線形移流方程式・無衝突ボルツマン方程式の数値解法

宇宙磁気流体・プラズマシミュレーションサマーセミナー

2017年8月21日　@千葉大学

筑波大学 計算科学研究センター

吉川 耕司

目次

- Boltzmann方程式・Vlasov方程式
- Vlasovシミュレーション
- 1次元線形移流方程式の数値解法
- 多次元線形移流方程式の数値解法
- Vlasov-Poisson シミュレーション（自己重力系・静電プラズマ系）

Boltzmann 方程式

$f(\vec{x}, \vec{p}, t)d\vec{x}d\vec{p}$: 位相空間内の体積要素内の粒子数

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{d\boldsymbol{x}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}} + \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} =$$

$$\int\int\int \underbrace{(f' f'_1 - f f_1)\sigma(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_1 | \boldsymbol{p}', \boldsymbol{p}'_1) d\boldsymbol{p}_1 d\boldsymbol{p}' d\boldsymbol{p}'_1}$$

運動量 p と p_1 の粒子が衝突して、p' と p'_1 の運動量を持つ粒子になる反応

$\sigma(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_1 | \boldsymbol{p}', \boldsymbol{p}'_1) d\boldsymbol{p}' d\boldsymbol{p}'_1$: 反応の頻度

$$f' \equiv f(p') \quad f_1 \equiv f(p_1) \quad f'_1 \equiv f(p'_1)$$

▶ 衝突項を0にしたのが Vlasov方程式

無衝突系の物質はVlasov方程式に従う

BoltzmannのH定理

$$H(t) = \int\int f \ln f \, d\vec{x} d\vec{p}$$ BoltzmannのH関数 (エントロピーの逆符号)

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{1}{4}\int\int\int\int (f' f_1' - f f_1)(\ln(f' f_1') - \ln(f f_1)) d\vec{p}' d\vec{p}_1' d\vec{p}_1 d\vec{p}$$

これから常に、$\frac{dH}{dt} \leq 0$ 非可逆過程

Hが一定（エントロピーが最大）になるのは、全領域で

$$f' f_1' = f f_1$$ 分布関数 f がMaxwell分布

Boltzmann方程式とモーメント方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\boldsymbol{p}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}} + \boldsymbol{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = \left(\frac{\delta f}{\delta t} \right)_{\mathrm{c}}$$

- Boltzmann方程式の速度モーメントをとる
  - 0次のモーメント

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\bar{\boldsymbol{v}}) = 0 \qquad m\bar{\boldsymbol{v}} = \frac{\int \boldsymbol{p} f d\boldsymbol{p}}{\int f d\boldsymbol{p}}$$

  - 1次のモーメント

$$nm\left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial t} + \bar{\boldsymbol{v}} \cdot \nabla \bar{v}_i \right) = -\frac{\partial \bar{P}_{ij}}{\partial x_j} + n\bar{F}_i + R_i$$

$$\bar{P}_{ij} = nm\langle (v_i - \bar{v}_i)(v_j - \bar{v}_j) \rangle$$

- n次のモーメントの時間発展には (n+1)次のモーメントが必要

方程式を閉じさせるには closure relation が必要　（例：状態方程式、拡散近似）

決まった closure relation が無い場合にはモーメント方程式は使えない

Vlasov シミュレーション

- 自己重力系（銀河・銀河団・宇宙大規模構造）・磁気プラズマを対象
- 重力N体シミュレーションやPICシミュレーションといった粒子シミュレーション
  - 位相空間上の物質分布をモンテカルロ的に粒子でサンプリングして計算
  - 必然的に物理量にショットノイズが入る
  - 分布関数のテイル部分が重要な役割を果たす運動論的な不安定性を正確に扱えない
  - PICシミュレーションでは、電磁場を解く最小スケールがDebye長に固定される

  ⇒ マクロなMHDスケールでの数値シミュレーションは困難

- 粒子シミュレーションの代わりにVlasov方程式 (無衝突ボルツマン方程式)を直接数値シミュレーション

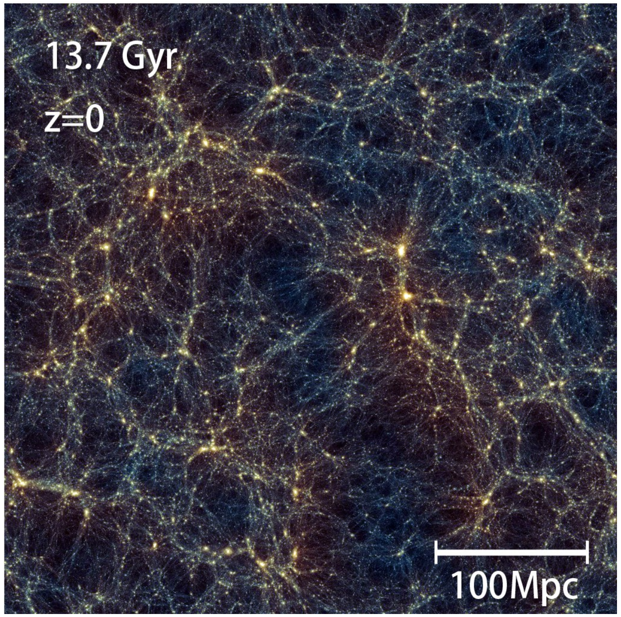
$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{d\boldsymbol{x}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{x}} + \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{p}} = 0$$

$f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, t)$: 6次元位相空間上の分布関数

Vlasov-Poisson 方程式系

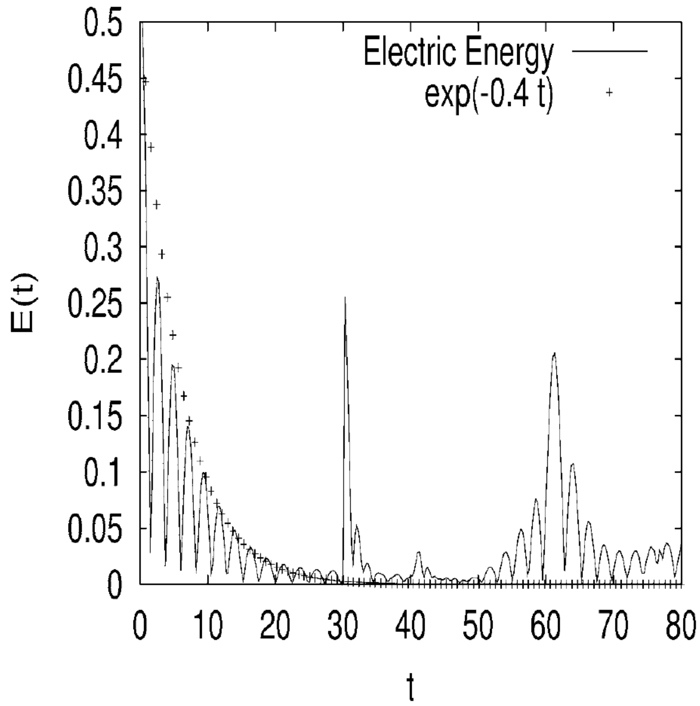
$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v}\cdot\frac{\partial f}{\partial \vec{x}} - \nabla\phi\cdot\frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = 0$$

$$\nabla^2\phi = 4\pi G\rho = 4\pi G\int f d^3\vec{v}$$



- 自己重力系
  - 銀河、銀河団、宇宙大規模構造
  - 宇宙大規模構造におけるニュートリノの無衝突減衰
- 静電プラズマ
  - Landau 減衰
  - two-stream instability
  - plasma echo
- 6次元位相空間での数値シミュレーション

Yoshikawa, Yoshida, Umemura (2013)

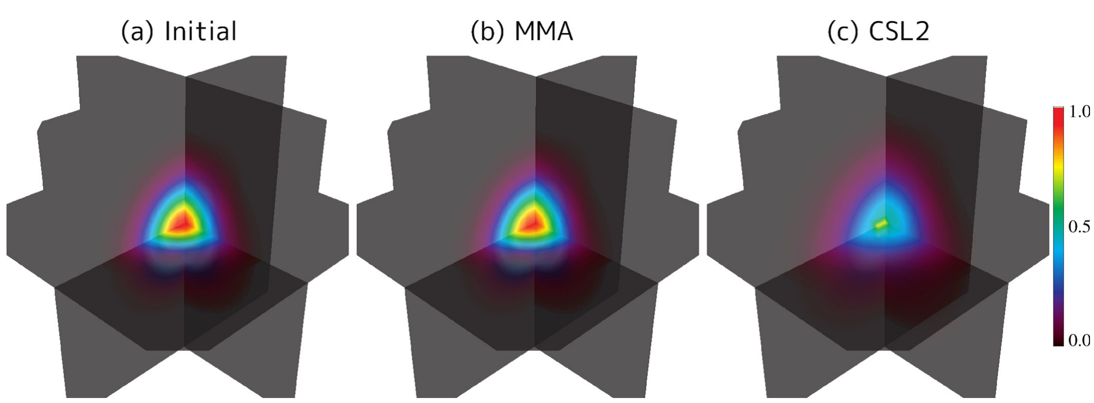


Vlasov-Maxwell 方程式系

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{v} \cdot \nabla f + \frac{q}{m}(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}} = 0$$

$$\begin{cases} \nabla \times \boldsymbol{E} = -\dfrac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \boldsymbol{B} - \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} = \mu_0 \boldsymbol{J} = \mu_0 \displaystyle\int q\boldsymbol{v} f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}, t) d^3\boldsymbol{v} \end{cases}$$

- 磁気プラズマ、無衝突衝撃波
- イオンと電子の分布関数を解く
- 磁場による荷電粒子のジャイロ運動を正確に扱うのが困難



Multi-Moment Advection scheme

Minoshima, Matsumoto, Amano 2011, 2013, 2015

線形移流方程式の数値解法

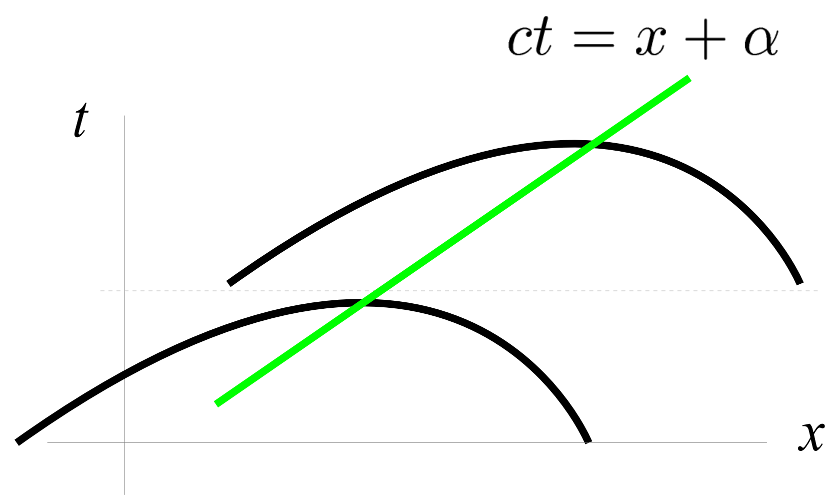
- 双曲型偏微分方程式の数値解法の基礎を理解
- Vlasovシミュレーションの数値解法

線形移流方程式

- 1次元

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} + c\frac{\partial f(x,t)}{\partial x} = 0$$

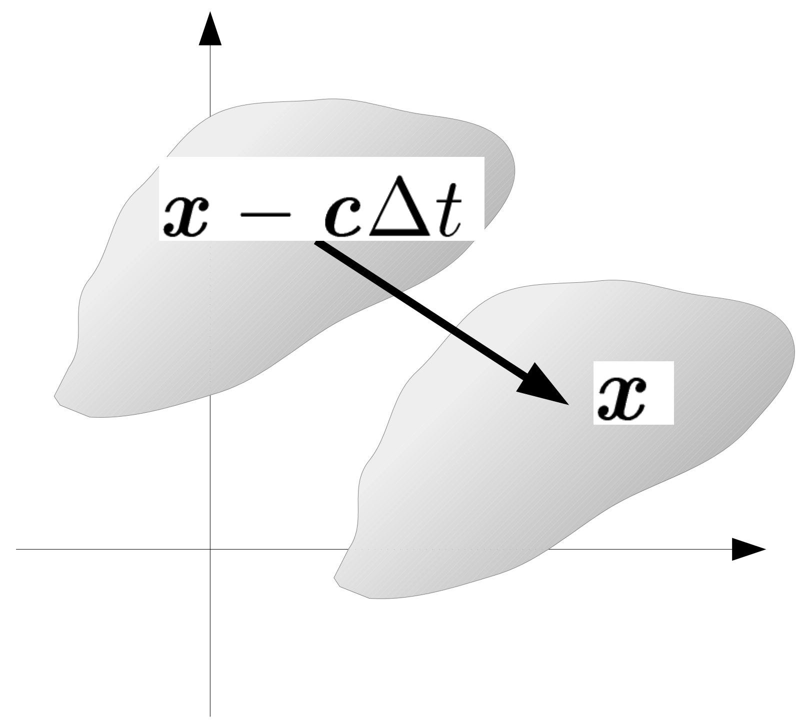
解析解： $f(x,t) = F(x - ct)$



- 多次元

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} + \boldsymbol{c}\cdot\frac{\partial f(\boldsymbol{x},t)}{\partial \boldsymbol{x}} = 0$$

解析解： $f(\boldsymbol{x},t) = F(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{c}t)$



偏微分の差分化

前進差分

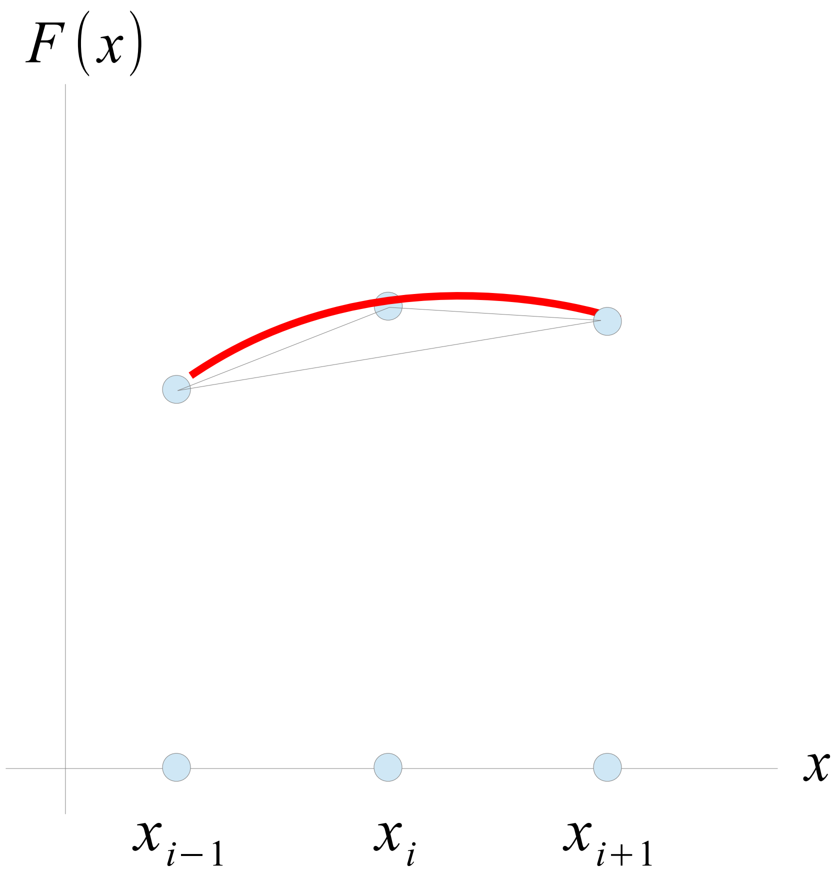
$$\left.\frac{\partial F}{\partial x}\right|_{x=x_i} \simeq \frac{F_{i+1} - F_i}{\Delta x}$$

後退差分

$$\left.\frac{\partial F}{\partial x}\right|_{x=x_i} \simeq \frac{F_i - F_{i-1}}{\Delta x}$$

中心差分

$$\left.\frac{\partial F}{\partial x}\right|_{x=x_i} \simeq \frac{F_{i+1} - F_{i-1}}{2\Delta x}$$



線形波動方程式の数値解法

- **FTCS (Forward in Time and Central Differential in Space) スキーム**

$$\frac{f_i^{n+1}-f_i^n}{\Delta t}+c\frac{f_{i+1}^n-f_{i-1}^n}{2\Delta x}=0 \quad \Rightarrow \quad f_i^{n+1}=f_i^n-\frac{\nu}{2}(f_{i+1}^n-f_{i-1}^n)$$

- **Lax スキーム**

$$f_i^{n+1}=\frac{f_{i+1}^n+f_{i-1}^n}{2}-\frac{\nu}{2}(f_{i+1}^n-f_{i-1}^n)$$

Courant パラメータ ：$\nu\equiv\dfrac{c\Delta t}{\Delta x}$

- **1次風上差分 スキーム**

$$f_i^{n+1}=f_i^n-\nu(f_i^n-f_{i-1}^n) \qquad (\nu>0)$$

$$f_i^{n+1}=f_i^n-\nu(f_{i+1}^n-f_i^n) \qquad (\nu<0)$$

線形波動方程式の数値解法

- **Lax-Wendroff スキーム**　時間に関して２次精度のスキーム

$$f_i^{n+1} = f_i^n + \left.\frac{\partial f}{\partial t}\right|_{x=x_i}^{t=t^n} \Delta t + \frac{1}{2}\left.\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}\right|_{x=x_i}^{t=t^n} \Delta t^2 + O(\Delta t^3)$$

$$= f_i^n - c\left.\frac{\partial f}{\partial x}\right|_{x=x_i}^{t=t^n} \Delta t + \frac{c^2}{2}\left.\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right|_{x=x_i}^{t=t^n} \Delta t^2 + O(\Delta t^3)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -c\frac{\partial f}{\partial x}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = c^2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$$

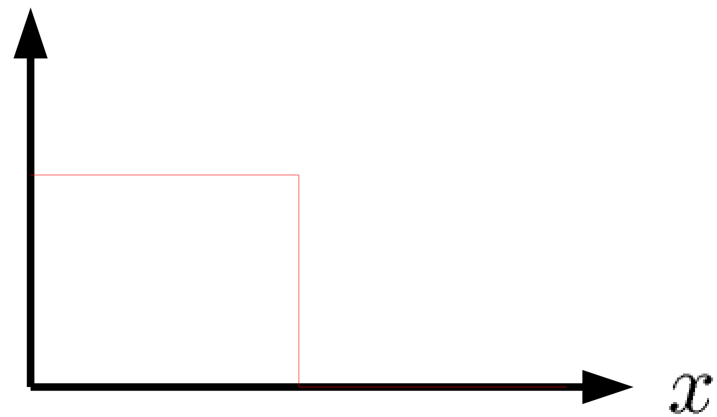
これを差分化して、

$$f_i^{n+1} = f_i^n - \frac{\nu}{2}(f_{i+1}^n - f_{i-1}^n) + \frac{\nu^2}{2}(f_{i+1}^n - 2f_i^n + f_{i-1}^n)$$

