The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	相対論的Vlasov-Fokker-Planck-Maxwell系に対する電荷・運動量・エネルギー完全保存スキームの開発と実証実験
Author(s)	白戸, 高志
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2019, 9, p. 37-40
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/77151
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

相対論的 Vlasov-Fokker-Planck-Maxwell 系に対する電荷・運動量・エネルギー完全保存スキームの開発と実証実験

白戸　高志

大阪大学 レーザー科学研究所 非平衡輻射プラズマ理論グループ

（現：量子科学技術研究開発機構 六ヶ所核融合研究所 プラズマ理論シミュレーショングループ）

1. はじめに

相対論的 Vlasov–Fokker–Planck–Maxwell 系は弱結合プラズマに対する第一原理方程式であり、荷電粒子と電磁場の相互作用を記述する相対論的 Vlasov–Maxwell 系と確率的な衝突過程を記述する相対論的 Fokker–Planck 衝突項により構成される。

$$\frac{\partial f_s}{\partial t}+\frac{\mathbf{u}}{\gamma}\cdot\frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{x}}+\frac{q}{m}\left(\mathbf{E}+\frac{\mathbf{u}\times\mathbf{B}}{\gamma c}\right)\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}}=\left(\frac{\partial f_s}{\partial t}\right)_c,$$

$$\left(\frac{\partial f_s}{\partial t}\right)_c=\frac{\Gamma_{s/s'}}{2}\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}}\cdot\int \mathsf{U}(\mathbf{u},\mathbf{u}')\cdot\left(f_{s'}\frac{\partial f_s}{\partial \mathbf{u}}-\frac{m_s}{m_{s'}}f_s\frac{\partial f_{s'}}{\partial \mathbf{u}'}\right)\mathrm{d}\mathbf{u}',$$

$$\mathsf{U}(\mathbf{u},\mathbf{u}')=\frac{r^2}{\gamma\gamma' w^3}\left[w^2\mathsf{I}-\mathbf{u}\mathbf{u}-\mathbf{u}'\mathbf{u}'+r\left(\mathbf{u}\mathbf{u}'+\mathbf{u}'\mathbf{u}\right)\right],$$

$$\nabla\times\mathbf{B}=\frac{4\pi}{c}\mathbf{J}+\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t},$$

$$\nabla\times\mathbf{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t},$$

ここで、f は分布関数、$\mathbf{u}$ は単位質量あたりの運動量、γ は Lorentz 因子、q は電荷、m は質量、$\mathbf{E}$ は電場、$\mathbf{B}$ は磁束密度、$\mathbf{J}$ は電流密度、Γ は衝突周波数であり、(s,s') はそれぞれの粒子種を表す。また、$r=\gamma\gamma'-\mathbf{u}\cdot\mathbf{u}'/c^2$、$w=c\sqrt{r^2-1}$ である。

しかしながら、数値シミュレーションでこの系を取扱う際には、多くの場合保存則が破られ、物理的に信頼できる議論を行うのが難しくなる。運動論的プラズマの数値計算法は particle-in-cell (PIC) 法と Vlasov シミュレーションに二分されるが、特に相対論領域では Lorentz 因子の非線形性のために保存スキームを構築するのは困難であると考えられてきた。保存則を破るような数値エラーが蓄積されると、雪だるま式に更なる数値エラーの蓄積を招くため、保存則の誤差は一般に線形ではなく指数関数的に増幅する。したがって、非保存スキームでは数値計算の信頼性は瞬く間に損なわれるため、運動論プラズマの長時間シミュレーションを実現する上で完全保存スキームの開発は挑戦的な課題である。先行研究において、PIC 法において運動量とエネルギーを同時に保存するスキームの開発は不可能であるというコンセンサスが得られていることから [1]、本研究では Vlasov シミュレーションにおける完全保存スキーム開発を実施した。本報告書は以下のように構成される。2 章では相対論的 Vlasov–Maxwell 系に対する電荷・運動量・エネルギー完全保存スキームについて、3 章では相対論的 Fokker–Planck 衝突項に対する質量・運動量・エネルギー完全保存スキームについて報告を行う。4 章は本報告の結論である。

2. 相対論的 Vlasov-Maxwell 系

ここでは、相対論的 Vlasov–Maxwell 系に対する完全保存スキームの開発および数値実験について報告を行う。離散方程式を詳細に解説することは紙面の都合上困難であるため、スキーム開発のエッセンスを紹介する。なお、詳細な議論は課題実施期間中に学術誌 Journal of Computational Physics にて出版された我々の論文中で行われているため [2]、そちらを参照されたい。

