研究内容紹介

PIC 法 (Particle-In-Cell method)

1. 形状因子の定義

PIC 法でよく用いられる形状因子、一様分布関数 S は次式で定義される。

$$V_p(\boldsymbol{r}_m - \boldsymbol{r}_{i,j,k}) = \int S(\boldsymbol{r}_m - \boldsymbol{r}_{i,j,k})\,\mathrm{d}^3\mathbf{r} \tag{1}$$

$$= \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z}\int_{\boldsymbol{R}} \mathrm{d}^3\mathbf{r} \tag{2}$$

$$= \frac{1}{\Delta x \Delta y \Delta z}\Big[xyz\Big]_{\boldsymbol{R}} \tag{3}$$

ここで、$(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ は各方向の空間刻み幅を表しており、$\Delta x \Delta y \Delta z$ は1セルの体積を意味している。$\mathrm{d}^3\mathbf{r}$ は、$\mathrm{d}^3\mathbf{r} = \mathrm{dxdydz}$ を意味しており、上記の積分は三重積分となる。

(1)　$\boldsymbol{r}_{i,j,k}$ の定義

$\boldsymbol{r}_m$ は m 番目の粒子の位置を表しており、$\boldsymbol{r}_{i,j,k}$ は粒子の位置の近傍格子点 (粒子の所属するセル内において原点に最も近い格子点と定義する) の位置である。例えば、電場 $\boldsymbol{E}$ の格子点における近傍格子点 (i,j,k) は、

- E_xの場合

$$(i,j,k) = \left(\left[\frac{x+\Delta x/2}{\Delta x}\right], \left[\frac{y}{\Delta y}\right], \left[\frac{z}{\Delta z}\right]\right) \tag{4}$$

- E_y の場合

$$(i,j,k) = \left(\left[\frac{x}{\Delta x}\right], \left[\frac{y+\Delta y/2}{\Delta y}\right], \left[\frac{z}{\Delta z}\right]\right) \tag{5}$$

- E_z の場合

$$(i,j,k) = \left(\left[\frac{x}{\Delta x}\right], \left[\frac{y}{\Delta y}\right], \left[\frac{z+\Delta z/2}{\Delta z}\right]\right) \tag{6}$$

から求めることができる。ここで [ ] はガウス記号である。各成分ごとに近傍格子点の計算式が異なるのは、格子点のズレを考慮しているためである。同様にして磁場 $\boldsymbol{B}$ の近傍格子点 (i,j,k) は、

- B_xの場合

$$(i,j,k) = \left(\left[\frac{x}{\Delta x}\right], \left[\frac{y+\Delta y/2}{\Delta y}\right], \left[\frac{z+\Delta z/2}{\Delta z}\right]\right) \tag{7}$$

- B_y の場合

$$(i,j,k) = \left(\left[\frac{x+\Delta x/2}{\Delta x}\right], \left[\frac{y}{\Delta y}\right], \left[\frac{z+\Delta z/2}{\Delta z}\right]\right) \tag{8}$$

- B_z の場合

$$(i,j,k) = \left(\left[\frac{x+\Delta x/2}{\Delta x}\right], \left[\frac{y+\Delta y/2}{\Delta y}\right], \left[\frac{z}{\Delta z}\right]\right) \tag{9}$$

となる。求めた近傍格子点 (i,j,k) より近傍格子点の位置 $\boldsymbol{r}_{i,j,k}$ を求めることができる。電場 $\boldsymbol{E}$ の格子点における近傍格子点の位置 $\boldsymbol{r}_{i,j,k} = (x_{i,j,k}, y_{i,j,k}, z_{i,j,k})$ は以下のようになる。

- E_xの場合

$$\boldsymbol{r}_{i,j,k} = \left(i\Delta x - \frac{\Delta x}{2}, j\Delta y, k\Delta z\right) \tag{10}$$

- E_yの場合

$$\boldsymbol{r}_{i,j,k} = \left(i\Delta x, j\Delta y - \frac{\Delta y}{2}, k\Delta z\right) \tag{11}$$

- E_zの場合

$$\boldsymbol{r}_{i,j,k} = \left(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z - \frac{\Delta z}{2}\right) \tag{12}$$

同様に磁場 $\boldsymbol{B}$ は、

- B_xの場合

$$\boldsymbol{r}_{i,j,k} = \left(i\Delta x, j\Delta y - \frac{\Delta y}{2}, k\Delta z - \frac{\Delta z}{2}\right) \tag{13}$$

- B_yの場合

$$\boldsymbol{r}_{i,j,k} = \left(i\Delta x - \frac{\Delta x}{2}, j\Delta y, k\Delta z - \frac{\Delta z}{2}\right) \tag{14}$$

- B_zの場合

$$\boldsymbol{r}_{i,j,k} = \left(i\Delta x - \frac{\Delta x}{2}, j\Delta y - \frac{\Delta y}{2}, k\Delta z\right) \tag{15}$$