テスト問題

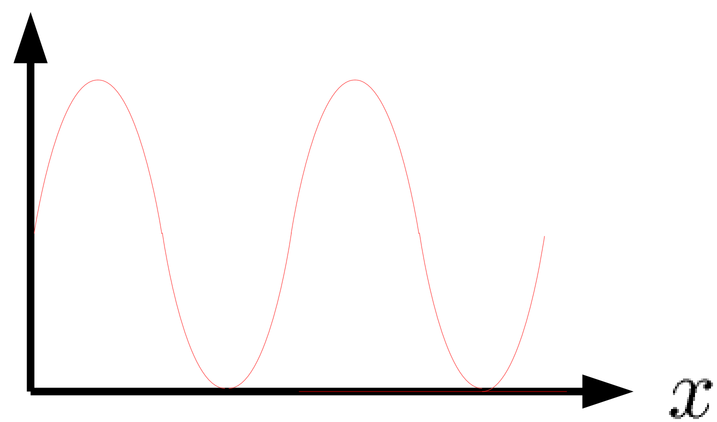
- これらのスキームを用いて矩形波の移流を数値的に解いてみる

計算領域：0 < x < 1 で周期境界条件



初期条件

$$
\begin{cases}
f(x) = 1 & (x < 0.5) \\
f(x) = 0 & (x > 0.5)
\end{cases}
$$

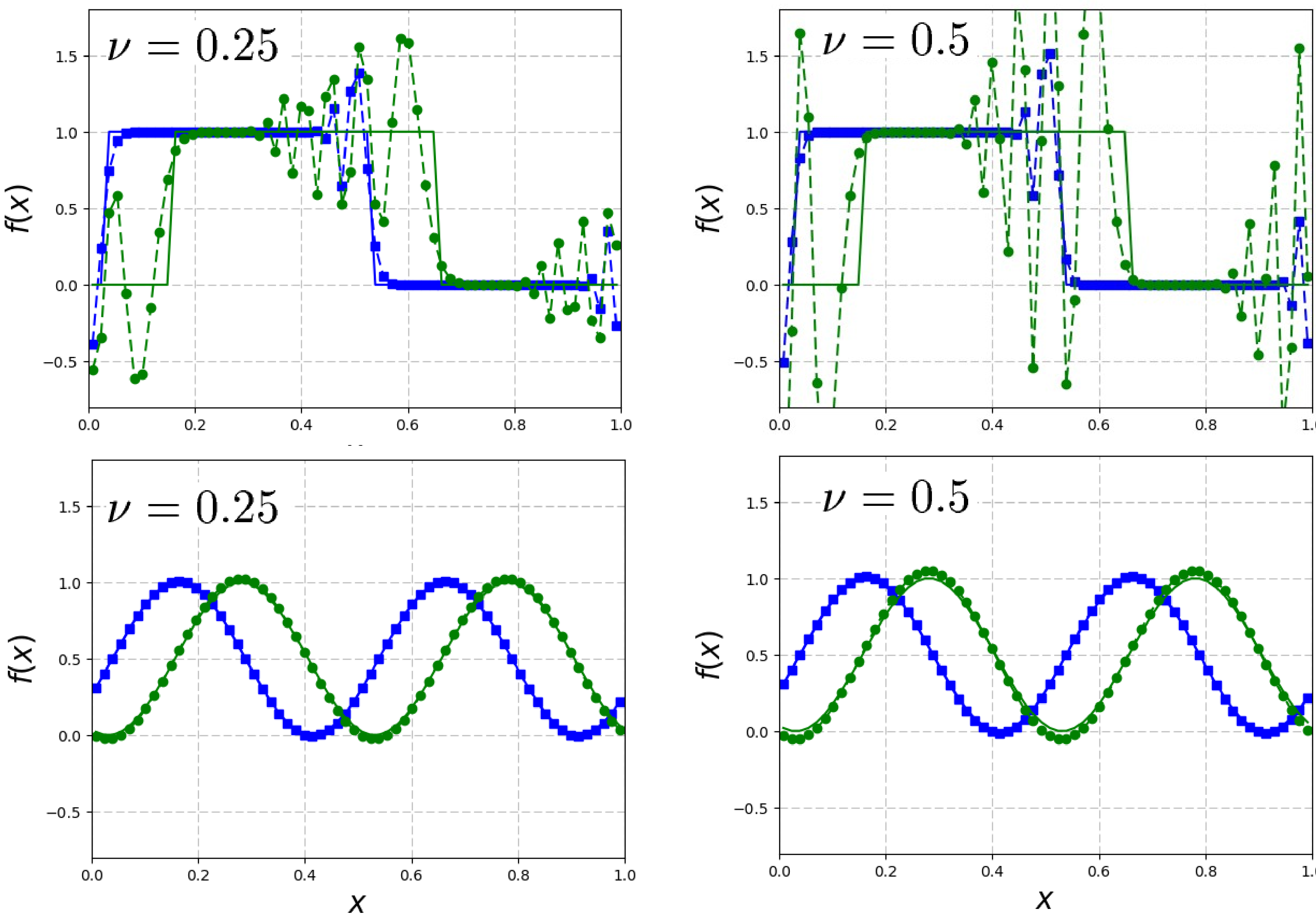


初期条件

$$f(x) = \frac{1}{2}(1 + \sin(2\pi x))$$

線形波動方程式 (FTCS)

- **FTCSスキーム**



von Neumannの安定性解析

解を次のようにフーリエ分解する $f_i^n = \sum_k g_k^n \exp(2\pi k J i \Delta x)$ 但し、J は虚数単位

解析解が満たすべき条件：$f_i^{n+1} = f_{i-\nu}^n$ ⇒ $g_k^{n+1} = g_k^n \exp(2\pi k J \nu \Delta x)$

⇒ $|g_k^{n+1}| = |g_k^n|$

これをFTCSスキームに代入：

$$g_k^{n+1} = g_k^n - \frac{\nu}{2} g_k^n [\exp(2\pi k J \Delta x) - \exp(-2\pi k J \Delta x)]$$

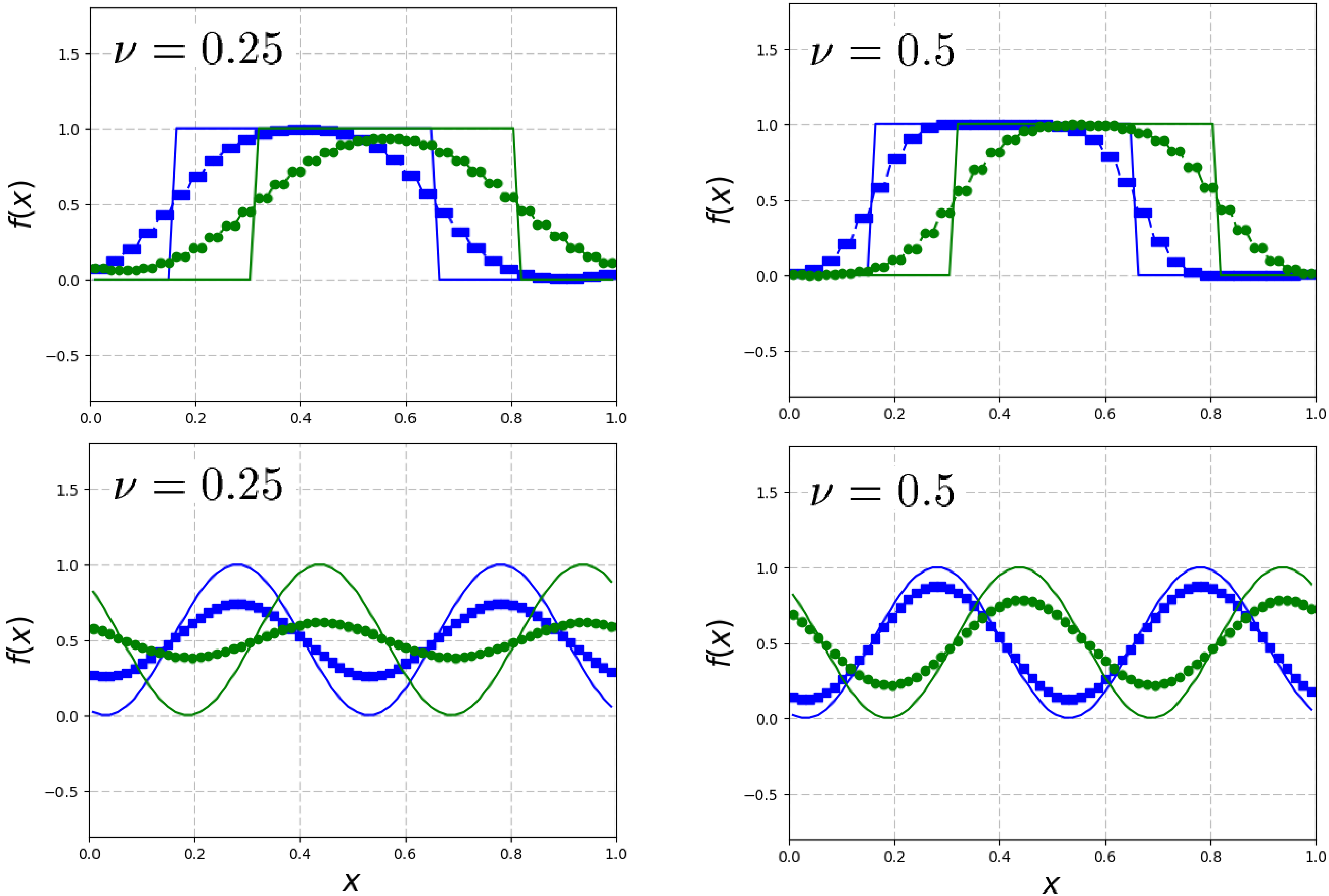
⇒ $$g_k^{n+1} = g_k^n (1 + J\nu \sin(2\pi k \Delta x))$$

$$|g_k^{n+1}| = |g_k^n| \sqrt{1 + \nu^2 \sin^2(2\pi k \Delta x)}$$

あらゆる、ν と k について、波は増幅される

線形波動方程式 (Lax)

- Laxスキーム

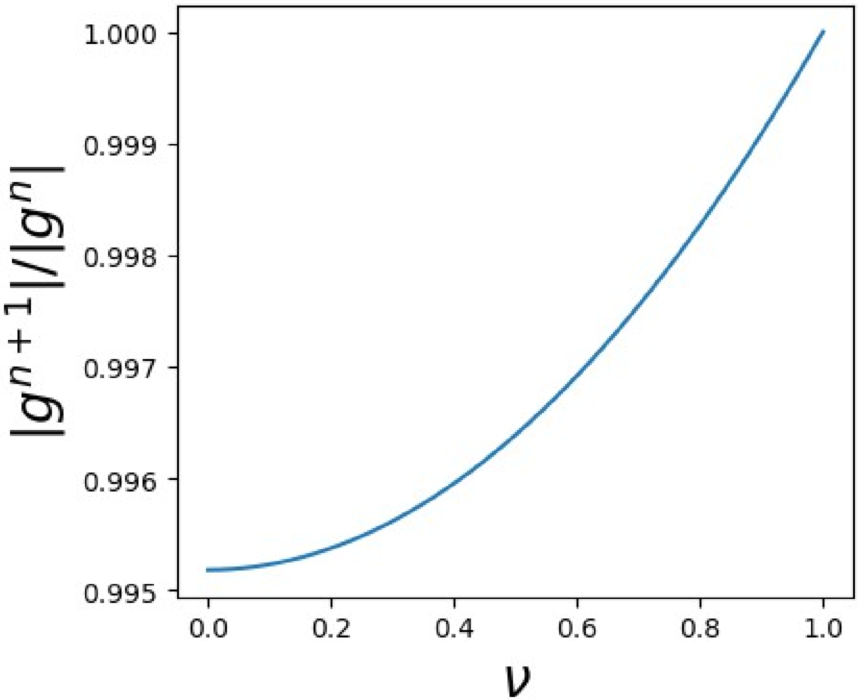


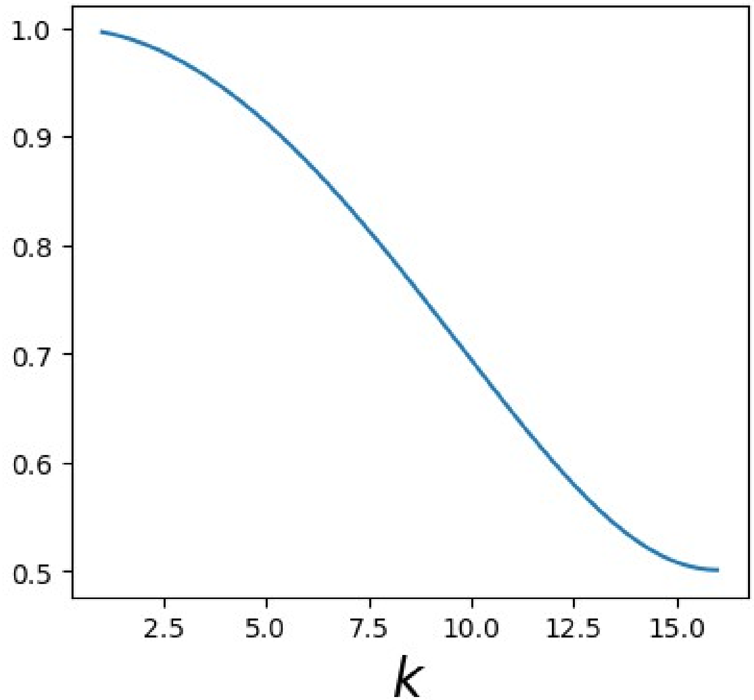
Laxスキームの安定性解析

- Laxスキームの場合

$$|g_k^{n+1}| = |g_k^n|\sqrt{\cos^2(2\pi k\Delta x) + \nu^2 \sin^2(2\pi k\Delta x)}$$

$\nu < 1$ であれば常に波は減衰する



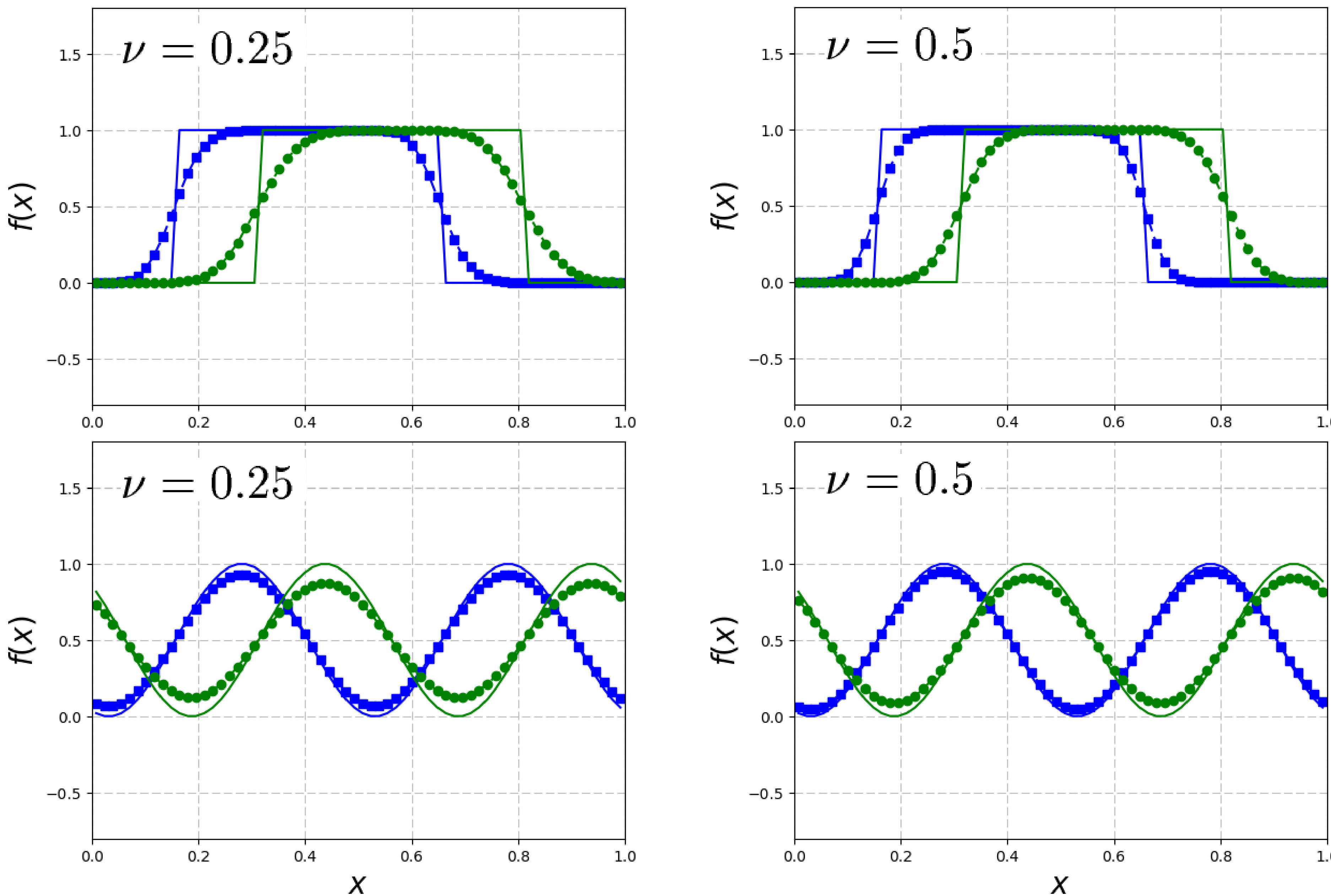


- k の大きいところで減衰が強い

→ 短波長の波が選択的に減衰する

線形波動方程式 (1次風上差分)