2.1 完全保存スキーム開発のポイント

系の保存則を議論する際、保存量のうち荷電粒子が担当する部分は下に示すような分布関数のモーメント

$$\int \phi f_s \mathrm{d}\mathbf{u}$$

として与えられる。ここで、ϕ は荷電粒子一つあたりの任意の保存量、すなわち電荷・運動量・エネルギーを表す。この量の時間発展を考えるには Vlasov

方程式に ϕ をかけて運動量空間で積分を行えばよいが、左辺第 3 項で部分積分を行うと電磁場との運動量やエネルギー交換を表す項が得られる。同様のことが電磁場に対しても言える。例えば電磁場のエネルギーの時間発展は

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{|\mathbf{E}|^2+|\mathbf{B}|^2}{8\pi}\right)=\frac{\mathbf{E}}{4\pi}\cdot\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}+\frac{\mathbf{B}}{4\pi}\cdot\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t}$$

と表せるため、Ampere–Maxwell の式と Faraday–Maxwell の式を用いて導出することができる。その際、Vlasov 方程式から出てきた運動量・エネルギー交換項が、ここでは積の微分法則を用いることにより異符号で得られる。したがって、これら運動量・エネルギー交換項が相殺することにより、荷電粒子・電磁場の合算値が不変であることを示すことができる。

ところが、数値シミュレーションでは微分や積分を近似的に表現するため、当然のことながら微分・積分に関する諸公式は一般的に誤差を含むものになる。結果として、荷電粒子が電磁場に受け渡す物理量と、電磁場が荷電粒子から受け取る物理量の間に差異が生じ、行き場を失った運動量やエネルギーがシミュレーションを不安定化する。これを防ぐには、離散化したのちも解析的な関係性を満足する、性質のよい差分演算子を用いる必要がある。本研究では、線形な差分演算子の一つである中心差分、および陰的 Runge–Kutta 法を用いた。例えば積の微分法則は

$$\frac{f^{n+1}-f^n}{h}\frac{g^{n+1}+g^n}{2}+\frac{f^{n+1}+f^n}{2}\frac{g^{n+1}-g^n}{h}$$
$$=\frac{f^{n+1}g^{n+1}-f^ng^n}{h}$$

のように表すことができ、離散化された数学公式と自己無撞着となるように差分スキームを設計することで、保存則を完全に満たすことが可能である。

2.2 相対論的 Weibel 不安定性による数値実験

開発した相対論的 Vlasov–Maxwell 系に対する電荷・運動量・エネルギー保存スキームの妥当性を検証するために、相対論的 Weibel 不安定性による数値実験を行った。Weibel 不安定性は電磁的な不安定性であるため、空間 1 次元、運動量 3 次元で計算格子を配置した。計算対象は水素の完全電離プラズマであり、陽子は等方的、電子は非等方な相対論的 bi-Maxwell 分布により与えた。これに対し、ソレノイダル条件を満足するような磁場の摂動を与えると、線形段階では荷電粒子から磁場に対してエネルギーが指数関数的に輸送される。本研究では、このようなプロセスにおいて保存則が厳密に満足され、物理を正しく記述できるか数値実験を行った。

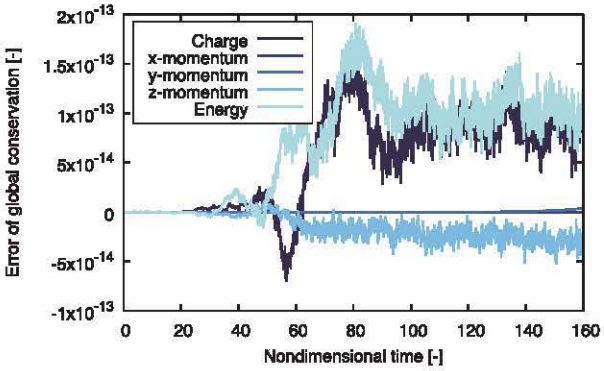


図 1 : 相対論的 Weibel 不安定性計算時の電荷・運動量・エネルギー保存則に関する誤差。

図 1 に示すのは、相対論的 Weibel 不安定性計算時の電荷・運動量・エネルギー保存則に関する誤差である。倍精度の丸め誤差と空間格子点数の積と同程度であることから、電子計算機の限界まで誤差を抑制することに成功した。特に相対論領域において、従来までは運動量保存とエネルギー保存を両立することは困難であると見なされてきたが、その常識を覆す成果である。また、保存則のみならず線形理論による磁場の増幅率も再現しており、物理を正しく記述できることを確認した。

3. 相対論的 Fokker–Planck 衝突項

ここでは、相対論的 Fokker–Planck 衝突項に対する完全保存スキームの開発および数値実験について報告を行う。先ほどと同様に詳細な説明は困難であるため、ポイントを絞って紹介する。なお、詳細な議論はプレプリントサーバーにアップロードした論文中で行われているため、そちらを参照されたい。