となる。したがって、$\boldsymbol{r}_m - \boldsymbol{r}_{i,j,k}$ は各格子点 $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{J}$ における m 番目の粒子のセル内における位置を意味していることになる。

(2)　積分範囲 $\boldsymbol{R}$

(3) 式における右辺の $\boldsymbol{R}$ は積分範囲を表しており、左辺の p は $p = 1, 2 \cdots 8$ と変化する。p の値に対応した体積比 V_p を Fig.1 に示す。p の値に対応した積分範囲 $\boldsymbol{R}$ は以下のようになる。

Fig. 1　粒子位置 P と格子点によって区切られる体積比 V_p

- $p=1$

$$\boldsymbol{R}=(0\sim x-x_{i,j,k}, 0\sim y-y_{i,j,k}, 0\sim z-z_{i,j,k}) \tag{16}$$

- $p=2$

$$\boldsymbol{R}=(x-x_{i,j,k}\sim \Delta x, 0\sim y-y_{i,j,k}, 0\sim z-z_{i,j,k}) \tag{17}$$

- $p=3$

$$\boldsymbol{R}=(x-x_{i,j,k}\sim \Delta x, y-y_{i,j,k}\sim \Delta y, 0\sim z-z_{i,j,k}) \tag{18}$$

- $p=4$

$$\boldsymbol{R}=(0\sim x-x_{i,j,k}, y-y_{i,j,k}\sim \Delta y, 0\sim z-z_{i,j,k}) \tag{19}$$

- $p=5$

$$\boldsymbol{R}=(0\sim x-x_{i,j,k}, 0\sim y-y_{i,j,k}, z-z_{i,j,k}\sim \Delta z) \tag{20}$$

- $p=6$

$$\boldsymbol{R}=(x-x_{i,j,k}\sim \Delta x, 0\sim y-y_{i,j,k}, z-z_{i,j,k}\sim \Delta z) \tag{21}$$

- $p=7$

$$\boldsymbol{R}=(x-x_{i,j,k}\sim \Delta x, y-y_{i,j,k}\sim \Delta y, z-z_{i,j,k}\sim \Delta z) \tag{22}$$

- $p=8$

$$\boldsymbol{R}=(0\sim x-x_{i,j,k}, y-y_{i,j,k}\sim \Delta y, z-z_{i,j,k}\sim \Delta z) \tag{23}$$

例えば、$V_1(p=1)$ を求めたい場合は (1), (16) 式より次のように計算すればよい。

$$V_1=\frac{1}{\Delta x\Delta y\Delta z}x'\Big|_0^{x-x_{i,j,k}}y'\Big|_0^{y-y_{i,j,k}}z'\Big|_0^{z-z_{i,j,k}} \tag{24}$$

(x,y,z) は粒子の位置、$(x_{i,j,k}, y_{i,j,k}, z_{i,j,k})$ は (10) ～ (15) より求められる。xyz に (') を付けたのは、積分範囲と混同しないためである。もう一例として $V_6(p=6)$ を求めたい場合は

$$V_1=\frac{1}{\Delta x\Delta y\Delta z}x'\Big|_{x-x_{i,j,k}}^{\Delta x}y'\Big|_0^{y-y_{i,j,k}}z'\Big|_{z-z_{i,j,k}}^{\Delta z} \tag{25}$$

となる。

2. 場から粒子へ

これまでの議論を踏まえ、粒子に作用する実効的な電磁場 $\boldsymbol{E}_p, \boldsymbol{B}_p$ を計算する場合を考えよう。計算式は、

$$\boldsymbol{E}_{p_m}^{\ n+1}=\sum_{a=i,b=j,c=k}^{i+1,j+1,k+1}\boldsymbol{E}_{a,b,c}^{n+1}\bar{V}_p(\boldsymbol{r}_m^{n+1}-\boldsymbol{r}_{i,j,k}) \tag{26}$$

$$\boldsymbol{B}_{p_m}^{\ n+1}=\sum_{a=i,b=j,c=k}^{i+1,j+1,k+1}\boldsymbol{B}_{a,b,c}^{n+1}\bar{V}_p(\boldsymbol{r}_m^{n+1}-\boldsymbol{r}_{i,j,k}) \tag{27}$$

である。$\bar{V}_p$ は格子点 (a,b,c) に対して対角上に位置する体積比を意味しており、次のような対応関係にある。

$$(a=i+1, b=j+1, c=k+1)\ \text{then}\ \bar{V}_p=V_1 \tag{28}$$
$$(a=i, b=j+1, c=k+1)\ \text{then}\ \bar{V}_p=V_2 \tag{29}$$
$$(a=i, b=j, c=k+1)\ \text{then}\ \bar{V}_p=V_3 \tag{30}$$
$$(a=i+1, b=j, c=k+1)\ \text{then}\ \bar{V}_p=V_4 \tag{31}$$
$$(a=i+1, b=j+1, c=k)\ \text{then}\ \bar{V}_p=V_5 \tag{32}$$
$$(a=i, b=j+1, c=k)\ \text{then}\ \bar{V}_p=V_6 \tag{33}$$
$$(a=i, b=j, c=k)\ \text{then}\ \bar{V}_p=V_7 \tag{34}$$
$$(a=i+1, b=j, c=k)\ \text{then}\ \bar{V}_p=V_8 \tag{35}$$