- 風上差分スキーム

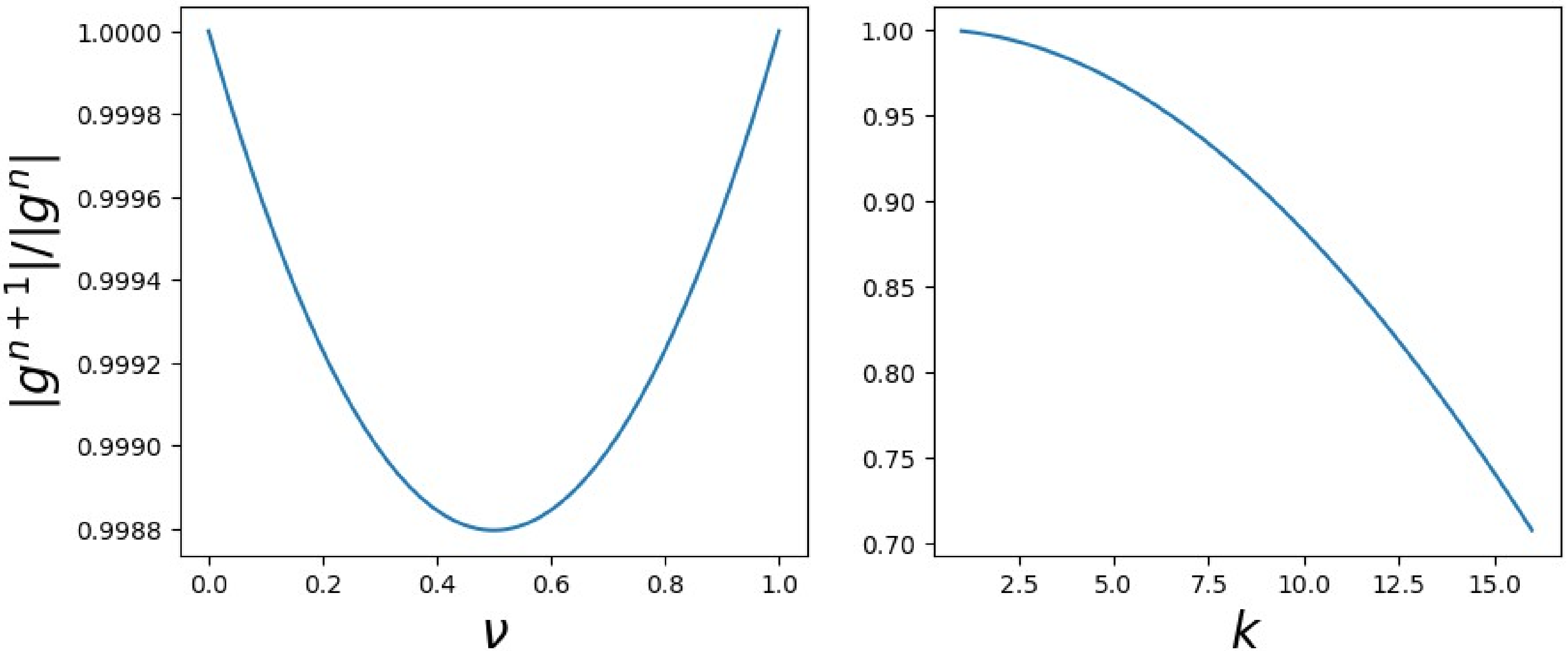


1次風上差分スキームの安定性解析

▶ 1次風上差分スキームの場合

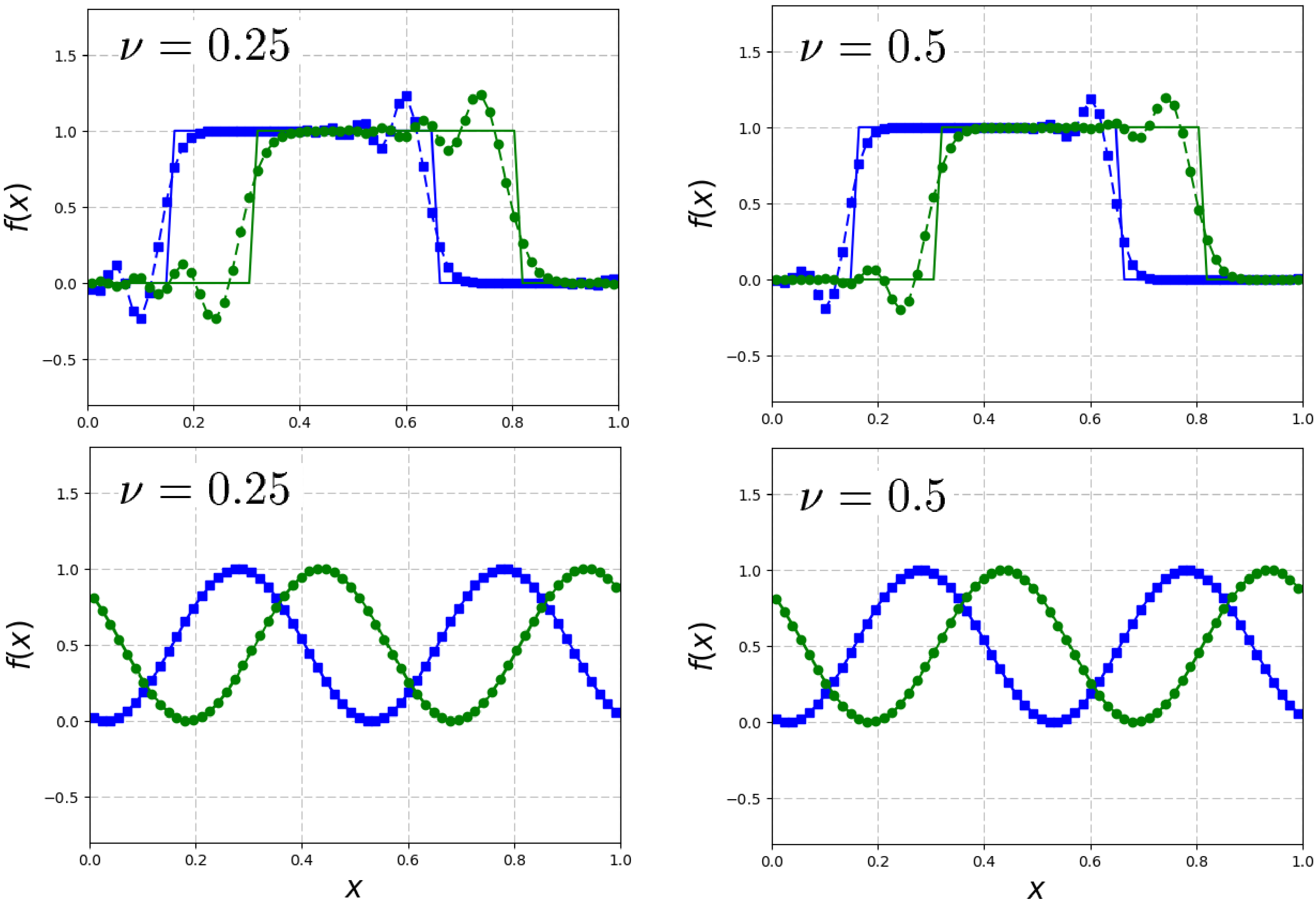
$$|g_k^{n+1}| = |g_k^n|\sqrt{(1-\nu(1-\cos(2\pi k\Delta x)))^2 + \nu^2\sin^2(2\pi k\Delta x)}$$

$\nu < 1$ であれば常に波は減衰する　　ν= 0.5 で最小



線形波動方程式 (Lax-Wendroff)

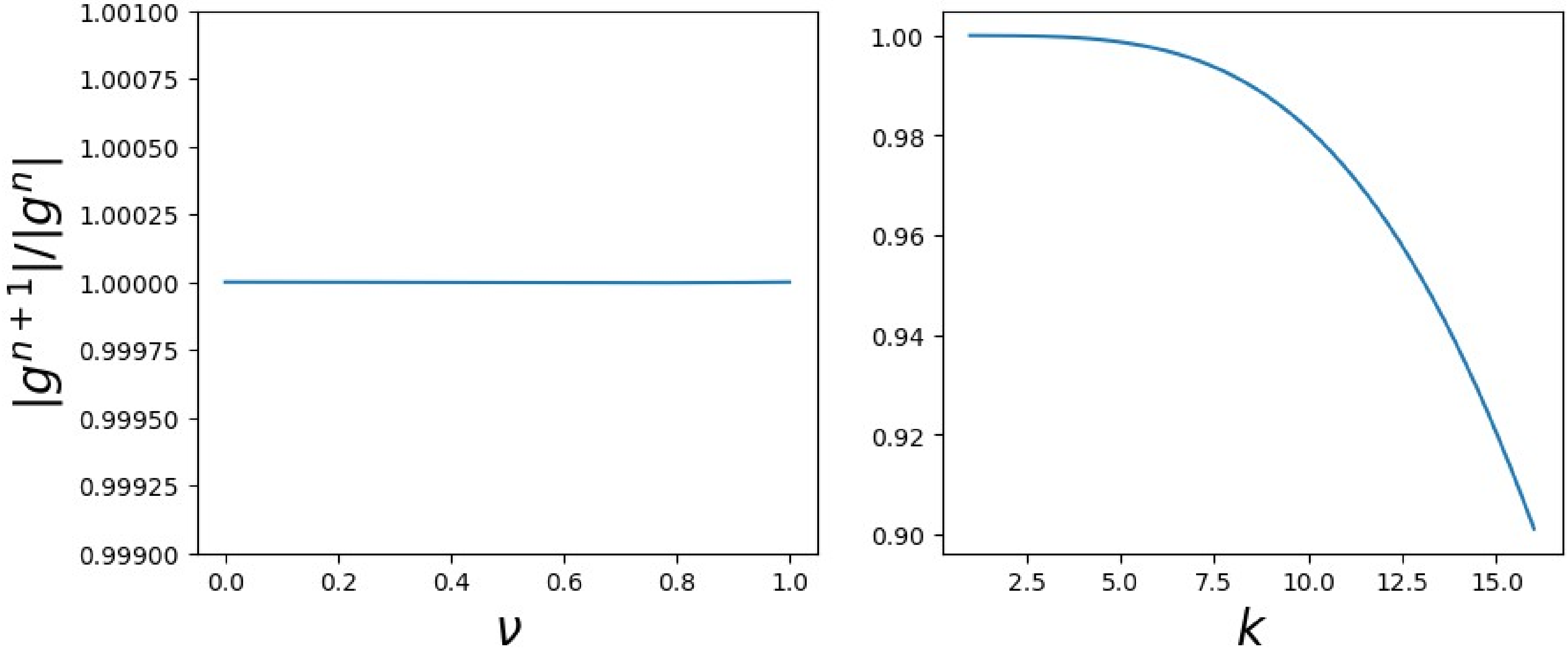
- **Lax-Wendroff スキーム**



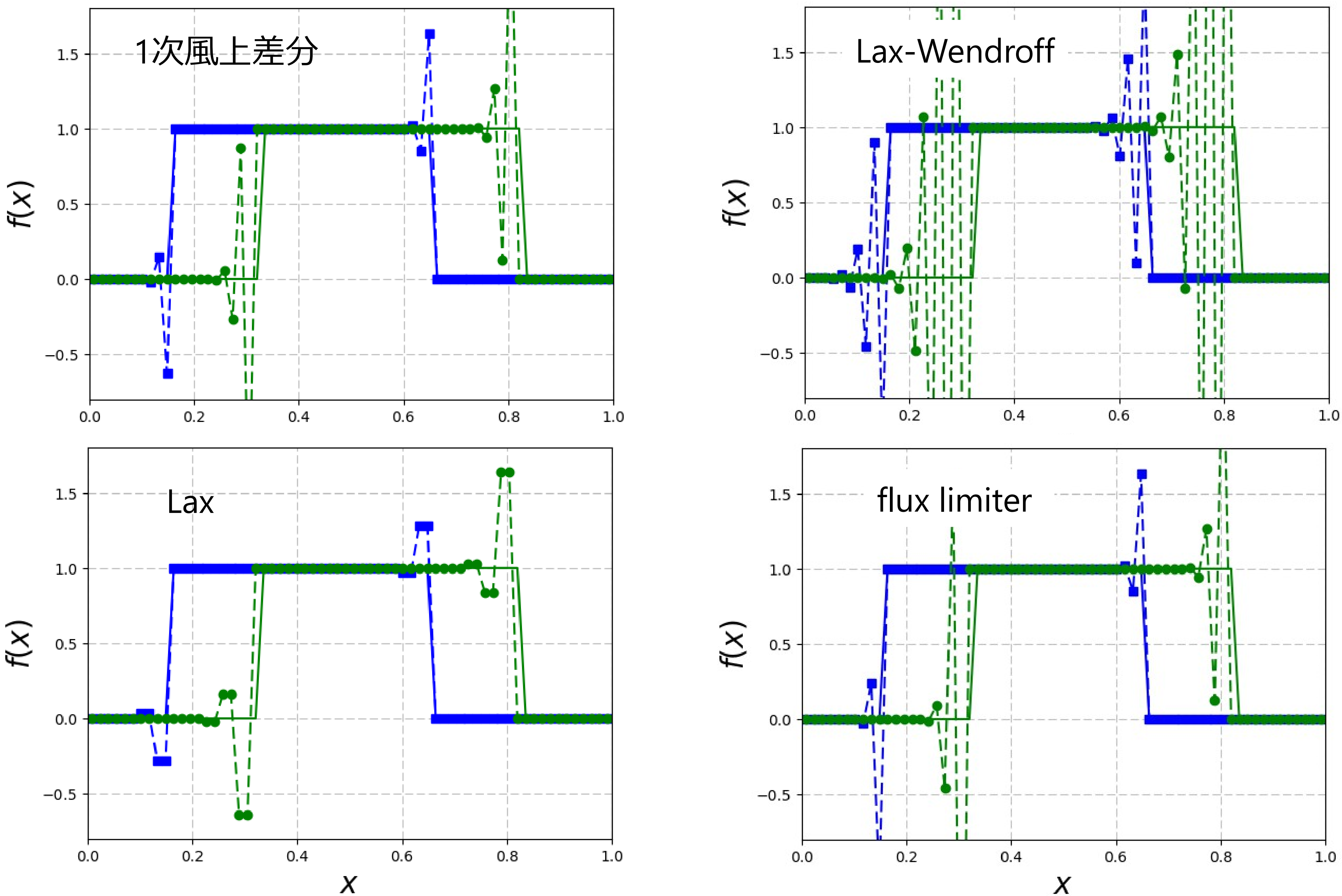
Lax-Wendroffスキームの安定性解析

- Lax-Wendroffスキームの場合

$$|g_k^{n+1}| = |g_k^n|\sqrt{1-\nu^2(1-\nu^2)(1-\cos(2\pi k\Delta x))^2}$$



線形波動方程式 (ν=1.05の場合)



CFL 条件

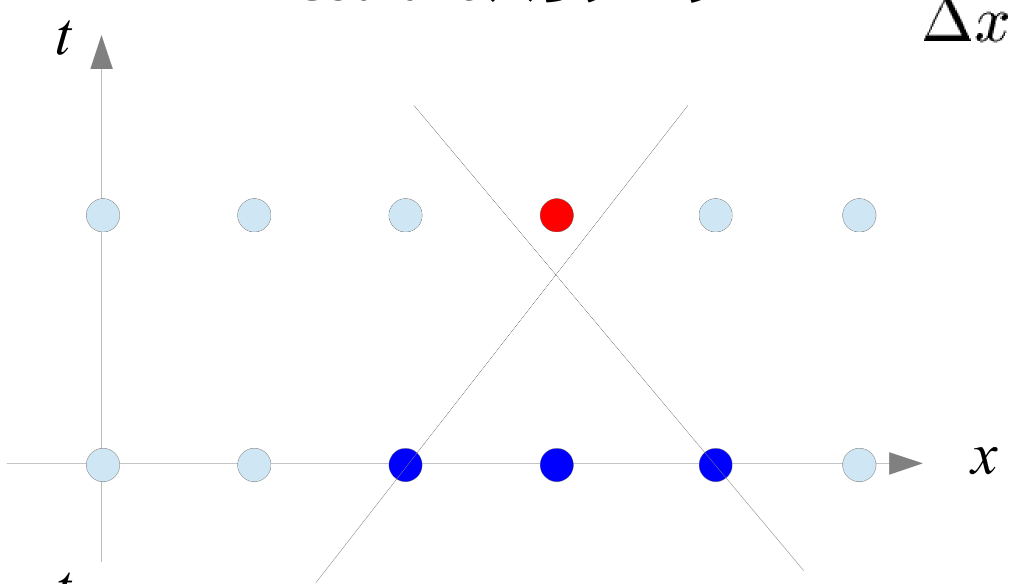
$\boldsymbol{\nu}$ の値によって数値解の振る舞いが大きく変わるのはなぜか？

Courant パラメータ： $\nu \equiv \dfrac{c\Delta t}{\Delta x}$

$\nu > 1$の場合

f_i^{n+1} が　f_{i-1}^n　と　f_{i+1}^n

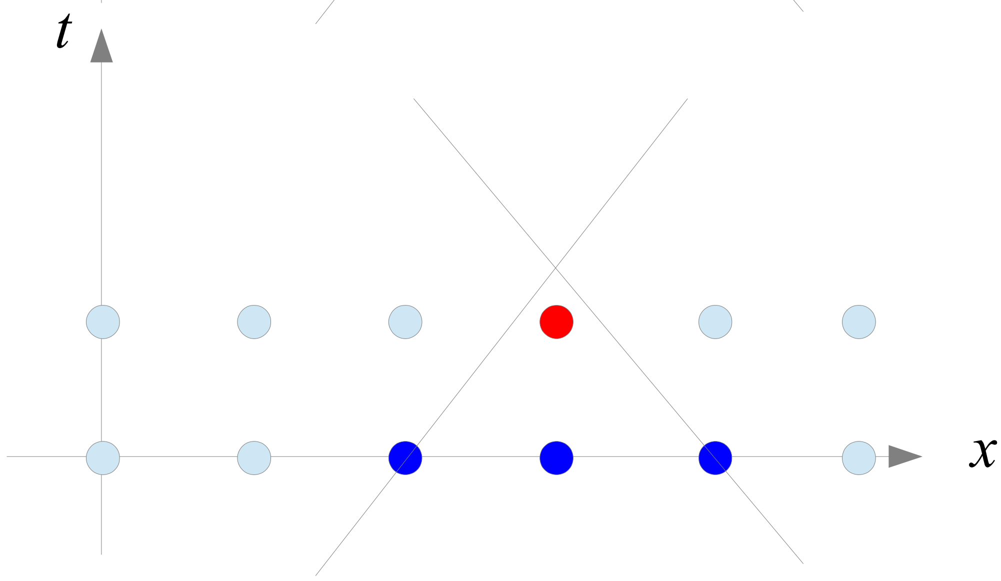
から伸びる特性線の範囲外にある



$\nu \leq 1$ の場合

f_i^{n+1} が　f_{i-1}^n　と　f_{i+1}^n

から伸びる特性線の範囲内にある

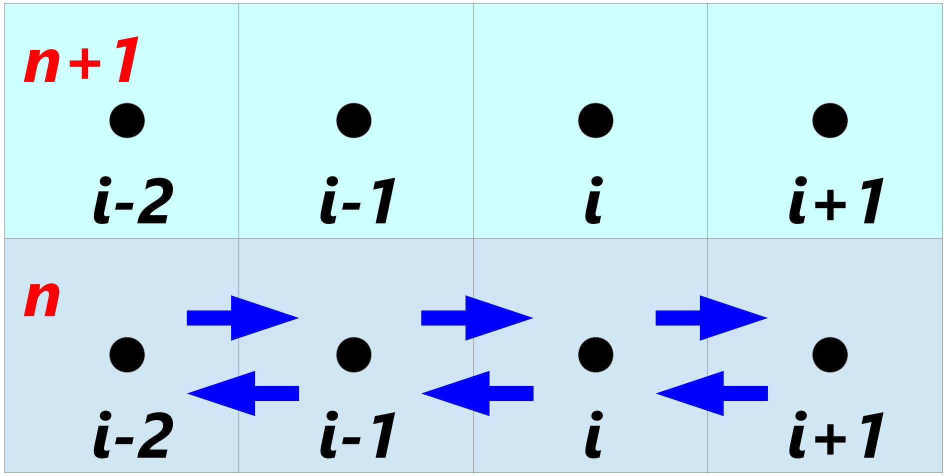


数値流速

保存型の双曲型偏微分方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0$$

$\dfrac{\partial F}{\partial x}$ の項はグリッドの境界で定義されるべき



- グリッド境界での値で離散化

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} + \frac{\tilde{F}^n_{i+1/2} - \tilde{F}^n_{i-1/2}}{\Delta x} = 0$$

$\tilde{F}^n_{i\pm 1/2}$ を **数値流速** という

様々な種類のスキームは、結局のところ**数値流速をグリッド中心で定義されている物理量を使ってどのように決めるか**が本質的。

数値流束

▶FTCSスキーム

$$\tilde{F}_{i\pm1/2} = \frac{c}{2}(f_i + f_{i\pm1})$$

▶Laxスキーム

$$\tilde{F}_{i+1/2} = c\left(\frac{1-1/\nu}{2}f_{i+1} + \frac{1+1/\nu}{2}f_i\right)$$

$$\tilde{F}_{i-1/2} = c\left(\frac{1-1/\nu}{2}f_i + \frac{1+1/\nu}{2}f_{i-1}\right)$$

▶Lax-Wendroff スキーム

$$\tilde{F}_{i+1/2} = c\left(\frac{1-\nu}{2}f_{i+1} + \frac{1+\nu}{2}f_i\right)$$

$$\tilde{F}_{i-1/2} = c\left(\frac{1-\nu}{2}f_i + \frac{1+\nu}{2}f_{i-1}\right)$$

▶1次風上差分 スキーム

$$\tilde{F}_{i+1/2} = \frac{1}{2}\left[c(f_{i+1} + f_i) - |c|(f_{i+1} - f_i)\right]$$

$$\tilde{F}_{i-1/2} = \frac{1}{2}\left[c(f_i + f_{i-1}) - |c|(f_i - f_{i-1})\right]$$

高次精度化

高次精度化と単調性

これまで見てきた結果から、

1次精度のスキーム : 数値振動は起きない(解の単調性は保存される)が、波が減衰する。

2次精度のスキーム : 波の減衰は抑制されるが、数値振動が起きる。(単調性が維持できない)