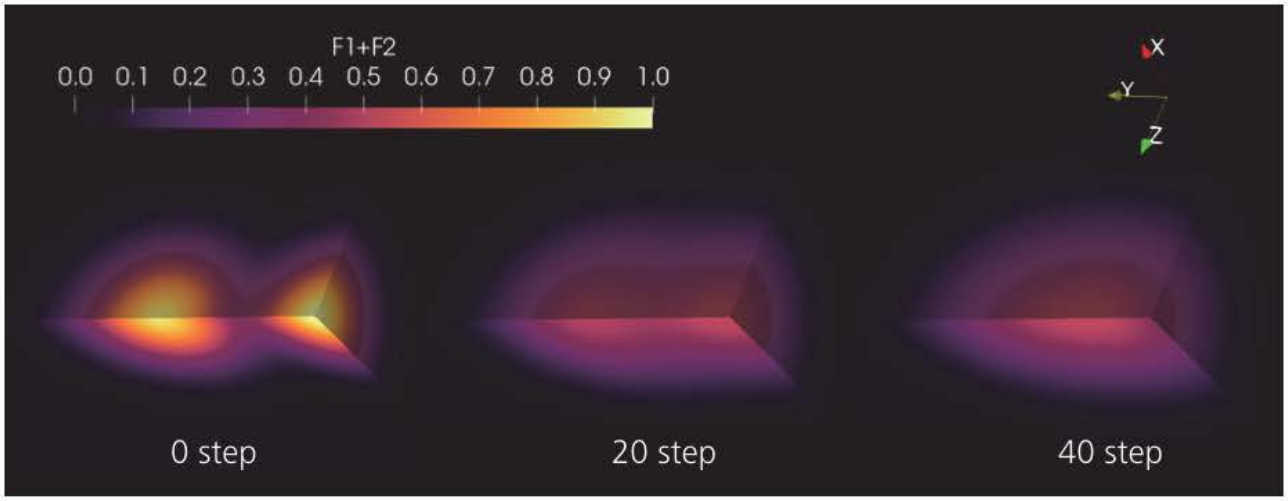


図 2：相対論的熱緩和問題における分布関数の初期条件および時間発展。

この論文は平成31年5月現在学術誌Physical Review Eにて査読中である [3]。

3.1　完全保存スキーム開発のポイント

相対論的 Vlasov–Maxwell 系での議論とは異なり、相対論的 Fokker–Planck 衝突項から保存則を導出する際には時間積分の議論が不要である。その代わりに、散乱カーネル $\mathsf{U}(\mathbf{u},\mathbf{u}')$ に関する以下の数学的な対称性が重要な役割を演じる。

$$\mathsf{U}(\mathbf{u},\mathbf{u}') = \mathsf{U}(\mathbf{u}',\mathbf{u}),$$
$$\mathsf{U}(\mathbf{u},\mathbf{u}')\cdot\mathbf{u}/\gamma = \mathsf{U}(\mathbf{u}',\mathbf{u})\cdot\mathbf{u}'/\gamma'.$$

保存則は先ほどと同様に分布関数のモーメントであり、運動量やエネルギーをかけた上で部分積分を行う。一つ目の条件は運動量保存則、二つ目はエネルギー保存則を導出する際に必要である。

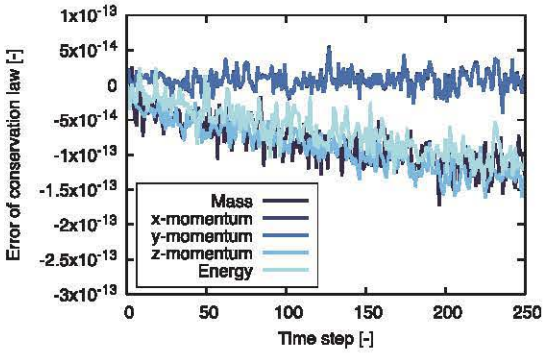
数値計算ではエネルギーの運動量差分という形で $\mathbf{u}/\gamma$ が得られるため、打ち切り誤差が含まれる。そのため、エネルギー保存に関する等号は一般に成立しない。本研究では、差分演算による打ち切り誤差が含まれた $\mathbf{u}/\gamma$ や $\mathbf{u}'/\gamma'$ を用いて散乱カーネルを計算することにより、数値エラーが含まれていたとしても運動量やエネルギー保存が厳密に成り立つように構造保存スキームを構築した。

