbol{e} = |\boldsymbol{v}^-|\tan\frac{\theta}{2}\boldsymbol{e} \tag{12}$$

よって $\boldsymbol{\alpha}$ は方向に注意して

$$\boldsymbol{\alpha} = -\frac{\boldsymbol{B}}{|\boldsymbol{B}|}\tan\frac{\theta}{2} \tag{13}$$

以上より $\boldsymbol{v}^-$ を底辺とする直角三角形の高さを書き表すことができた (c)。これより斜辺は

$$\boldsymbol{v}' = \boldsymbol{v}^- + \boldsymbol{v}^-\times\boldsymbol{\alpha} \tag{14}$$

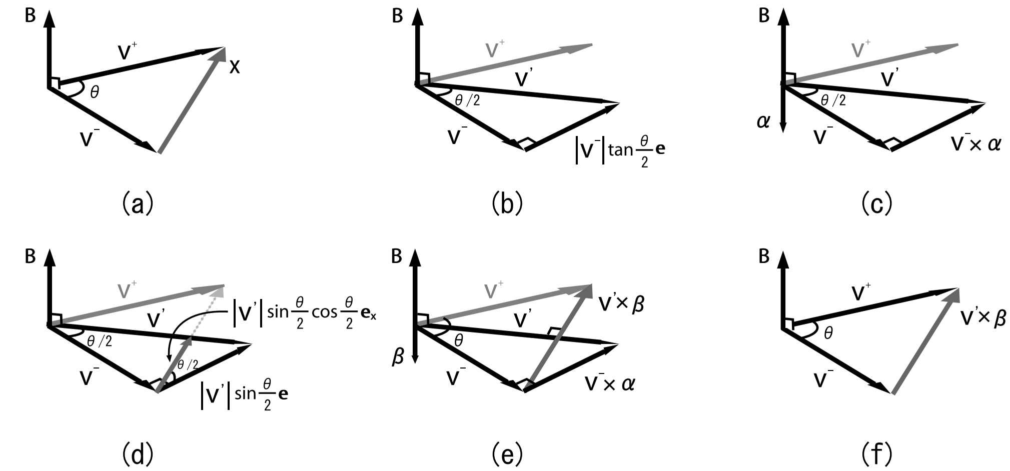

Fig. 1　Buneman-Boris 法の概念図

となる。次に (d) のような $\boldsymbol{v}'$ に垂直な辺を考える。辺の長さは $\boldsymbol{v}'$ を使って書き表すと、$|\boldsymbol{v}'|\sin(\theta/2)\cos(\theta/2)$ となる。求めたいベクトル $\boldsymbol{X}$ の大きさは、この垂辺の大きさの 2 倍となるから

$$|\boldsymbol{X}| = 2|\boldsymbol{v}'|\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2} = |\boldsymbol{v}'|\sin\theta \tag{15}$$

となり、(c) と同様に方向を考えれば

$$\boldsymbol{v}^- \times \boldsymbol{\beta} = |\boldsymbol{v}'||\boldsymbol{\beta}|\sin\frac{\pi}{2}\boldsymbol{e}_x = |\boldsymbol{v}'|\sin\theta\boldsymbol{e}_x \tag{16}$$

よって、方向に注意して $\boldsymbol{\beta}$ は

$$\boldsymbol{\beta} = -\frac{\boldsymbol{B}}{|\boldsymbol{B}|}\sin\theta \tag{17}$$

以上より、$\boldsymbol{X}$ は

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{v}' \times \boldsymbol{\beta} \tag{18}$$

となる。これより次の時間の速度 $\boldsymbol{v}^+$ を前の時間の速度 $\boldsymbol{v}^-$ と磁場 $\boldsymbol{B}$ から算出することができる。

$$\boldsymbol{v}^+ = \boldsymbol{v}^- + \boldsymbol{v}' \times \boldsymbol{\beta} \tag{19}$$

三次元の場合も原理は同様である。Buneman-Boris 法は純粋に Newton-Lorentz 方程式を各成分ごとに展開し、各々を中央差分化して得られる差分式と同じものが得られる。しかし、電場の式と磁場の式に分けて記述することによって、アルゴリズムが明解になり、プログラミングが容易になる利点と数式的に美しく表すことができるため、よく用いられる。