2次精度で数値振動を起こさないスキームはないのか？

Godunovの定理

「2次以上の精度を持つ如何なる線形スキームも解の単調性を維持できない。」

⇒ FTCSスキームやLax-Wendroffスキームは必ず振動する。

なるべく空間2次精度を保ちながら、
不連続面では1次精度になるようなスキームが必要

TVD 条件

単調性を維持するには、

- 空間において新たな極値が発生しない
- 初期条件における極小値が減少せず、極大値が増加しない

ことが要請される。

⇕

全変動(Total Variation) $TV(f^n) = \sum_i |f^n_{i+1} - f^n_i|$ が

$TV(f^{n+1}) \leq TV(f^n)$ Total Variation Diminishing (TVD) 条件

を満たすことが、単調性を維持するための十分条件

TVD 条件を満たすスキームの作り方

- 流束制限関数
- MUSCL法

流束制限関数 (Flux Limiter)

Lax-Wendroffスキーム (空間2次精度)

$$\tilde{F}_{i+1/2} = c\left[f_i + \frac{1}{2}(1-\nu)(f_{i+1} - f_i)\right]$$

1次風上差分スキーム (空間1次精度)

$$\tilde{F}_{i+1/2} = cf_i \qquad\qquad c > 0$$

を組み合わせたスキームを考える

流束制限関数

$$\tilde{F}_{i+1/2} = c\left[f_i + \frac{1}{2}(1-\nu)\boxed{B_{i+1/2}}(f_{i+1} - f_i)\right]$$

という数値流速を考える

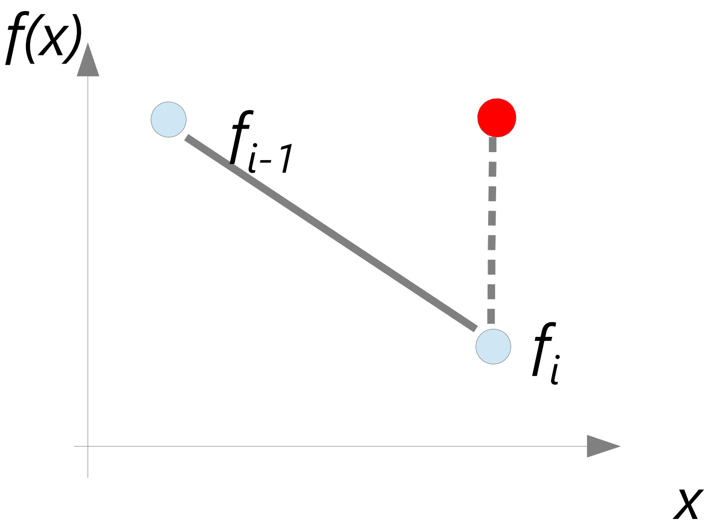
この数値流速を

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} + \frac{\tilde{F}^n_{i+1/2} - \tilde{F}^n_{i-1/2}}{\Delta x} = 0$$

に代入する。

流束制限関数 (Flux Limiter)

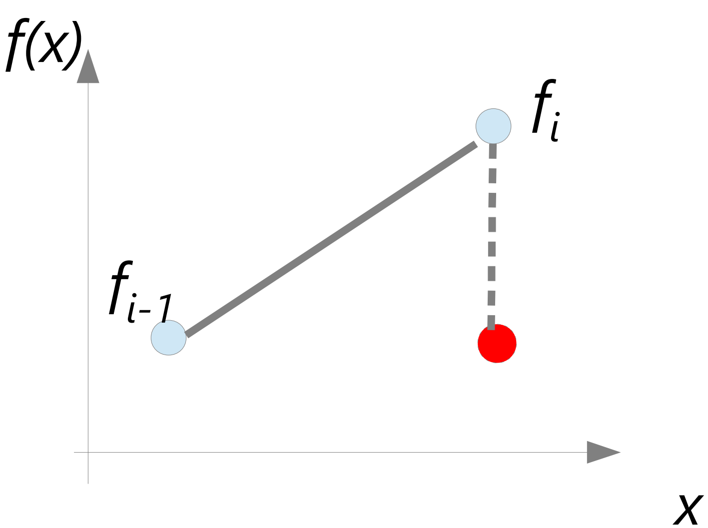
$$\frac{f_i^{n+1}-f_i^n}{f_{i-1}^n-f_i^n}=\nu\left[1-\frac{1}{2}(1-\nu)B_{i-1/2}\right]+\frac{1}{2}\nu(1-\nu)\frac{B_{i+1/2}}{r_i}$$ 但し、$r_i \equiv \dfrac{f_i^n-f_{i-1}^n}{f_{i+1}^n-f_i^n}$



単調性を維持するためには左辺が

$$0 \le \frac{f_i^{n+1}-f_i^n}{f_{i-1}^n-f_i^n} \le 1$$

を満たせば良い。

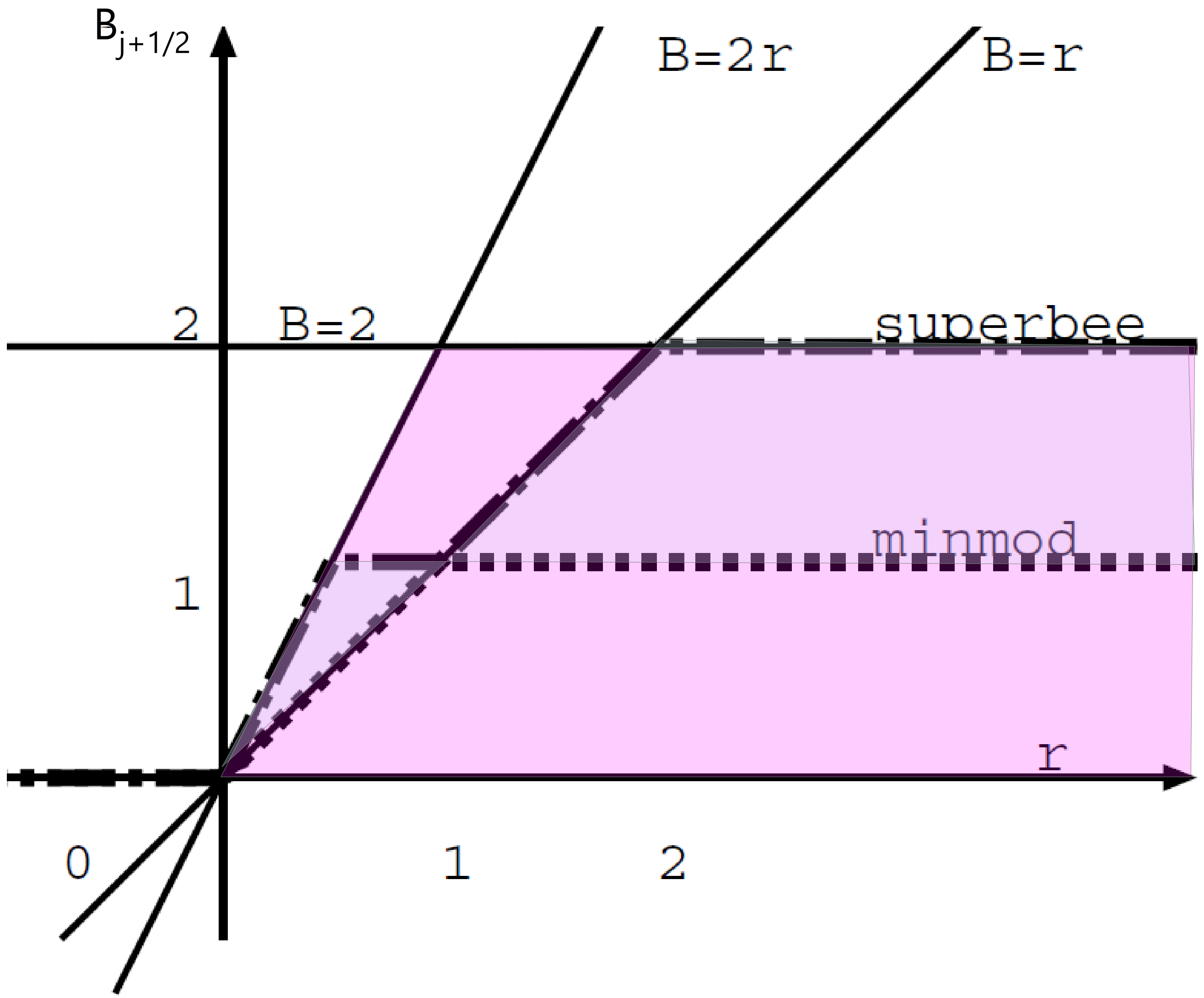


そのためには

$$0 \le B_{i+1/2} \le 2 \qquad 0 \le \frac{B_{i+1/2}}{r_i} \le 2$$

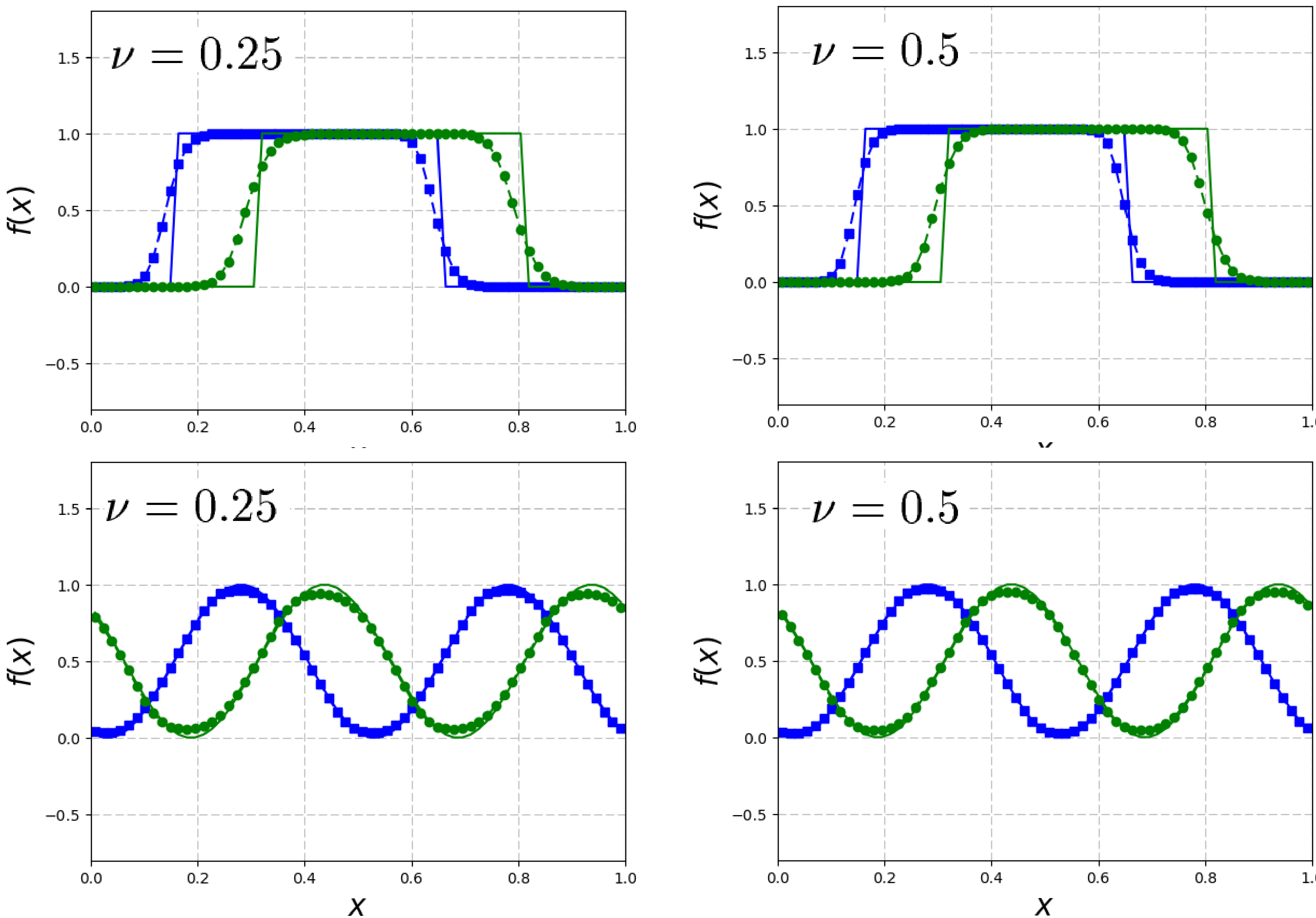
を満たすことが十分条件

流束制限関数



スキームが2次精度であるための条件：superbee とminmod の間

線形波動方程式(Flux Limiter)



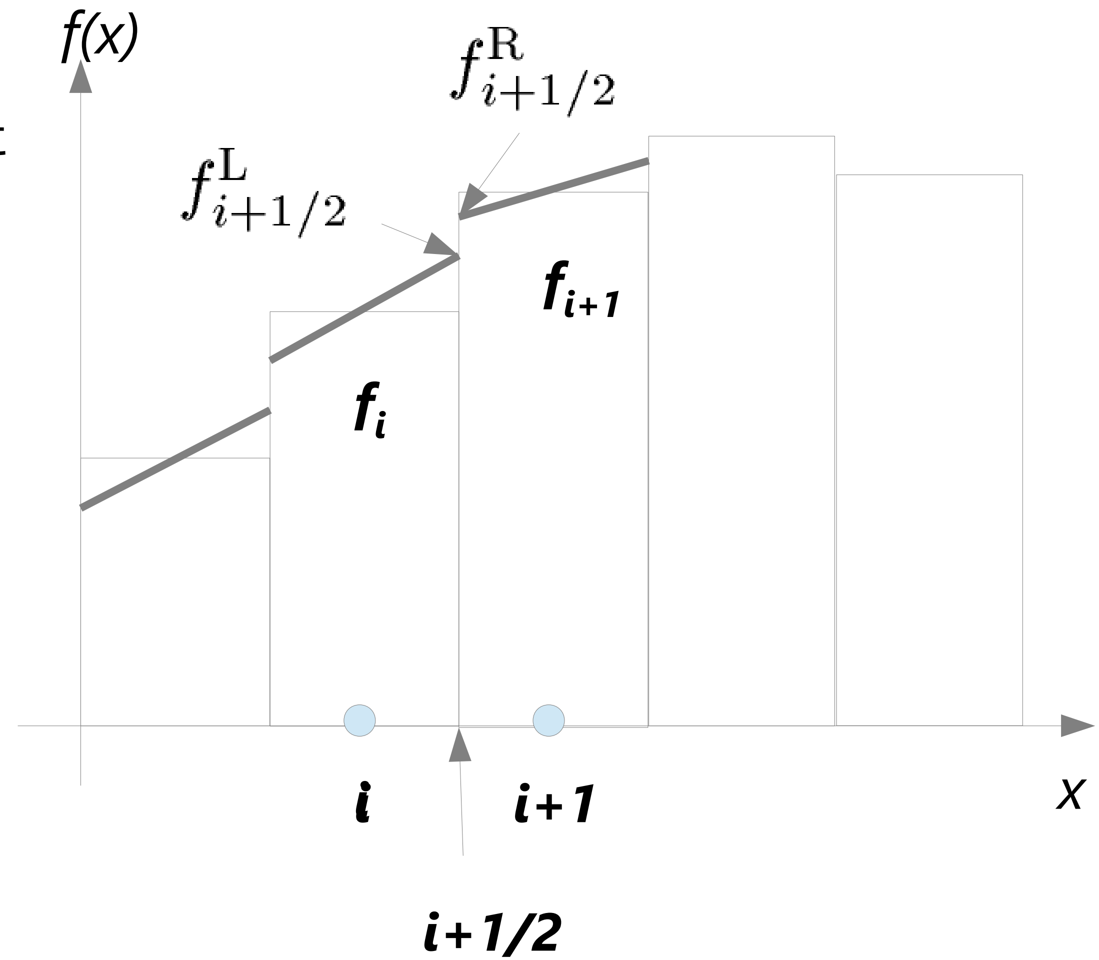
(minmod flux limiter の場合)

MUSCL法

(Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws)

別の高精度化の手法として、グリッド上の物理量を高次補間する方法

1次精度ではグリッド内の物理量分布は一定としたが、図のように線形または2次近似する



得られた $f^{\mathrm{L}}_{i+1/2}$ や $f^{\mathrm{R}}_{i+1/2}$ を数値流速 $\tilde{F}_{i+1/2}$ の f_i や f_{i+1} のかわりに代入する

MUSCL法

- i 番目のメッシュ区間　$x_{i-1/2} \leq x \leq x_{i+1/2}$　で

$$f(x) = f_i + \frac{1}{\Delta x}(x - x_i)\delta_i(f) + \frac{3\kappa}{2(\Delta x)^2}\left[(x - x_i)^2 - \frac{(\Delta x)^2}{12}\right]\delta_i^2(f)$$

という関数形を仮定する。

但し、$\delta_i(f) = (f_{i+1} - f_{i-1})/2 \qquad \delta_i^2(f) = f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}$

$$\frac{1}{\Delta x}\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(x)dx = f_i \qquad \frac{1}{\Delta x}\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f'(x)dx = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x}$$

- グリッド境界での物理量は

$$f_{i+1/2}^{\mathrm{L}} = f_i + \frac{1}{4}\left[(1-\kappa)\Delta_i^- + (1+\kappa)\Delta_i^+\right]$$

$$f_{i+1/2}^{\mathrm{R}} = f_{i+1} - \frac{1}{4}\left[(1-\kappa)\Delta_{i+1}^+ + (1+\kappa)\Delta_{i+1}^-\right]$$

$$\Delta_i^+(f) = f_{i+1} - f_i \qquad \Delta_i^-(f) = f_i - f_{i-1}$$

MUSCL法

$$f^{\mathrm{L}}_{i+1/2} = f_i + \frac{1}{4}\left[(1-\kappa)\Delta^{-}_{i} + (1+\kappa)\Delta^{+}_{i}\right]$$

$$f^{\mathrm{R}}_{i+1/2} = f_{i+1} - \frac{1}{4}\left[(1-\kappa)\Delta^{+}_{i+1} + (1+\kappa)\Delta^{-}_{i+1}\right]$$

$$\Delta^{+}_{i}(f) = f_{i+1} - f_i \qquad \Delta^{-}_{i}(f) = f_i - f_{i-1}$$

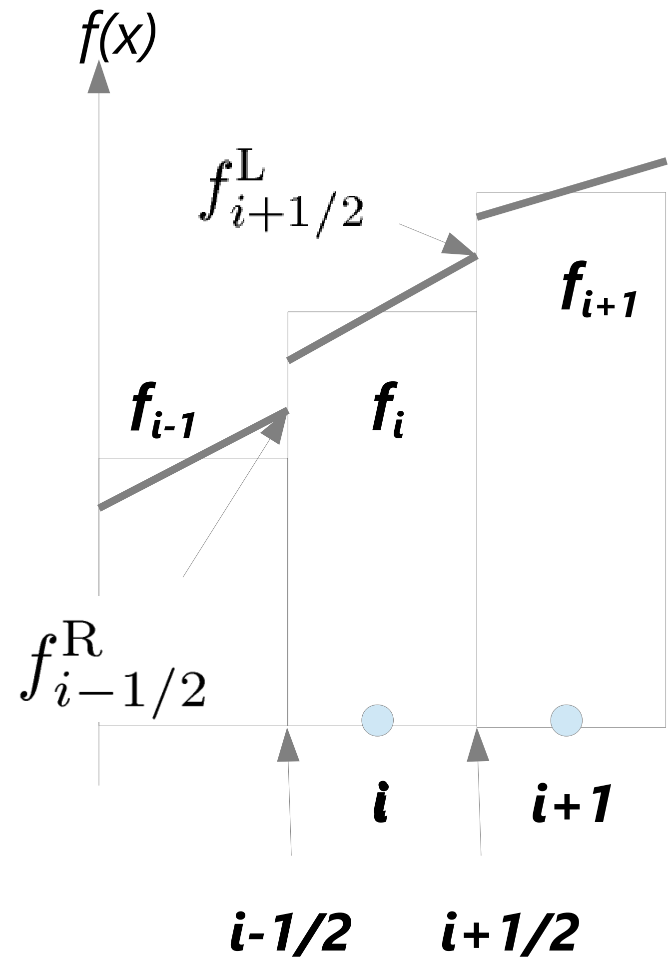
$\kappa = -1$ ：2次の完全風上差分

$\kappa = 0$ ：2次のバイアス風上差分

$\kappa = 1/3$ ：3次のバイアス風上差分

$\kappa = 1$ ：隣接メッシュ値の平均

MUSCL法



- $f_{i-1} \le f_i \le f_{i+1}$ の場合

$$f_{i+1} - f^{\mathrm{L}}_{i+1/2} = \frac{3-\kappa}{4}(f_{i+1} - f_i) - \frac{1-\kappa}{4}(f_i - f_{i-1})$$

$$f^{\mathrm{R}}_{i-1/2} - f_{i-1} = \frac{3-\kappa}{4}(f_i - f_{i-1}) - \frac{1-\kappa}{4}(f_{i+1} - f_i)$$