3.2　相対論的熱緩和問題による数値実験

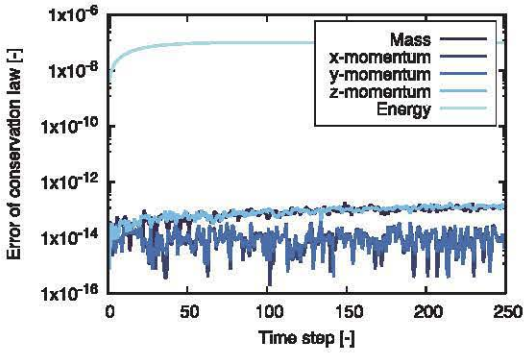
開発した相対論的 Landau–Fokker–Planck 方程式に対する質量・運動量・エネルギー保存スキームの妥当性を検証するために、相対論的な熱緩和問題による数値実験を行った。ここでは空間 0 次元、運動量 3 次元で計算を行った。先ほどの数値実験と比較して空間の次元が落ちているが、Landau–Fokker–Planck 方程式は積分微分方程式であるため、実際の計算負荷はむしろ大幅に増加している。初期条件は図 2 の 0 ステップ目に示すような、異なる平均速度の初期平衡に従う電子・陽電子プラズマである。また、線形理論との比較のために異種粒子衝突のみを考慮した。

図 2 は分布関数の時間発展であり、初期に異なる平衡状態にあった電子・陽電子プラズマが同一の平衡状態を目指して緩和していることがわかる。また、図 3 に構造保存スキームと従来型スキームの保存特性に関する比較を示す。従来型は質量と運動量を厳密に保存する一方、エネルギー保存は丸め誤差よりはるかに大きなオーダーの誤差を示す。それに対して構造保存スキームは、これまで困難であると考えられてきた運動量保存とエネルギー保存を両立していることがわかる。したがって、相対論的 Fokker–Planck 衝突項に対する完全保存スキームの原理実証に成功した。今回は比較的小さな時間刻み幅を採用しているので、図 4 に示すようにエントロピーは単

調増加している。しかしながら、本手法は Boltzmann の H 定理を厳密に満たすものではないため、今後さらなる発展が望まれる。



(a) 構造保存スキーム



(b) 従来型スキーム

図 3 : 相対論的熱緩和問題における質量・運動量・エネルギー保存則の誤差。

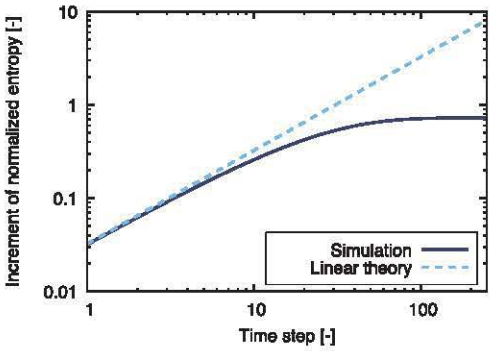


図 4 : 相対論的熱緩和問題におけるエントロピーの時間発展。

4. おわりに

本研究では、相対論的 Vlasov–Fokker–Planck–Maxwell 系に対する電荷・運動量・エネルギー保存シミュレーションの実現を目指し、数値スキーム開発と実証実験を行った。計算コストの都合上、相対論的 Vlasov–Maxwell 系と相対論的 Fokker–Planck 衝突項に分けて議論を行ったが、両者を結合すれば当初の目的は達成される。異なる方程式系に対して、微分積分学の数学公式を離散化レベルで満足する構造保存戦略を用いることで、全ての保存則を満足するという共通の目的を達成することができた。

ただし、今回開発した Fokker–Planck 衝突項に対するスキームは積分微分方程式を直接計算するものであり、最良の場合でも計算量は未知変数の数の自乗に比例する。現実的な運動論プラズマの数値計算のためには、これを 1 乗に比例させる必要がある。幸いにも、Rosenbluth のポテンシャル形式を導入すると積分微分方程式を複数の微分方程式により表現できるため [4]、この要請を満足できるであろう。また、相対論的 Fokker–Planck 衝突項では時間積分に関する議論を行わなかったが、保存則ではなく Boltzmann の H 定理を議論するためには必要なものである。今後は、より現実的な計算コストでより物理的に正しい計算を実施するため、さらなる計算物理的研究を推進する予定である。

参考文献

(1) G. Chen and L. Chacon, Comput. Phys. Commun. **197**, 73-87, (2015).

(2) T. Shiroto et al., J. Comput. Phys. **379**, 32-50, (2019).

(3) T. Shiroto and Y. Sentoku, arXiv 1902.07866 (2019).

(4) M.N. Rosenbluth et al., Phys. Rev. **107**, 1-6, (1957).