3. 相対論への拡張

レーザー・プラズマ相互作用のシミュレーションでは、荷電粒子 (特に電子) が光速付近にまで加速・加熱されるケースがしばしばある。そのような場合、相対論的 (ここでは質量補正のみ) に取り扱う必要性が出てくる。相対論へ拡張するには、従来用いてきた速度 $\boldsymbol{v}_i$ の代わりに $\boldsymbol{u}_i = \gamma_i\boldsymbol{v}_i$ を用いる。ここで、γ_i は $\gamma_i^2 \equiv 1/(1 - v_i^2/c^2)$ で定義されるローレンツ因子である。c は光速である。相対論的に拡張された Newton-Lorentz 方程式は、

$$\frac{\boldsymbol{u}^{n+1/2} - \boldsymbol{u}^{n-1/2}}{\Delta t} = \frac{q}{m}\left\{\boldsymbol{E}_i^n + \frac{\boldsymbol{u}_i^{n+1/2} + \boldsymbol{u}_i^{n-1/2}}{2\gamma_i^n} \times \boldsymbol{B}_i^n\right\} \tag{20}$$

$$(\gamma_i^n)^2 = 1 + |\boldsymbol{u}_i^-|^2 \tag{21}$$

となる。ここで、物理量は規格化されているものとする。以下の計算は非相対論と同様の手順を用いて解くことができる。具体的には以下の手順で計算を行えばよい。

1. $\gamma_i^{n-1/2} = 1/\sqrt{1 - |\boldsymbol{v}_i^{n-1/2}|^2}$
2. $\boldsymbol{u}_i^- = \gamma_i^{n-1/2}\boldsymbol{v}_i^{n-1/2} + \dfrac{q\Delta t}{2m}\boldsymbol{E}_i^n$
3. $\gamma_i^- = 1/\sqrt{1 + |\boldsymbol{u}_i^-|^2}$
4. $\boldsymbol{\alpha} = \gamma_i^- \dfrac{q\Delta t}{2m}\boldsymbol{B}_i^n$
5. $\boldsymbol{u}_i' = \boldsymbol{u}_i^- + \boldsymbol{u}_i^- \times \boldsymbol{\alpha}$
6. $\boldsymbol{\beta} = \dfrac{2}{1 + |\boldsymbol{\alpha}|^2}\boldsymbol{\alpha}$
7. $\boldsymbol{u}_i^+ = \boldsymbol{u}_i^- + \boldsymbol{u}_i' \times \boldsymbol{\beta}$
8. $\gamma_i^+ = 1/\sqrt{1 + |\boldsymbol{u}_i^+|^2}$
9. $\boldsymbol{v}_i^{n+1/2} = \gamma^+\boldsymbol{u}^+ + \dfrac{q\Delta t}{2m}\boldsymbol{E}_i^n$
10. 1 に戻る。

Fig. 2　Buneman-Boris 法の流れ図

```
/* by Buneman-Bris Method */
 for(i=0;i<2;i++)
   for(j=0;j<nmx;j++)
     {
       qmt = q[i]/m[i]*hdt;
       /* v- */
       Loz = 1.0/sqrt(1.0 - vav(vx[i][j],vy[i][j],vz[i][j]));
       vxm = Loz*vx[i][j] + qmt*Epx[i][j];
       vym = Loz*vy[i][j] + qmt*Epy[i][j];
       vzm = Loz*vz[i][j] + qmt*Epz[i][j];

       /* v' */
       Loz = 1.0/sqrt(1.0 + vav(vxm,vym,vzm));
       bxg = qmt*Loz* Bpx[i][j];
       byg = qmt*Loz* Bpy[i][j];
       bzg = qmt*Loz* Bpz[i][j];

       vxd = vxm + (vym*bzg - vzm*byg);
       vyd = vym + (vzm*bxg - vxm*bzg);
       vzd = vzm + (vxm*byg - vym*bxg);

       /* v+ */
       Loz = 2.0/(1.0 + vav(bxg,byg,bzg));
       vxi = vxm + (vyd*Loz*bzg - vzd*Loz*byg) + qmt*Epx[i][j];
       vyi = vym + (vzd*Loz*bxg - vxd*Loz*bzg) + qmt*Epy[i][j];
       vzi = vzm + (vxd*Loz*byg - vyd*Loz*bxg) + qmt*Epz[i][j];

       /* vn */
       Loz = 1.0/sqrt(1.0 + vav(vxi,vyi,vzi));
       vx[i][j] = Loz*vxi;
       vy[i][j] = Loz*vyi;
       vz[i][j] = Loz*vzi;
     }
```