なので $\kappa < 1$ の場合

$f_{i+1} < f^{\mathrm{L}}_{i+1/2}$ や $f^{\mathrm{R}}_{i-1/2} < f_{i-1}$ となる可能性

があり単調性を保証できない。

- 制限関数の導入

$$f^{\mathrm{L}}_{i+1/2} = f_i + \frac{1-\kappa}{4}\Phi(r_i)\Delta^-_i + \frac{1+\kappa}{4}\Phi(1/r_i)\Delta^+_i$$

$$f^{\mathrm{R}}_{i-1/2} = f_i - \frac{1-\kappa}{4}\Phi(1/r_i)\Delta^+_i - \frac{1+\kappa}{4}\Phi(r_i)\Delta^-_i \qquad r_i \equiv \frac{\Delta^-_i}{\Delta^+_i}$$

MUSCL法

$$f^{\mathrm{L}}_{i+1/2} = f_i + \left[\frac{1-\kappa}{4} r_i \Phi(r_i) + \frac{1+\kappa}{4}\Phi(1/r_i)\right]\Delta_i^+$$

$$f^{\mathrm{R}}_{i-1/2} = f_i - \left[\frac{1-\kappa}{4} \frac{\Phi(1/r_i)}{r_i} + \frac{1+\kappa}{4}\Phi(r_i)\right]\Delta_i^-$$

ここで、 $\Psi(r) = \dfrac{1-\kappa}{2}\Phi(r)r + \dfrac{1+\kappa}{2}\Phi(1/r)$ とおくと

$$f^{\mathrm{L}}_{i+1/2} = f_i + \frac{1}{2}\Psi(r_i)\Delta_i^+$$

$$f^{\mathrm{R}}_{i-1/2} = f_i - \frac{1}{2}\Psi(1/r_i)\Delta_i^-$$

以前の流束制限関数と同じ手法でTVD性を満たす制限関数を構築できる。

MUSCL法

▶ 以前の流束制限関数と同様にTVD性を満たすように制限関数を定めてやることができる。

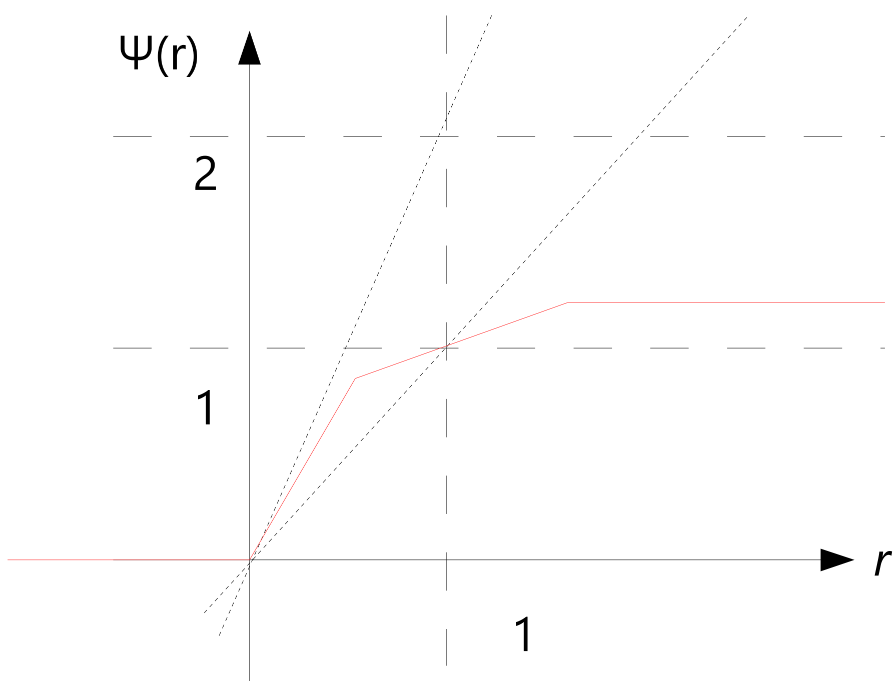
- Chakravarthy-Osherのminmod制限関数

$$\Phi(r) = \mathrm{minmod}(1, b/r) \qquad 1 \leq b \leq \frac{3-\kappa}{1-\kappa}$$

minmod(x,y) は 0, x, y の中央値

このとき、

$$\Psi(r) = \frac{1-\kappa}{2}\mathrm{minmod}(r,b) + \frac{1+\kappa}{2}\mathrm{minmod}(1,br)$$



- $b \leq \dfrac{3-\kappa}{1-\kappa}$ という条件は $r>b$ での

$\Psi(r) < 2$ を保証

- 1<r<b での傾きが2を超えないようにするには

$$b \leq \frac{3+\kappa}{1+\kappa}$$

という条件が必要

MUSCL法

Chakravarthy-Osherのminmod制限関数を用いると、グリッド境界における物理量の大小関係が変わらないように制限関数をつかって、Δ_i^+ と Δ_i^- をそれぞれ、

$$\bar{\Delta}_i^+ = \mathrm{minmod}(\Delta_i^+, b\Delta_i^-) \qquad \bar{\Delta}_i^- = \mathrm{minmod}(\Delta_i^-, b\Delta_i^+) \qquad b = \frac{3-\kappa}{1-\kappa}$$

で置き換える。

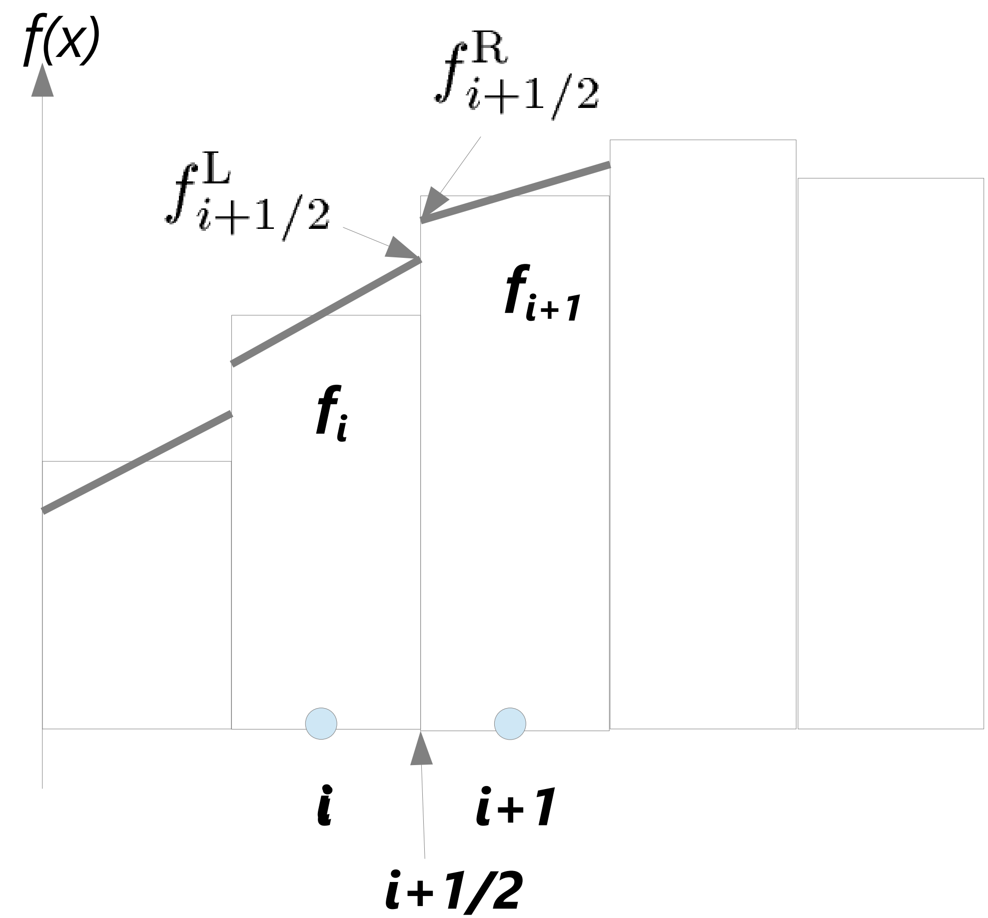
但し、minmod(x,y) は

$$x \times y < 0 \quad \rightarrow \quad minmod(x, y) = 0$$

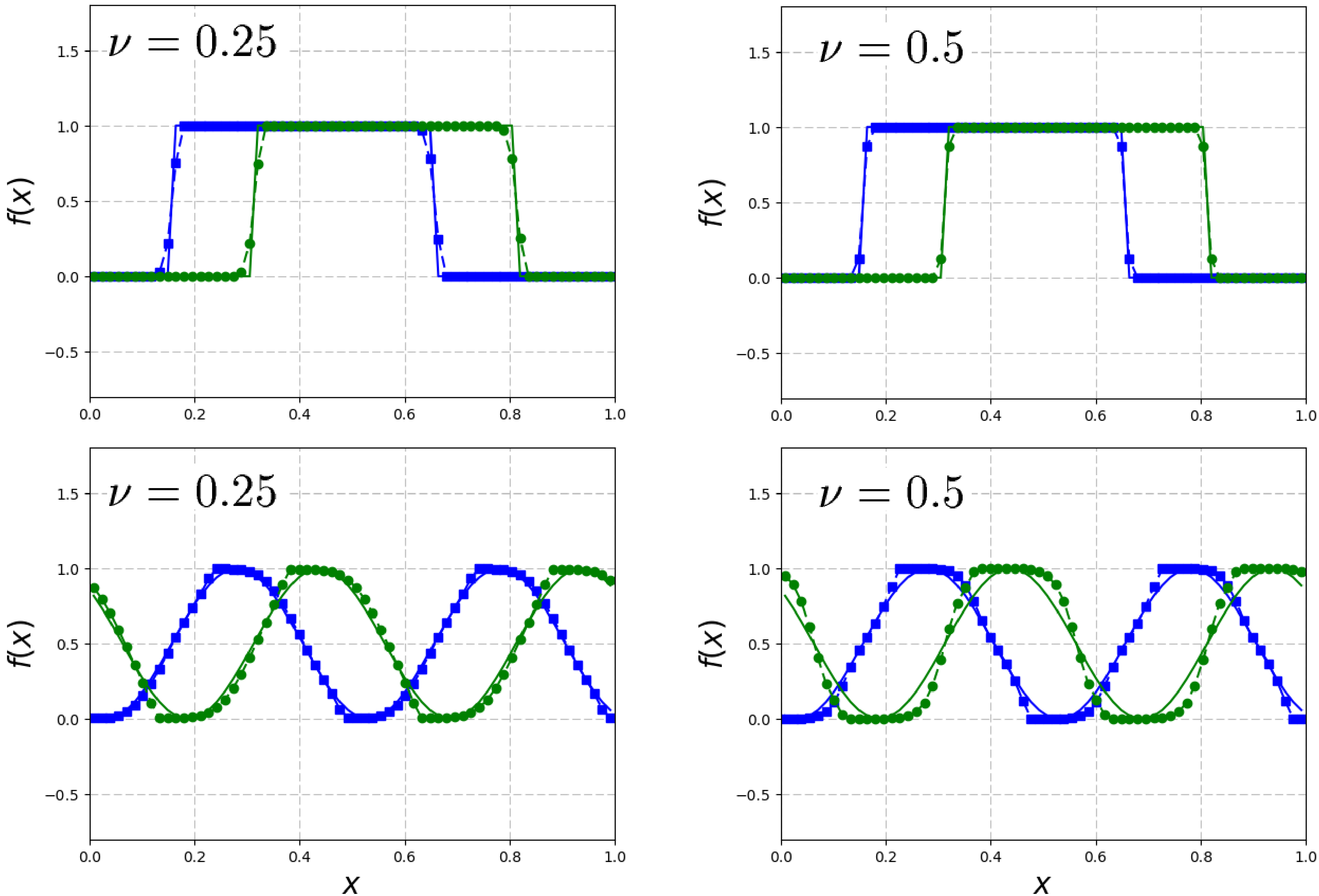
$$|x| \leq |y| \quad \rightarrow \quad minmod(x, y) = x$$

$$|x| > |y| \quad \rightarrow \quad minmod(x, y) = y$$

で定義される制限関数



線形波動方程式 (MUSCL法) (κ=-1)



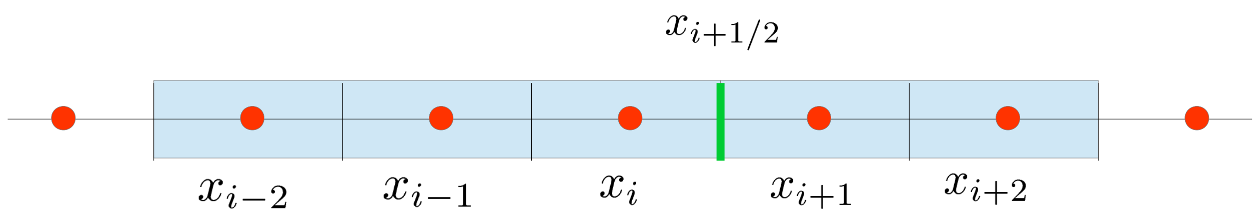
Vlasov シミュレーションにむけて もっともっと高次精度な移流スキーム

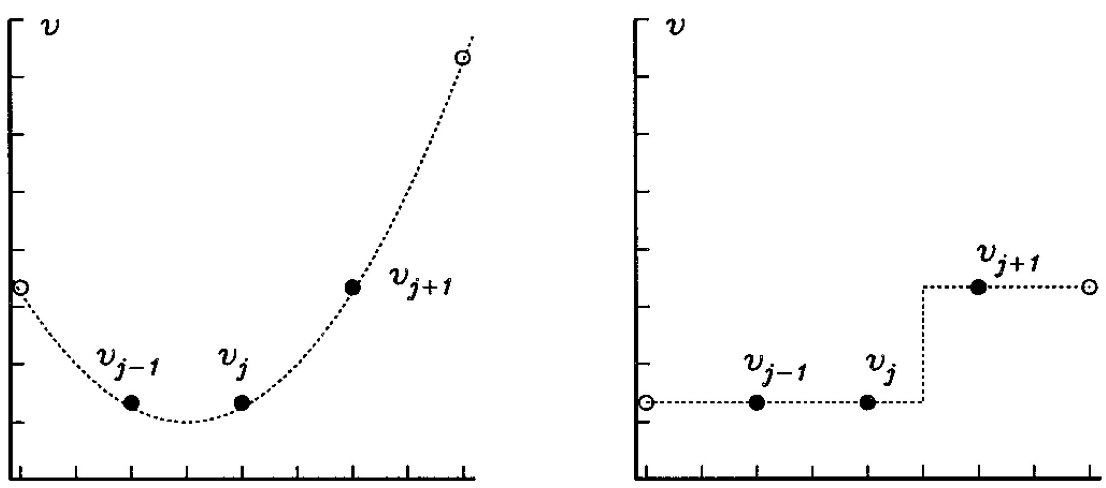
詳しくは Tanaka, Yoshikawa, Minoshima, Yoshida (arXiv:1702.08521)を参照

Monotonicity Preserving Scheme

Suresh & Huynh (1997) JCP, 136, 83-99

- 数値流速を求めるためのメッシュ境界値をいくつかの制限を用いて評価
- メッシュ境界の風上側3メッシュ、風下側2メッシュの情報を用いる





(a) (b)

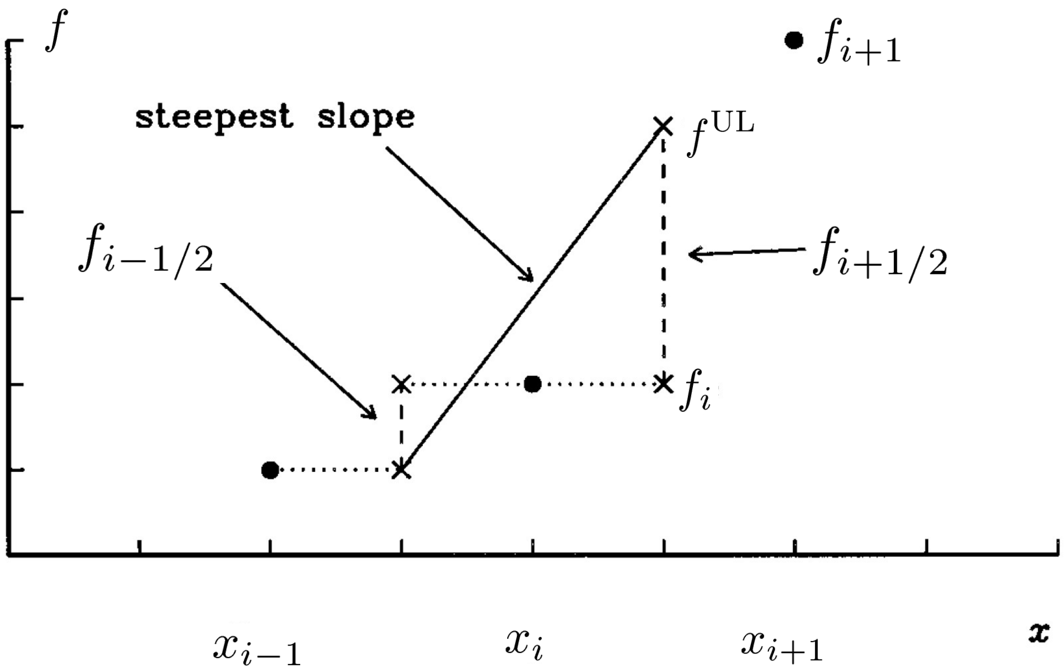
- TVDスキームでよくある3メッシュの情報だと、ステップ関数的なプロファイルと極値を持つプロファイルの区別がつかない
- これらを区別するには5メッシュの情報が必要

- 何らかの補間を用いてメッシュ境界 i+1/2 での関数値を求める

$$f_{i+1/2}^{\mathrm{int}} = (2f_{i-2} - 13f_{i-1} + 47f_i + 27f_{i+1} - 3f_{i+2})/60$$