Fig.1 より格子点 (a,b,c) に対応した対角上の体積比 V_p になっているのが分かるだろう。以上から、(26) 式について展開すると

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}_{p_m}^{\ n+1}&=\boldsymbol{E}_{i,j,k}^{n+1}V_7\\&+\boldsymbol{E}_{i+1,j,k}^{n+1}V_8\\&+\boldsymbol{E}_{i+1,j+1,k}^{n+1}V_5\\&+\boldsymbol{E}_{i,j+1,k}^{n+1}V_6\\&+\boldsymbol{E}_{i,j,k+1}^{n+1}V_3\\&+\boldsymbol{E}_{i+1,j,k+1}^{n+1}V_4\\&+\boldsymbol{E}_{i+1,j+1,k+1}^{n+1}V_1\\&+\boldsymbol{E}_{i,j+1,k+1}^{n+1}V_2\end{aligned} \tag{36}$$

となる。ここで右辺の (i,j,k) は m 番目の粒子の近傍格子点 (i,j,k) のことである。磁場 $\boldsymbol{B}_p$ についても同

様に

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{B}_{p_m}{}^{n+1} &= \boldsymbol{B}^{n+1}_{i,j,k}\,V_7 \\
&+ \boldsymbol{B}^{n+1}_{i+1,j,k}\,V_8 \\
&+ \boldsymbol{B}^{n+1}_{i+1,j+1,k}\,V_5 \\
&+ \boldsymbol{B}^{n+1}_{i,j+1,k}\,V_6 \\
&+ \boldsymbol{B}^{n+1}_{i,j,k+1}\,V_3 \\
&+ \boldsymbol{B}^{n+1}_{i+1,j,k+1}\,V_4 \\
&+ \boldsymbol{B}^{n+1}_{i+1,j+1,k+1}\,V_1 \\
&+ \boldsymbol{B}^{n+1}_{i,j+1,k+1}\,V_2 \qquad (37)
\end{aligned}
$$

と計算できる。

3. 粒子から場へ

次に電流密度の計算について述べよう。電流密度の計算式は

$$\boldsymbol{J}^{n+1/2}_{a,b,c} = \sum_{l}^{e,i}\sum_{m} q_l\,\boldsymbol{v}^{n+1/2}_{l,m}\,\bar{V}_p(\boldsymbol{r}^{n+1/2}_{l,m} - \boldsymbol{r}_{i,j,k}) \qquad (38)$$

となる。(28) ~ (35) 式の V_p と a, b, c の対応関係式より (38) 式は、次のように展開できる。

$$\boldsymbol{J}^{n+1/2}_{i,j,k} = \sum_{l}^{e,i}\sum_{m} q_l\,\boldsymbol{v}^{n+1/2}_{l,m}\,V_7 \qquad (39)$$

$$\boldsymbol{J}^{n+1/2}_{i+1,j,k} = \sum_{l}^{e,i}\sum_{m} q_l\,\boldsymbol{v}^{n+1/2}_{l,m}\,V_8 \qquad (40)$$

$$\boldsymbol{J}^{n+1/2}_{i+1,j+1,k} = \sum_{l}^{e,i}\sum_{m} q_l\,\boldsymbol{v}^{n+1/2}_{l,m}\,V_5 \qquad (41)$$

$$\boldsymbol{J}^{n+1/2}_{i,j+1,k} = \sum_{l}^{e,i}\sum_{m} q_l\,\boldsymbol{v}^{n+1/2}_{l,m}\,V_6 \qquad (42)$$

$$\boldsymbol{J}^{n+1/2}_{i,j,k+1} = \sum_{l}^{e,i}\sum_{m} q_l\,\boldsymbol{v}^{n+1/2}_{l,m}\,V_3 \qquad (43)$$

$$\boldsymbol{J}^{n+1/2}_{i+1,j,k+1} = \sum_{l}^{e,i}\sum_{m} q_l\,\boldsymbol{v}^{n+1/2}_{l,m}\,V_4 \qquad (44)$$

$$\boldsymbol{J}^{n+1/2}_{i+1,j+1,k+1} = \sum_{l}^{e,i}\sum_{m} q_l\,\boldsymbol{v}^{n+1/2}_{l,m}\,V_1 \qquad (45)$$

$$\boldsymbol{J}^{n+1/2}_{i,j+1,k+1} = \sum_{l}^{e,i}\sum_{m} q_l\,\boldsymbol{v}^{n+1/2}_{l,m}\,V_2 \qquad (46)$$

ここで左辺の (i, j, k) は m 番目の粒子の近傍格子点 (i, j, k) のことである。(39) ~ (46) 式より、粒子の量から場の量である電流密度を決定することができる。