5次の多項式補間

Monotonicity Preserving Scheme

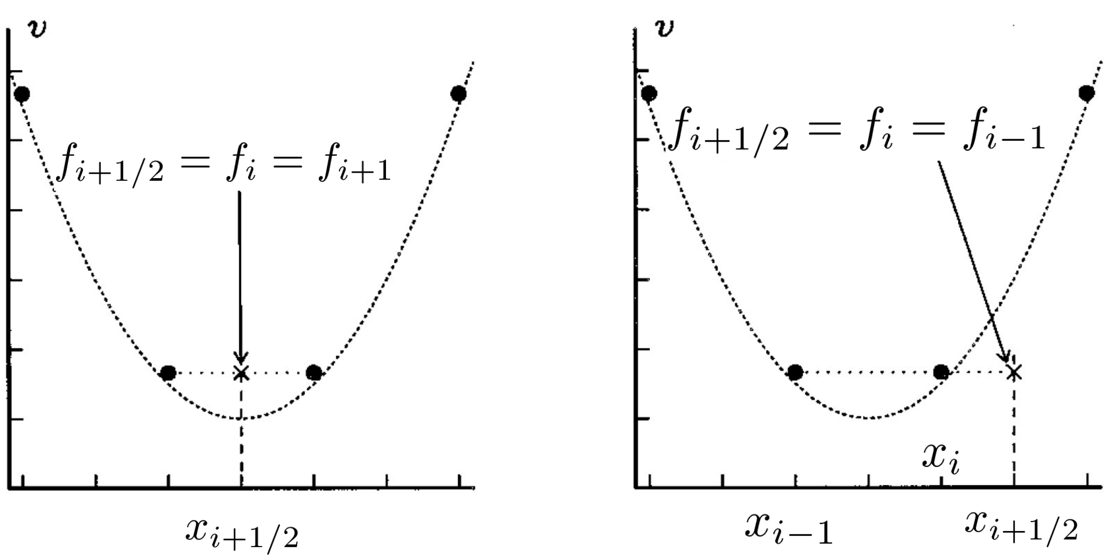


- upper limit

$$f^{\mathrm{UL}} = f_i + \alpha(f_i - f_{i-1})$$

$\alpha(>2)$: maximum slope

$$f_{i+1/2} \in I[f_i, f^{\mathrm{UL}}]$$

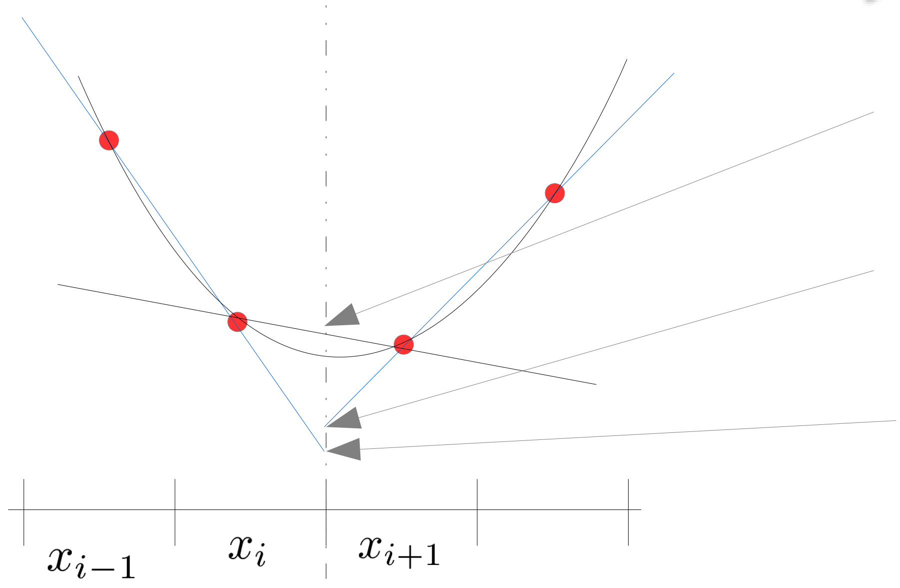


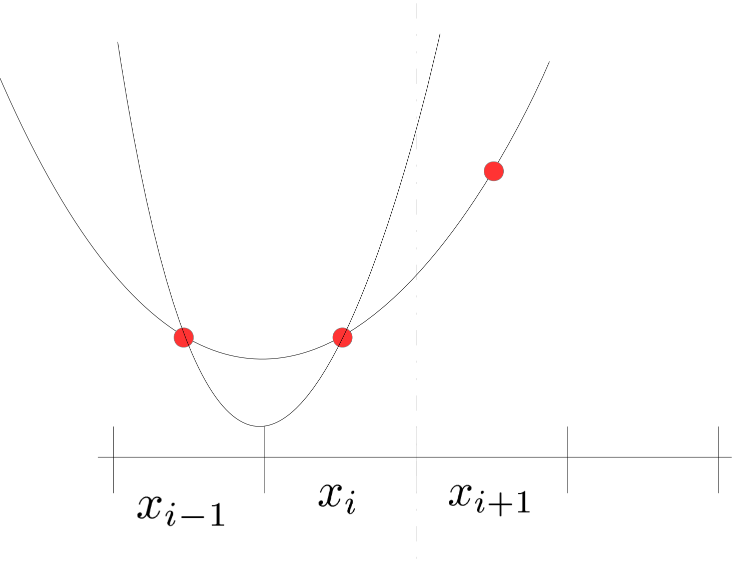
(a) (b)

- 極値の維持

上で求めた境界値は左図のような状況では、極値の精度を劣化させる。

Monotonicity Preserving Scheme





- $x_i < x < x_{i+1}$ にが極値がある場合

$$f^{\mathrm{AV}} = \frac{1}{2}(f_i + f_{i+1})$$

$$f^{\mathrm{FR}} = f_{i+1} + \frac{1}{2}(f_{i+1} - f_{i+2})$$

$$f^{\mathrm{FL}} = f_i + \frac{1}{2}(f_i - f_{i-1})$$

$$f^{\mathrm{MD}} = \mathrm{median}(f^{\mathrm{FR}}, f^{\mathrm{FL}}, f^{\mathrm{AV}})$$

$$f_{i+1/2} \in I[f_i, f_{i+1}, f^{\mathrm{MD}}]$$

- $x_{i-1} < x < x_i$ にが極値がある場合

適度な曲率を持つ放物線と $x=x_{i+1/2}$ の交点を f^{LC}

$$f_{i+1/2} \in I[f_i, f^{\mathrm{LC}}, f^{\mathrm{UL}}]$$

Monotonicity Preserving Scheme

- メッシュ境界値の取りうる範囲

$$f_{i+1/2} \in I[f_i, f_{i+1}, f^{\rm MD}] \quad \text{and} \quad f_{i+1/2} \in I[f_i, f^{\rm LC}, f^{\rm UL}]$$

$$f^{\min} \equiv \max(\min(f_i, f_{i+1}, f^{\rm MD}), \min(f_i, f^{\rm UL}, f^{\rm LC}))$$ 最小値の大きい方

$$f^{\max} \equiv \min(\max(f_i, f_{i+1}, f^{\rm MD}), \max(f_i, f^{\rm UL}, f^{\rm LC}))$$ 最大値の小さい方

$$\longrightarrow \quad f^{\rm MP}_{i+1/2} = {\rm median}(f^{\rm int}_{i+1/2}, f^{\min}, f^{\max})$$

- $f^{\rm MD}$, $f^{\rm LC}$, $f^{\rm UL}$ の詳細な計算方法はSuresh & Huynh (1997)かTanaka et al. (arXiv:1702.08521)のAppendix を参照

以上の手続きを

$$\boxed{f^{\rm MP}_{i+1/2} = {\rm MP}(f^{\rm int}_{i+1/2}, f_{i-2}, f_{i-1}, f_i, f_{i+1}, f_{i+2})}$$

とあらわすことにする。（後で使います）

Time Integration (TVD Runge-Kutta)

- 空間精度を向上させた場合、時間精度も同様の精度にしないと数値的に不安定
- MP5スキームでは空間精度は5次なので、TVD条件を満たすように開発された3次精度のRunge-Kuttaスキームを採用
- 更に高い空間次数を持つ数値流速では4次以上のTVD-RKスキームが必要
- $f^{(1)}$ や $f^{(2)}$は in-placeに更新可能なのでメモリ消費は少なくて済む
- 4次精度以上のTVD-RKスキームではそういう性質はない

RK-MP5 / RK-MP7 スキーム

$$\left\{\begin{aligned} f_i^{(1)} &= f_i^n - \nu L_i^{\mathrm{MP}}(f^n) \\ f_i^{(2)} &= \frac{3}{4} f_i^n + \frac{1}{4}\left(f_i^{(1)} - \nu L_i^{\mathrm{MP}}(f^{(1)})\right) \\ f_i^{n+1} &= \frac{1}{3} f_i^n + \frac{2}{3}\left(f_i^{(2)} - \nu L_i^{\mathrm{MP}}(f^{(2)})\right) \end{aligned}\right.$$

$$L_i^{\mathrm{MP}}(f) = (f_{i+1/2}^{\mathrm{MP}} - f_{i-1/2}^{\mathrm{MP}})$$

Positivity Preserving Limiter

- Vlasovシミュレーションで移流方程式を解く場合は数値解の正値性が必要

$$f_i^n \geq 0 \Longrightarrow f_i^{n+1} \geq 0$$

- 単調性が満たしているからといって正値性が満たされている保証はない

- 流束制限関数の手法で正値性を持たせる

$$\hat{f}_{i+1/2} = \theta_{i+1/2} f_{i+1/2}^{\mathrm{MP}} + (1 - \theta_{i+1/2}) f_{i+1/2}^{\mathrm{UP}}$$

単調性を満たすメッシュ境界値　　1次風上差分スキームのメッシュ境界値

$$f_{i+1/2}^{\mathrm{UP}} = \frac{1}{2c}\left(f_i(c + |c|) + f_{i+1}(c - |c|)\right)$$

- 1次風上差分スキームは $\nu<1$ で数値解の正値性を満たす
- 正値性が失われそうな領域で正値性を持つスキームを混ぜて使う
- $0<\theta_{i+1/2}<1$ を適切にとることで数値解の正値性を満たすことができる

Posivity Preserving Limiter

- $\theta_{i+1/2}$ の決め方

$$\theta_{i+1/2} = \min(\theta^{+}_{i+1/2}, \theta^{-}_{i+1/2})$$

$$\theta^{\pm}_{i+1/2} = \begin{cases} \dfrac{U_i^{\mathrm{UP},\pm}}{U_i^{\mathrm{UP},\pm} - U_i^{\pm}} & U_i^{\pm} < 0 \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$U_i^{\pm} = f_i \mp 2\nu f_{i\pm1/2} \qquad U_i^{\mathrm{UP},\pm} = f_i \mp 2\nu f^{\mathrm{UP}}_{i\pm1/2}$$

- ν<1/2 が正値性を持つための十分条件

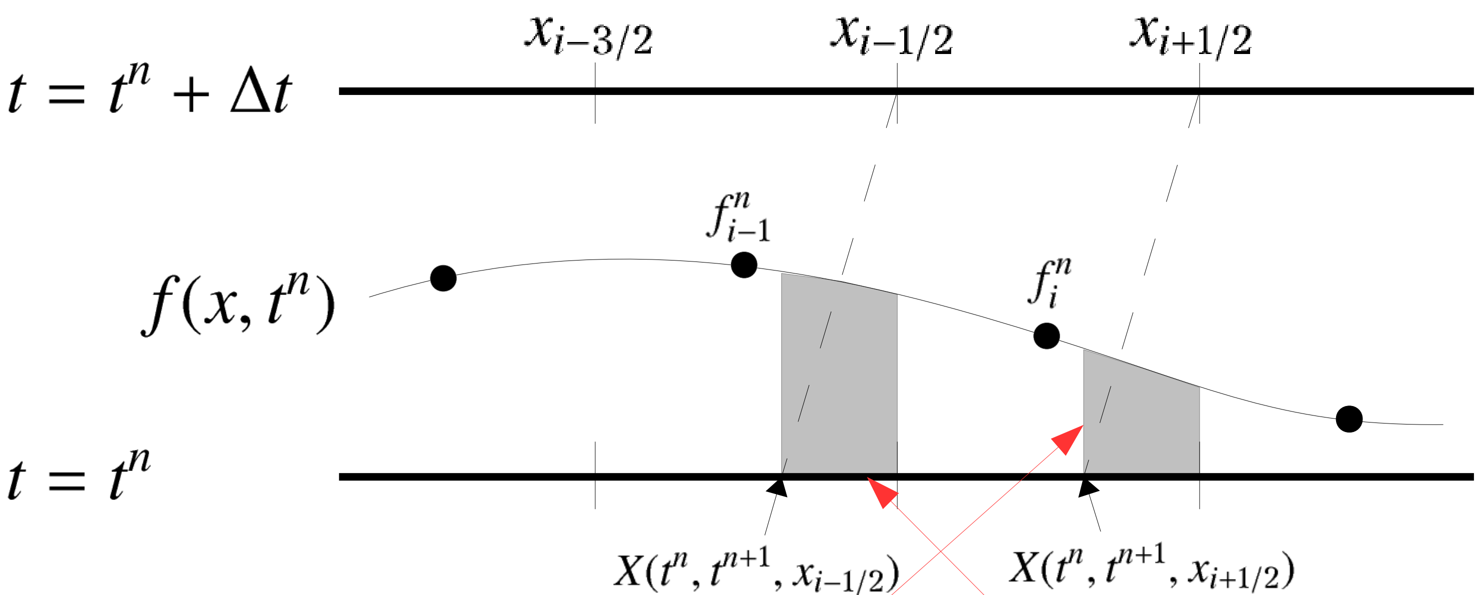
$$\boxed{\hat{f}_{i+1/2} = \mathrm{PP}(f^{\mathrm{MP}}_{i+1/2}, f_i, f_{i+1})}$$

RK-MPP5 / RK-MPP7 スキーム

$f^{\mathrm{MP}}_{i+1/2}$ の代わりに $\hat{f}_{i+1/2}$ をメッシュ境界値として用いたスキーム

Conservative Semi-Lagrange スキーム

$$f_i^{n+1} = \frac{1}{\Delta x}\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(x,t^{n+1})\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\Delta x}\int_{X(t^n,t^{n+1},x_{i-1/2})}^{X(t^n,t^{n+1},x_{i+1/2})} f(x,t^n)\,\mathrm{d}x,$$



$$f_i^{n+1} = f_i^n - \nu\left(\boxed{\Phi_{i+1/2}^n} - \boxed{\Phi_{i-1/2}^n}\right)$$

- f_i^n の補間によって $\Phi_{i\pm1/2}^n$ を積分する。
- single stageで時間積分が完了するのでTVD-RKスキームを用いるよりも計算コストが小さい

Conservative Semi-Lagrange スキーム

Qiu, J.-M., Christlieb, A., 2010, JCP, 229, 1130-1149

- 空間5次精度のconservative SL スキーム

$$\Phi^n_{i-1/2} = \sum_{j=0}^{4} C_j \zeta^j \qquad \zeta = \frac{c\Delta t}{\Delta x}$$

$$\begin{cases} C_0 = \dfrac{f^n_{i-3}}{30} - \dfrac{13}{60} f^n_{i-2} + \dfrac{47}{60} f^n_{i-1} + \dfrac{9}{20} f^n_i - \dfrac{f^n_{i+1}}{20} \\ C_1 = -\dfrac{f^n_{i-2}}{24} + \dfrac{5}{8} f^n_{i-1} - \dfrac{5}{8} f^n_i + \dfrac{f^n_{i+1}}{24} \\ C_2 = -\dfrac{f^n_{i-3}}{24} + \dfrac{f^n_{i-2}}{4} - \dfrac{f^n_{i-1}}{3} + \dfrac{f^n_i}{12} + \dfrac{f^n_{i+1}}{24} \\ C_3 = \dfrac{f^n_{i-2}}{24} - \dfrac{f^n_{i-1}}{8} + \dfrac{f^n_i}{8} - \dfrac{f^n_{i+1}}{24} \\ C_4 = \dfrac{f^n_{i-3}}{120} - \dfrac{f^n_{i-2}}{30} + \dfrac{f^n_{i-1}}{20} - \dfrac{f^n_i}{30} + \dfrac{f^n_{i+1}}{120} \end{cases}$$

- 7次精度、9次精度の式もこの論文に載っている

MP 目つ PP な semi-Lagrange スキーム

- conservativel SL スキームでは当然、単調性や正値性は保証されない
- conservative SLスキームのメッシュ境界値 $\Phi^n_{i+1/2}$ にMP 制限を適用する

$$\boxed{\Phi^{\mathrm{MP},n}_{i+1/2} = \mathrm{MP}(\Phi^n_{i+1/2}, f^n_{i-2}, f^n_{i-1}, f^n_i, f^n_{i+1}, f^n_{i+2})}$$

SL-MP5 / SL-MP7 スキーム：
$$f^{n+1}_i = f^n_i - \nu(\Phi^{\mathrm{MP},n}_{i+1/2} - \Phi^{\mathrm{MP},n}_{i-1/2})$$

- MP制限をかけたのメッシュ境界値 $\Phi^{\mathrm{MP},n}_{i+1/2}$ にPP limiter を適用する

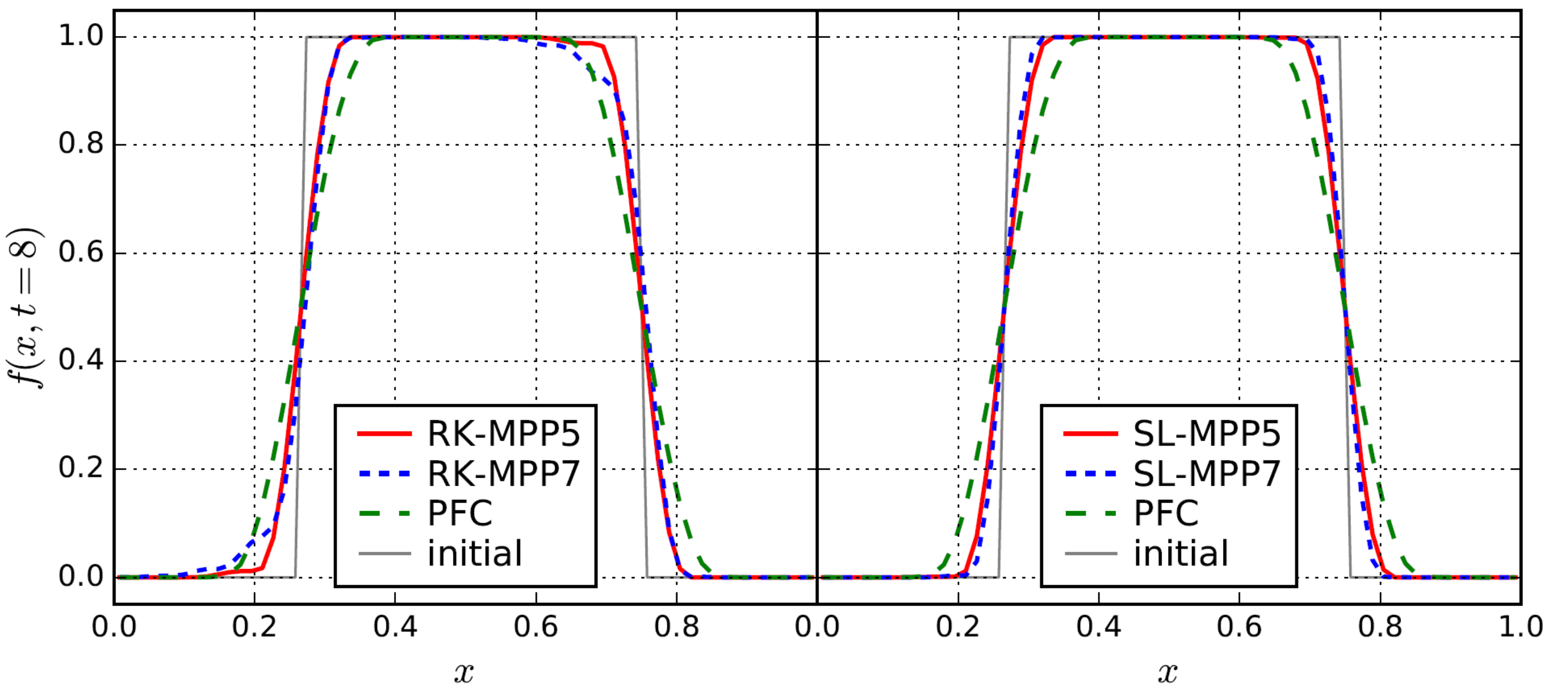
$$\boxed{\hat{\Phi}^n_{i+1/2} = \mathrm{PP}(\Phi^{\mathrm{MP},n}_{i+1/2}, f^n_i, f^n_{i+1})}$$

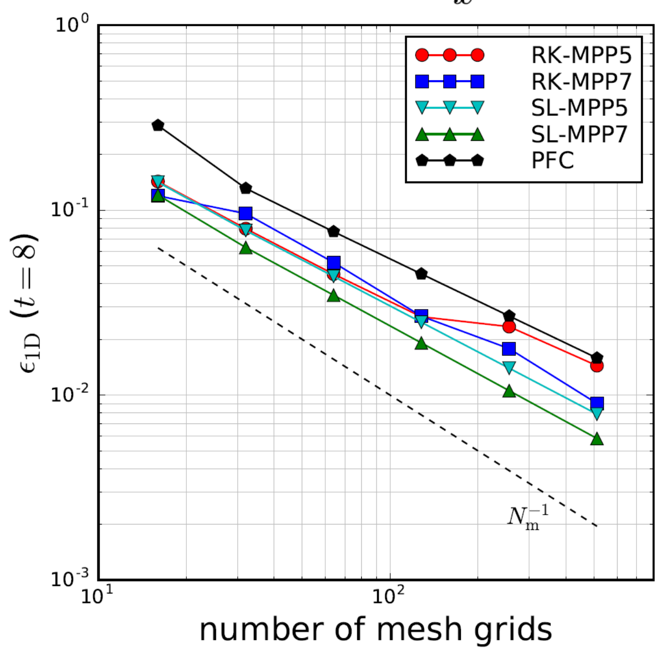
SL-MPP5 / SL-MPP7 スキーム：
$$f^{n+1}_i = f^n_i - \nu(\hat{\Phi}^n_{i+1/2} - \hat{\Phi}^n_{i-1/2})$$

1次元移流方程式の計算例

▶矩形波の移流（メッシュ数：64）

PFC : 空間3次精度のsemi-Lagrangeスキーム





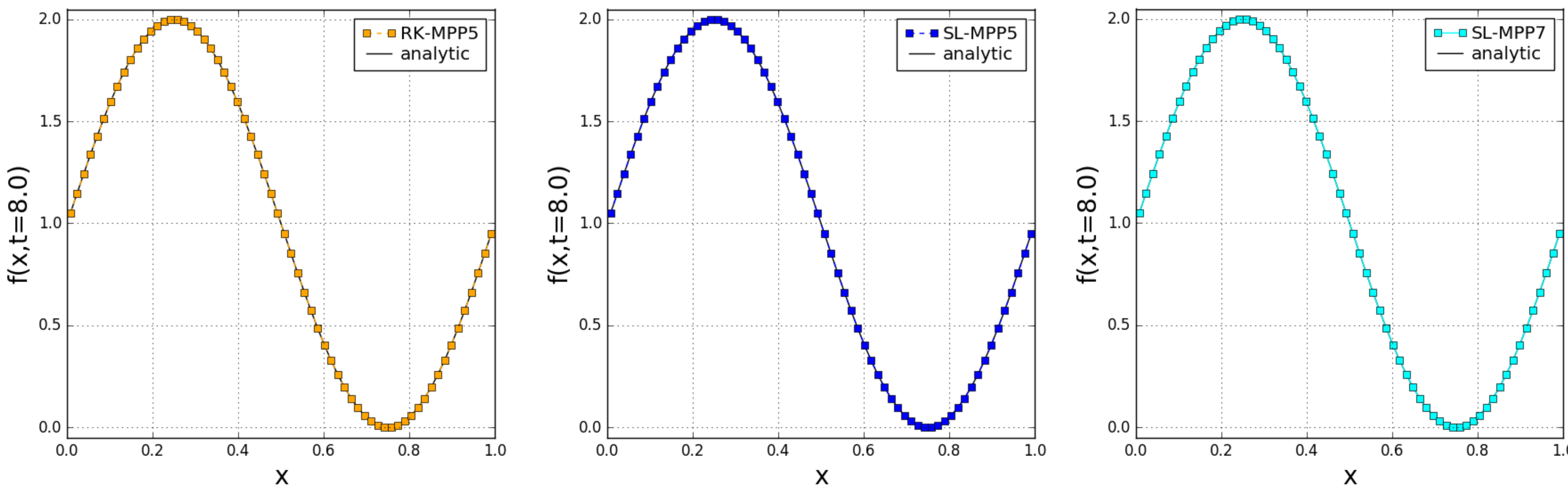
▶PFCスキームに比べ、数値拡散が小さい

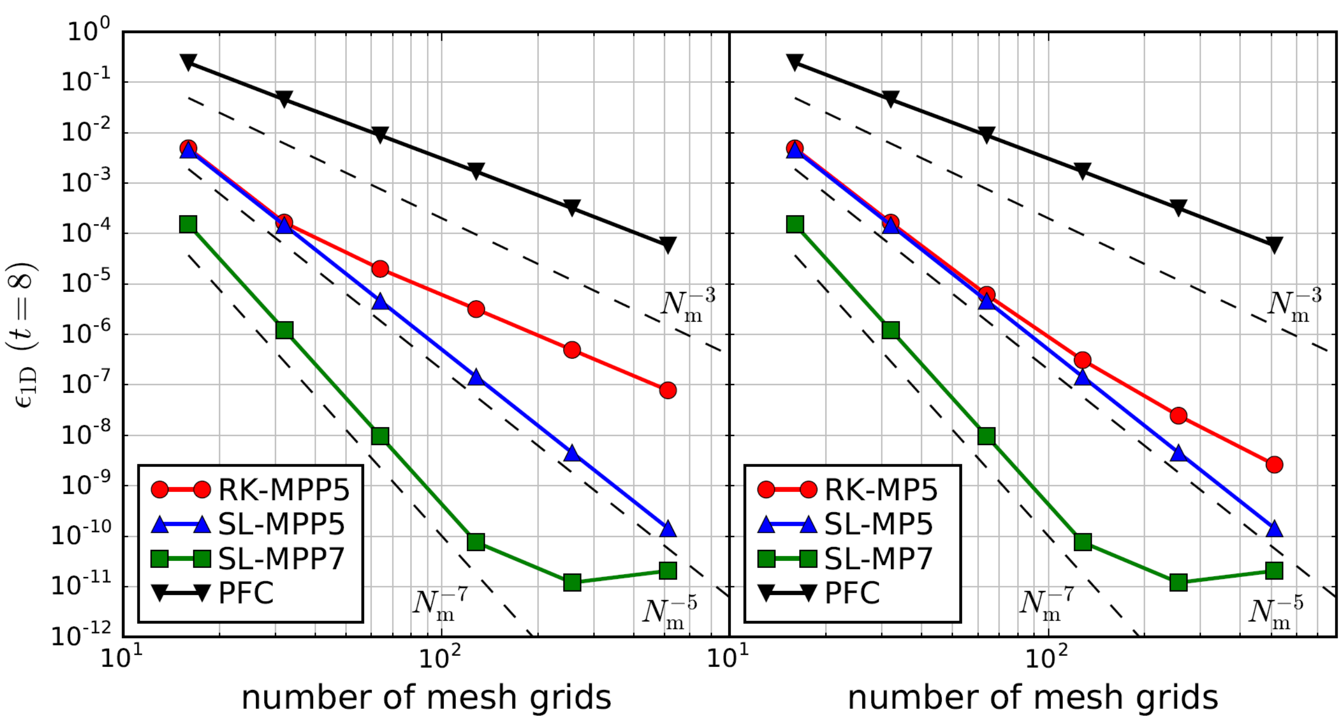
▶RK-MPP7スキームは、変な非対称性がある。

▶相対誤差のメッシュ数依存性は1次精度

不連続点があるので、MP制限が効いている

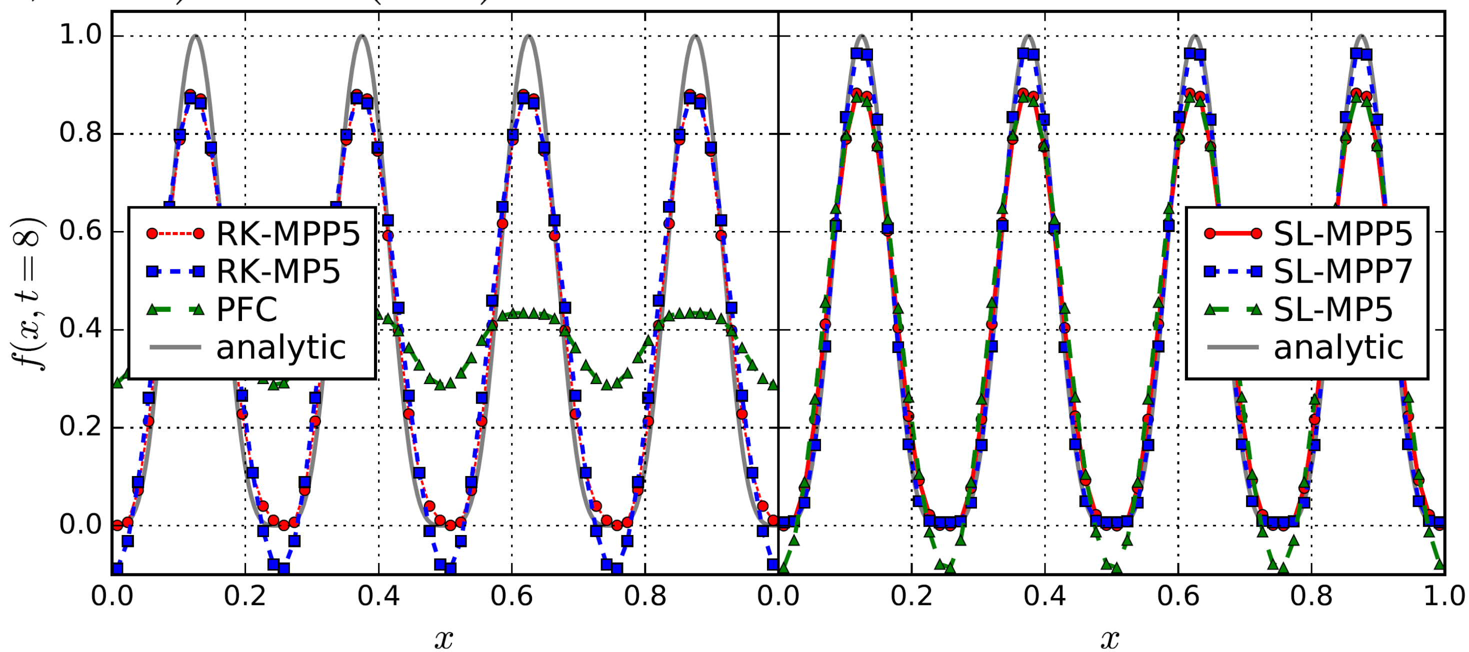
1次元移流方程式の計算例

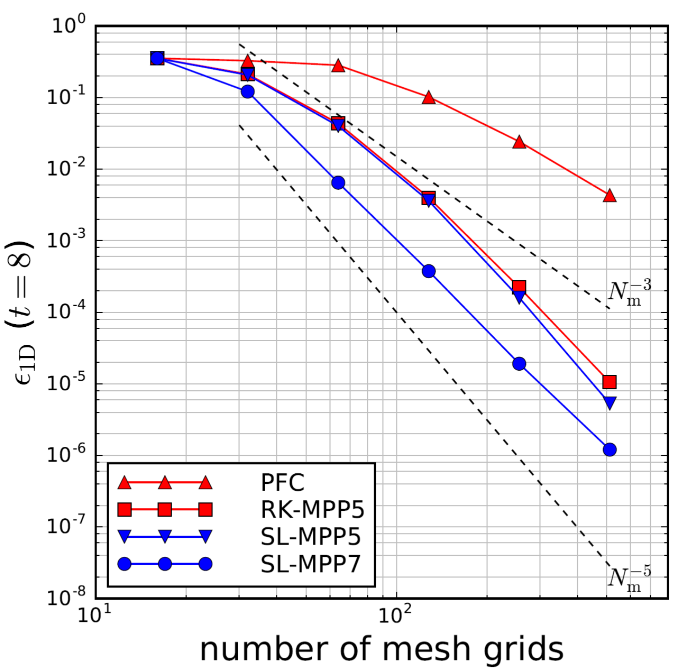




1次元移流方程式の計算例

- $f(x, t=0) = \sin^4(4\pi x)$



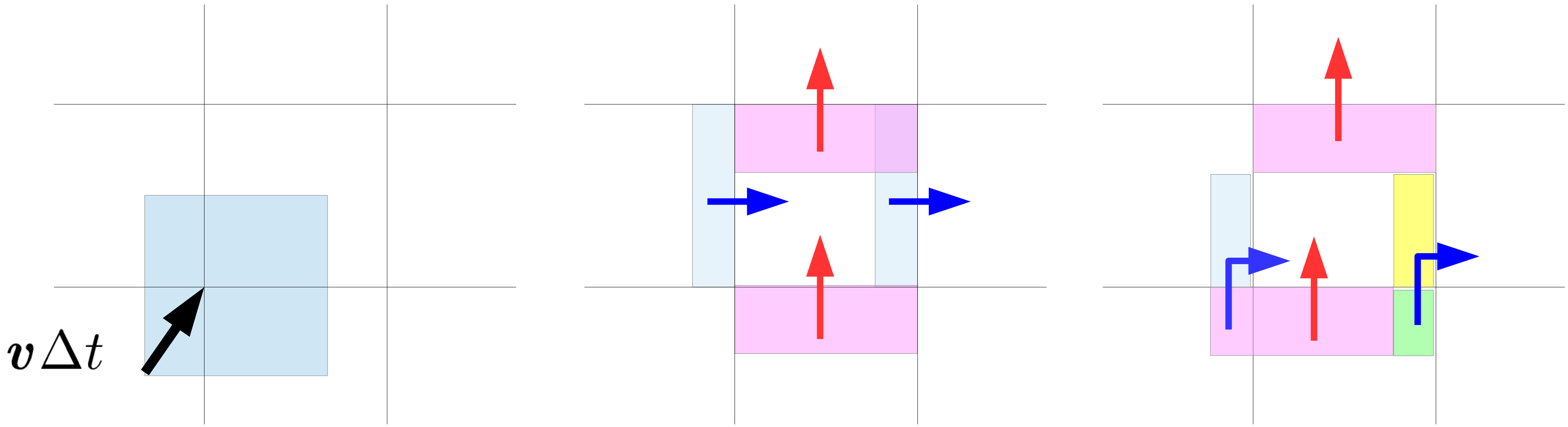


- PFCは数値拡散がかなり大きい
- PP limiterのないスキームはかなり大きな負値をとる
- 7次精度のSL-MPP7スキームは極値を再現している
- 相対誤差のメッシュ数依存性はおおよそ5次精度。PP limiterの影響と考えられる。

多次元化

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} + v_y \frac{\partial f}{\partial y} = 0$$

- Split or Unsplit ?



unsplit method : $f_{i,j}^{n+1} = f_{i,j}^{n} - \frac{v_x \Delta t}{\Delta x}(f_{i+1/2,j} - f_{i-1/2,j}) - \frac{v_y \Delta t}{\Delta y}(f_{i,j+1/2} - f_{i,j-1/2})$

split method

$$f_{i,j}^{*} = f_{i,j}^{n} - \frac{v_x (\Delta t/2)}{\Delta x}(f_{i+1/2,j}^{n} - f_{i-1/2,j}^{n})$$

x方向に$\Delta t/2$

$$f_{i,j}^{**} = f_{i,j}^{*} - \frac{v_y \Delta t}{\Delta y}(f_{i,j+1/2}^{*} - f_{i,j-1/2}^{*})$$

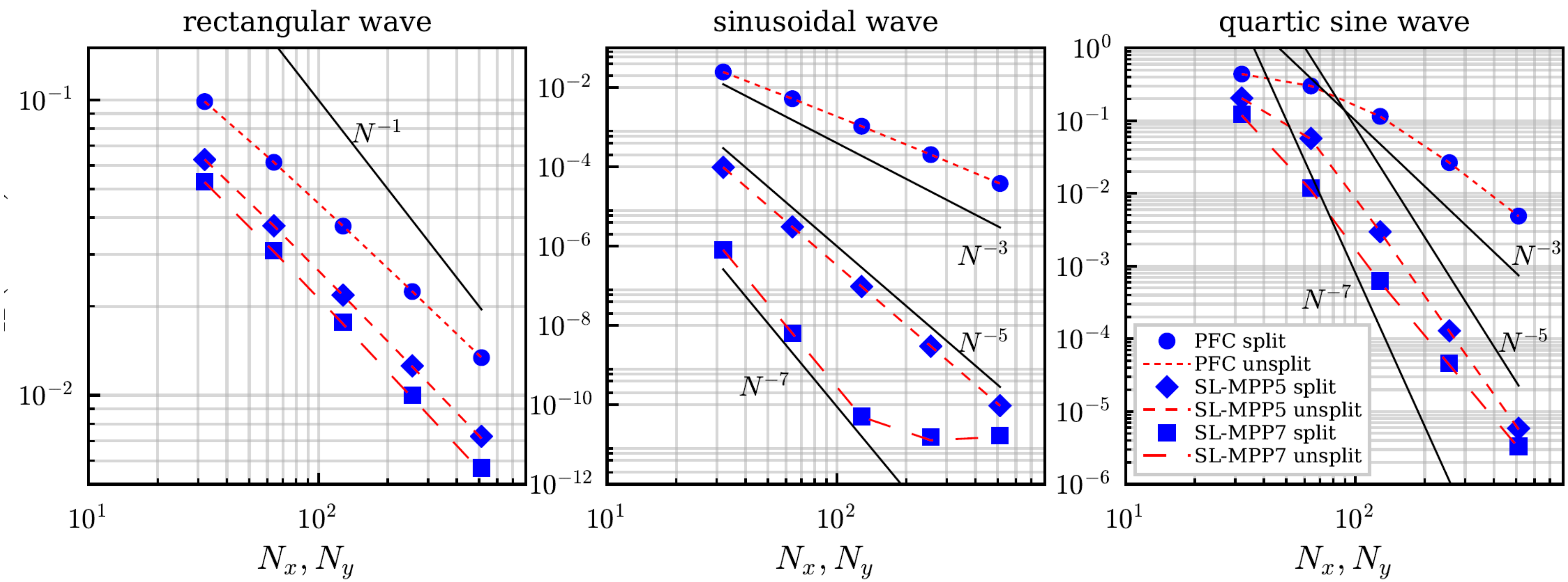
y方向にΔt

$$f_{i,j}^{n+1} = f_{i,j}^{**} - \frac{v_x (\Delta t/2)}{\Delta x}(f_{i+1/2,j}^{**} - f_{i-1/2,j}^{**})$$

x方向に$\Delta t/2$

多次元化

- 2次元移流方程式の相対誤差



- 基本的に数値解の空間精度次数は1次元の場合と同じ

- split 法と unsplit法の精度はほぼ同じ。但し、unsplit法では単調性・正値性を満たすためにはCFLパラメータを0.1以下にしなければならない。

Vlasov-Poisson シミュレーション

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} - \nabla \phi \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} = 0 \qquad \nabla^2 \phi = 4\pi G \rho = 4\pi G \int f d^3 \vec{v}$$

- 空間1次元、運動量（速度）1次元から成る2次元位相空間での運動を考える
- 2次元の移流方程式に帰着されるので

$$\left\{ \begin{array}{ll} \dfrac{\partial f}{\partial t} - \dfrac{\partial \phi}{\partial x}\dfrac{\partial f}{\partial v} = 0 & \text{速度方向の移流を}\Delta t/2 \\[2ex] \dfrac{\partial f}{\partial t} + v\dfrac{\partial f}{\partial x} = 0 & \text{空間方向の移流を}\Delta t \\[2ex] \dfrac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = 4\pi G \rho(x) = 4\pi G \displaystyle\int f(x, v, t)\mathrm{d}v & \text{ポテンシャルの更新} \\[2ex] \dfrac{\partial f}{\partial t} - \dfrac{\partial \phi}{\partial x}\dfrac{\partial f}{\partial v} = 0 & \text{速度方向の移流を}\Delta t/2 \end{array} \right.$$

の手順で時間発展させる

Poisson Solver : Convolution Method

$$\nabla^2 \phi(x) = \rho$$ を周期的境界条件で解く

- Poisson 方程式を離散化（取り合えず2次精度）

$$\frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{\Delta x^2} = \rho_j$$

- 両辺を離散フーリエ変換(DFT)する

$$\hat{\phi}_k [\exp(ik\Delta x) - 2 + \exp(-ik\Delta x)] = \Delta x^2 \hat{\rho}_k$$

但し、 $$\hat{q}_k = \sum_{j=0}^{N_{\mathrm{m}}-1} q_j \exp(-ikj\Delta x)$$

$$\downarrow$$

$$\hat{\phi}_k = -\frac{\Delta x^2}{4\sin^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)} \hat{\rho}_k$$

- $\hat{\phi}_k$ を離散逆フーリエ変換する

Poisson Solver：Convolution Method

▶ より高次精度の計算：Poisson 方程式の高次の離散化

- 4次精度：

$$\frac{-\phi_{j+2} + 16\phi_{j+1} - 30\phi_j + 16\phi_{j-1} - \phi_{j-2}}{12\Delta x^2} = \rho_j$$

$$\Rightarrow \quad \hat{\phi}_k = \frac{3\Delta x^2}{\sin^2(k\Delta x) - 16\sin^2(k\Delta x/2)}\hat{\rho}_k$$

- 6次精度：

$$\frac{2\phi_{j+3} - 27\phi_{j+2} + 270\phi_{j+1} - 490\phi_j + 270\phi_{j-1} - 27\phi_{j-2} + 2\phi_{j-3}}{180\Delta x^2} = \rho_j$$

$$\Rightarrow \quad \hat{\phi}_k = -\frac{45\Delta x^2}{2\sin^2\left(\frac{3k\Delta x}{2}\right) - 27\sin^2(k\Delta x) + 270\sin^2\left(\frac{k\Delta x}{2}\right)}\hat{\rho}_k$$

Poisson Solver : Finite Difference Approx.

- ポテンシャルが求まったら、有限差分で force を計算

  - 2次精度：

$$\nabla\phi|_{x=x_i} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

  - 4次精度：

$$\nabla\phi|_{x=x_i} = \frac{\phi_{i+2} - 8\phi_{i+1} + 8\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}{12\Delta x} + O(\Delta x^4)$$

  - 6次精度：

$$\nabla\phi|_{x=x_i} = \frac{\phi_{i+3} - 9\phi_{i+2} + 45\phi_{i+1} - 45\phi_{i-1} + 9\phi_{i-2} - \phi_{i-3}}{60\Delta x} + O(\Delta x^6)$$

重力不安定 と 無衝突減衰

- 空間方向には周期的境界条件を課した1次元領域を考える

- 初期条件

$$f(x, v, t=0) = \frac{\bar{\rho}[1 + A\cos(kx)]}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \exp\left(-\frac{v^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$\rho(x, t=0) = \bar{\rho}[1 + A\cos(kx)]$$

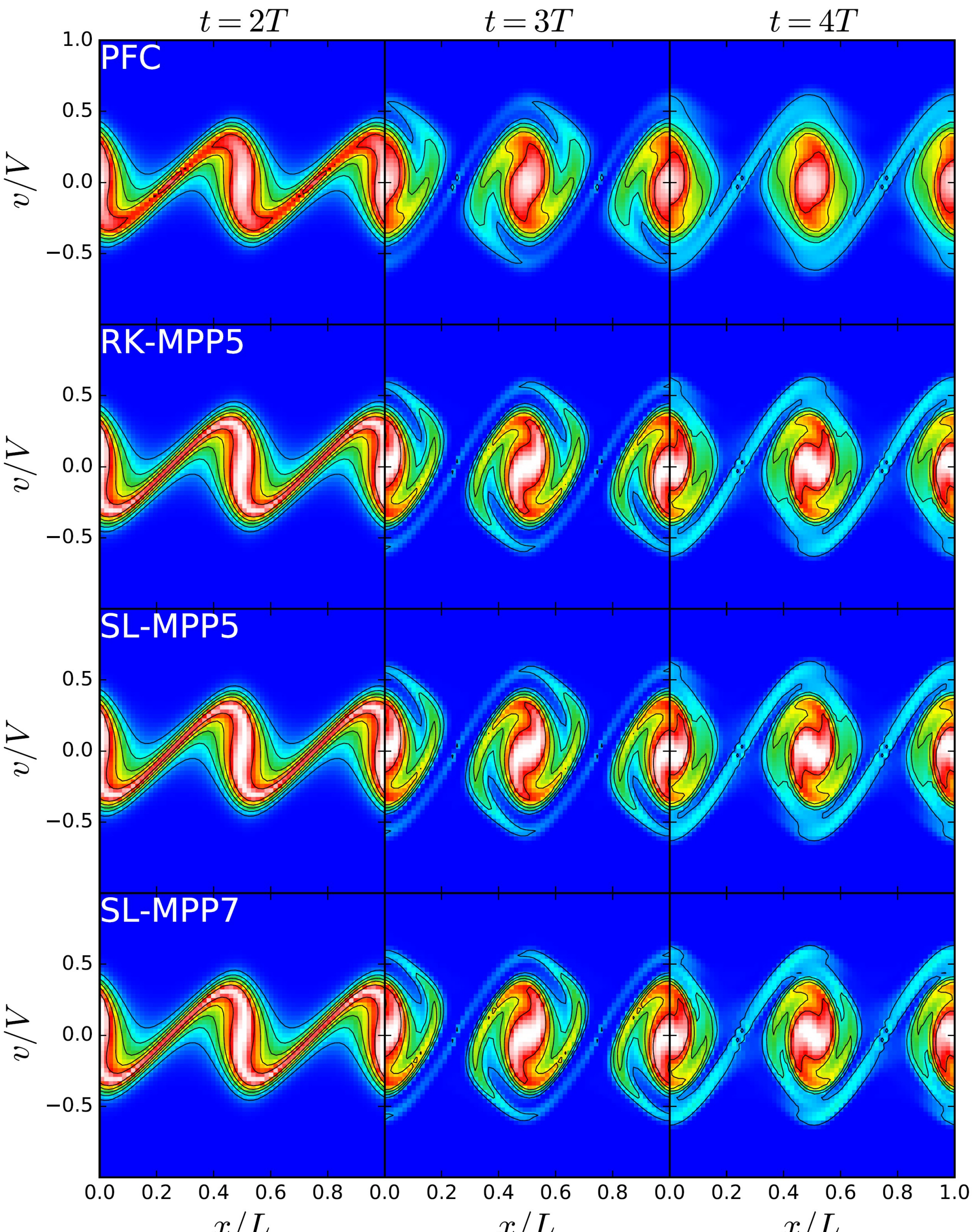
- critical Jeans wave number

$$k_\mathrm{J} = \left(\frac{4\pi G\bar{\rho}}{\sigma^2}\right)^{1/2}$$

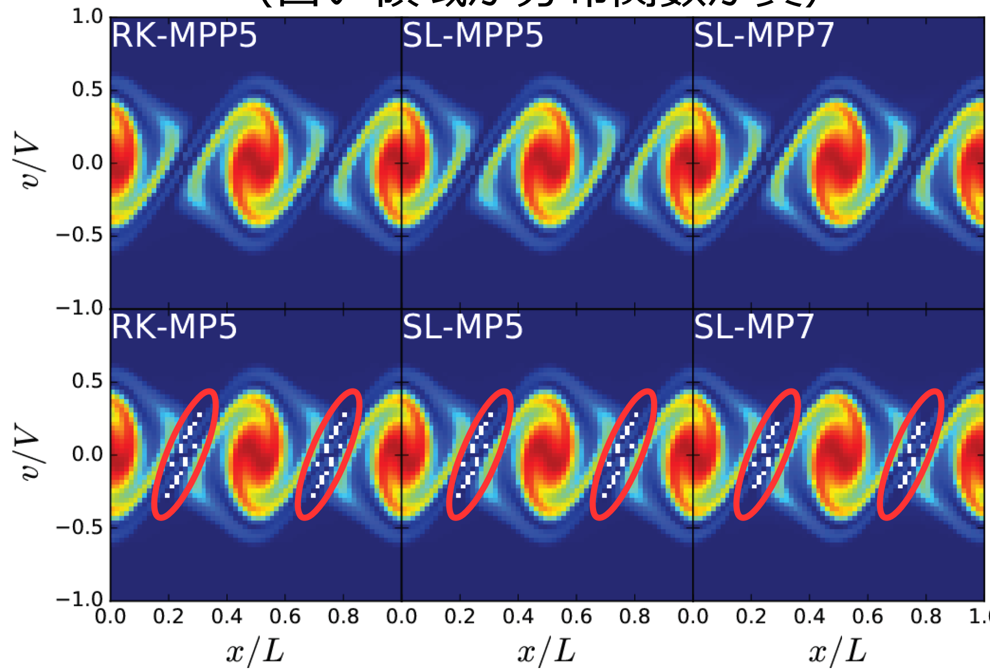
$$\left\{\begin{array}{lll} k < k_\mathrm{J} & \Rightarrow & \text{密度揺らぎは重力不安定で成長} \\ k > k_\mathrm{J} & \Rightarrow & \text{無衝突減衰で密度揺らぎはダンピング} \end{array}\right.$$

重力不安定

$k/k_{\mathrm{J}} = 0.5 \quad A = 0.01 \quad N_x = N_v = 64$



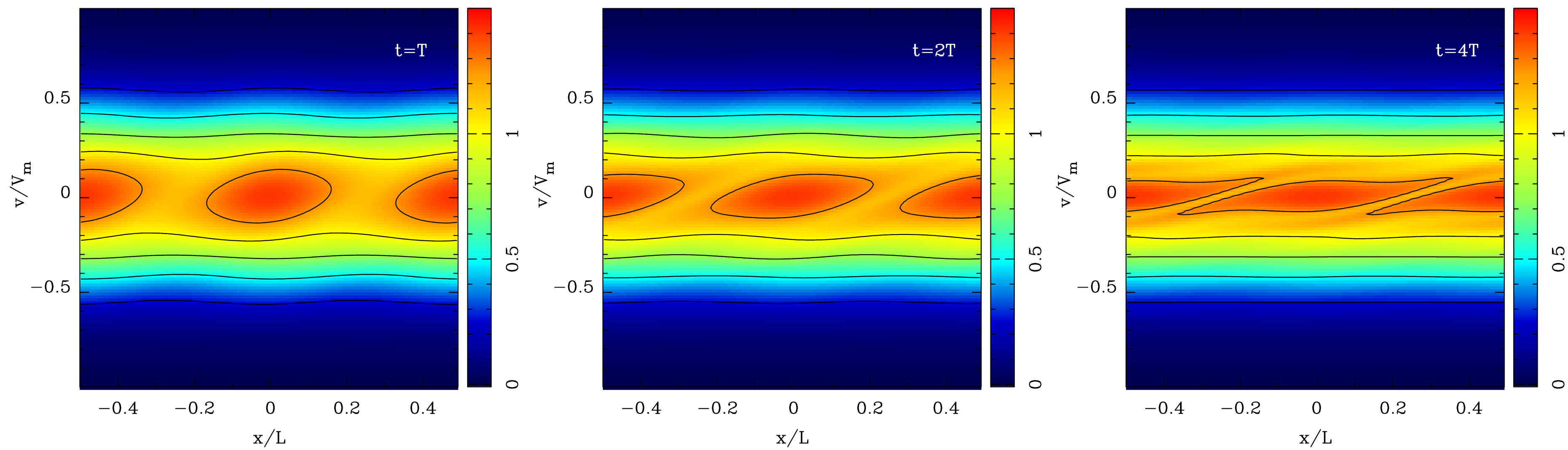
（白い領域が分布関数が負）

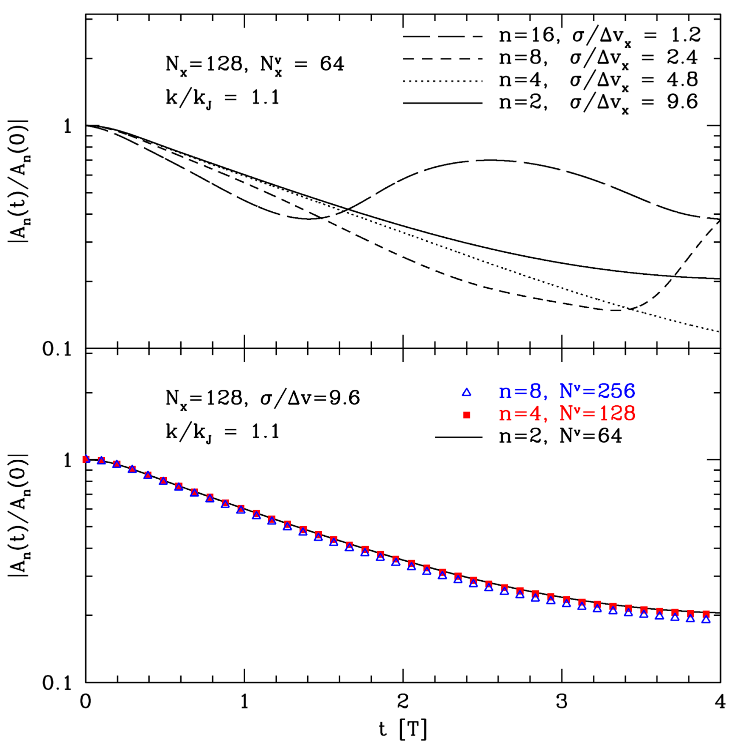


- PP-limiter を適用することで、分布関数が負になる領域をなくすことができている。
- 時間発展に従って低精度スキームでは重力収縮の中心部での位相空間分布が数値拡散の影響を受けやすい。

無衝突減衰（Collisionless Damping）

$k/k_{\mathrm{J}} = 1.1 \quad A = 0.1 \quad N_x = N_v = 64$





- Phase mixing を起こしつつ、密度揺らぎが減衰していく
- 速度空間の分解能によって減衰の時間発展が影響を受ける

静電プラズマのLandau減衰

分布関数：速度で積分したものがイオンに対する電子の数密度比になるよう規格化

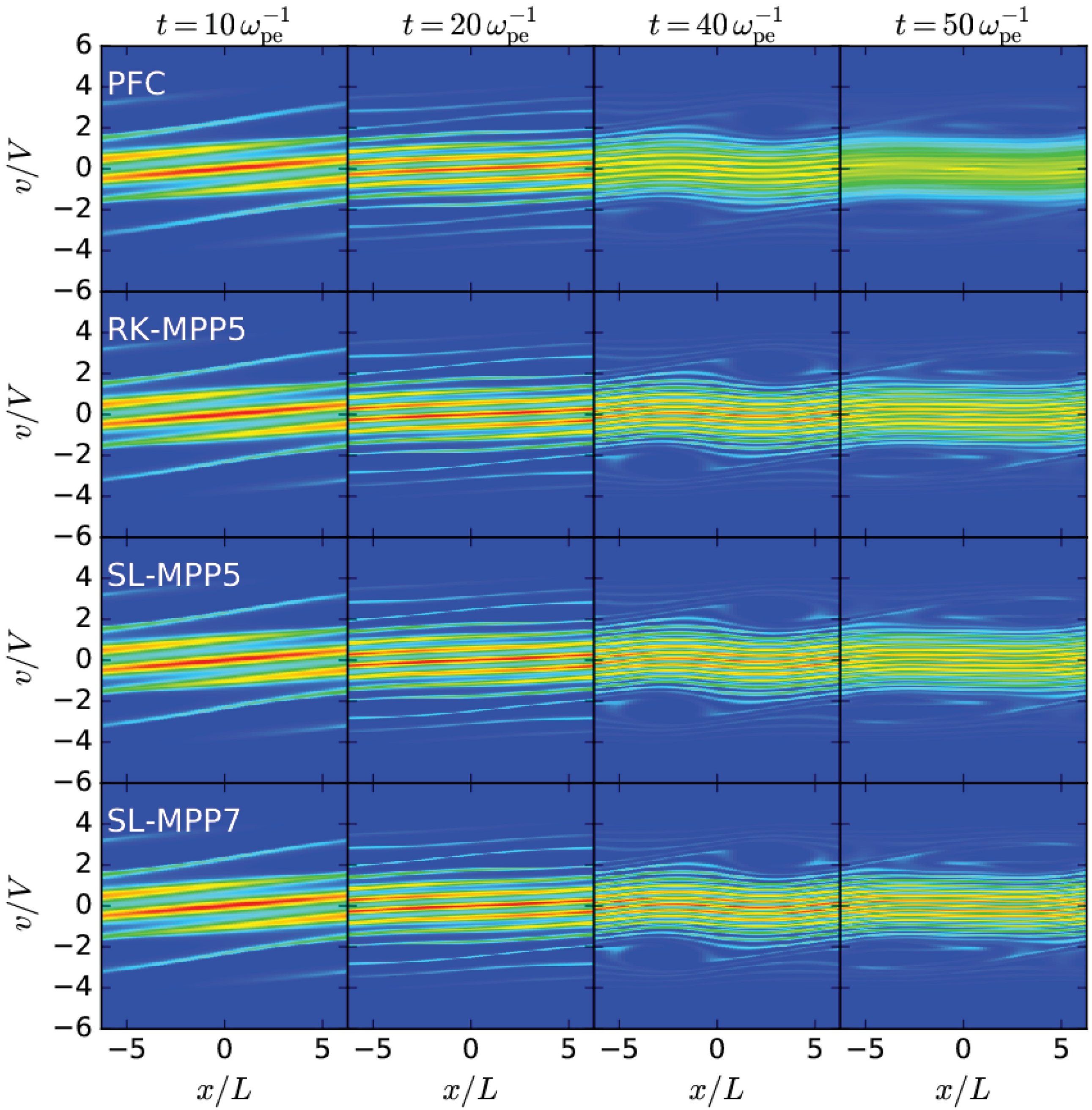
$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{e}{m}\frac{\partial \phi_{\mathrm{s}}}{\partial x} \cdot \frac{\partial f}{\partial v} = 0 \qquad \nabla^2 \phi_{\mathrm{s}} = 4\pi n e \left(1 - \int_{-\infty}^{\infty} f dv\right)$$

- 初期条件　（空間方向は周期的境界条件： -2πL < x < 2πL ）

$$f(x, v, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{v^2}{2\sigma^2}\right)(1 + A\cos kx) \qquad k=1/(2L)$$

A=0.5 : strong non-linear Landau damping

non-Linear Landau Damping



- Phase mixing が発達しつつ揺らぎが減衰
- 電場でトラップされた電荷によって減衰はサチる
- 速度方向にはphase mixing によって数多くの分布関数のピークが存在
- 低精度スキームでは、数値拡散でピークが見えなくなってしまう。

まとめ

- 1次元移流方程式の数値解法を勉強
  - FTCSスキーム、Laxスキーム、1次風上差分スキーム、Lax-Wendroffスキーム
  - von Neumannの安定性解析
  - 保存型スキーム・数値流速
  - 高次精度化：流束制限関数、MUSCL法
  - 更に高次精度化：MP5スキーム、正値性保証、semi-Lagrange法
- Vlasovシミュレーション
  - 多次元移流方程式
  - Vlasov-Poisson方程式系の数値シミュレーション