Vlasovシミュレーションにおける計算スキームの高次精度化

2015/10/30 天体形成研究会

筑波大学宇宙理論研究室　修士2年　土屋　将太郎

背景

銀河・銀河団、宇宙の大規模構造形成の無衝突自己重力系の
数値シミュレーションはN体シミュレーションが主流
しかし、N体シミュレーションでは

・粒子数の制限

・ショットノイズ
・人工的な2体緩和

という欠点がある

その点、無衝突ボルツマン方程式を数値的に解く手法では優位性があるが、計算コスト・必要メモリ容量の膨大さから低次元でしか行われていない

⇒ 計算機の発達により6次元位相空間での数値シミュレーションが可能

先行研究

DIRECT INTEGRATION OF THE COLLISIONLESS BOLTZMANN EQUTION
IN SIX-DIMENSIONAL PHASE SPACE : SELF-GRAVITATING SYSTEM
(Yoshikawa&Umemura&Yoshida 2013)

- 無衝突ボルツマン方程式を直接数値的に解く
- 6次元位相空間（空間3次元＋速度空間3次元）を6本の1次元移流方程式に帰着させて解く

ボルツマン方程式（無衝突）

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

φ : 重力ポテンシャル

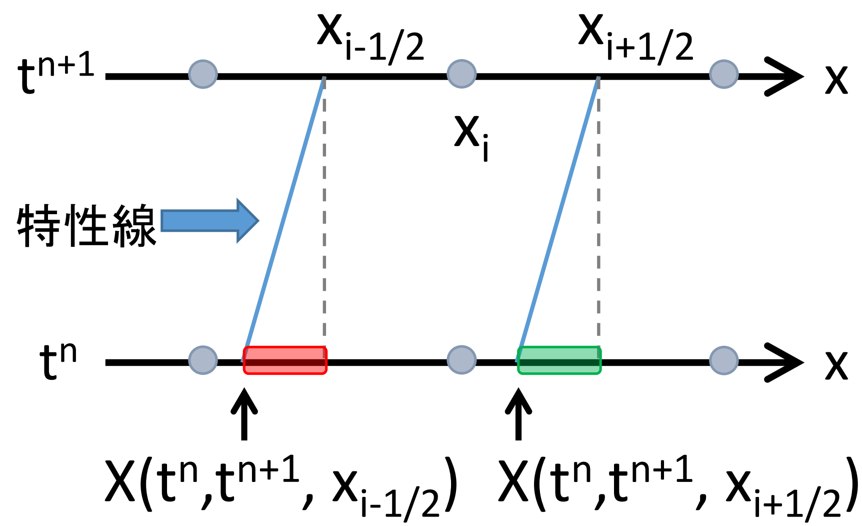
$$\left\{ \begin{aligned} &\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} = 0 && \text{位置空間} \\ &\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial v_x} = 0 && \text{速度空間} \end{aligned} \right.$$

・1次元移流方程式の数値解法にPFCスキーム(Filbet 2001)を採用
- ・無振動性
- ・正値性
- ・最大値の原理　を保証

PFCスキーム

セルの物理量

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



t^{n+1}から1ステップ前のt^nへ特性線をおろしてその交点を$X(t^n, t^{n+1}, x_{i-1/2})$、$X(t^n, t^{n+1}, x_{i+1/2})$とすると

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(x, t^{n+1})\,dx = \int_{X(t^n, t^{n+1}, x_{i-1/2})}^{X(t^n, t^{n+1}, x_{i+1/2})} f(x, t^n)\,dx$$

$$f_i^{n+1} = f_i^n + \Phi^- - \Phi^+$$

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

$$\boxed{\Phi^+} = \frac{1}{\Delta x}\int_{X(t^n, t^{n+1}, x_{i+1/2})}^{x_{i+1/2}} f(x, t^n)\,dx$$

解像度をあげるためには？

・ 単純にメッシュ数を増やせば解像度は上がる

計算コスト＝（1次元方向のメッシュ数）^{6}
→メッシュ数を2倍にするだけで2^6倍増える
メモリは有限で望む解像度までメッシュ数を増やせる保証はない

スキームの高次精度化

PFCスキーム（空間3次精度）にかえてMP5法（空間5次精度）を採用

・PFCスキームと扱うステンシルの数が同じ

・MP5法は同じステンシルを扱うENO（空間3次精度）、WENO（空間5次精度）よりも高い精度

(Suresh & Huynh 1997)

INTRODUCTION

Accurate Monotonicity-Preserving Schemes with Runge-Kutta Time Stepping (Suresh & Huynh 1997)

1次元移流方程式

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

初期条件

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

error

$$\mathrm{L_1 error} = \frac{1}{N}\sum_{j=0}^{N-1} |f_j^{ana} - f_j^{num}|$$

CFL number 0.05

Advection of $\sin^4(\pi x)$ for One Period

Scheme	N	L_∞ error	L_∞ order	L_1 error	L_1 order	CPU time (s)
WENO5	16	2.39(−1)	—	1.07(−1)	—	
	32	3.45(−2)	2.79	1.73(−2)	2.62	
	64	3.51(−3)	3.29	1.75(−3)	3.31	
	128	3.44(−4)	3.35	8.88(−5)	4.30	
	256	1.15(−5)	4.90	2.54(−6)	5.13	16.60
MP5	16	1.17(−1)	—	8.05(−2)	—	
	32	1.40(−2)	3.06	8.14(−3)	3.31	
	64	5.05(−4)	4.80	3.01(−4)	4.76	
	128	1.63(−5)	4.96	9.74(−6)	4.95	
	256	5.25(−7)	4.95	3.14(−7)	4.96	8.64

CFL number 0.4

Advection of $\sin^4(\pi x)$ for One Period

Scheme	N	L_∞ error	L_∞ order	L_1 error	L_1 order	CPU time (s)
WENO5	16	2.39(−1)	—	1.07(−1)	—	
	32	3.74(−2)	2.68	1.87(−2)	2.52	
	64	3.26(−3)	3.52	1.79(−3)	3.39	
	128	3.00(−4)	3.44	1.11(−4)	4.01	
	256	1.25(−5)	4.58	6.17(−6)	4.17	2.35
MP5	16	1.21(−1)	—	8.01(−2)	—	
	32	1.77(−2)	2.77	1.03(−2)	2.96	
	64	1.10(−3)	4.01	6.15(−4)	4.06	
	128	9.50(−5)	3.54	5.05(−5)	3.61	
	256	1.04(−5)	3.19	5.42(−6)	3.22	1.36

・error、CPU timeともにMP5の方がよい

MP5法

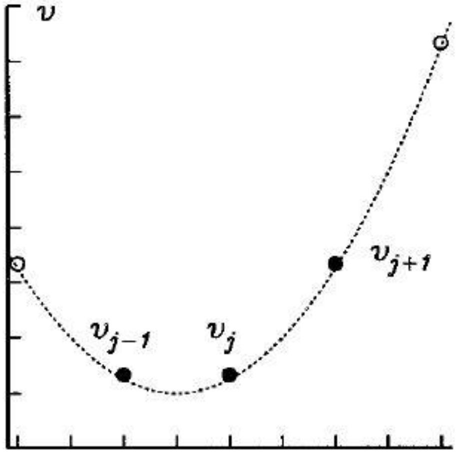
Accurate Monotonicity-Preserving Schemes with Runge-Kutta Time Stepping (Suresh & Huynh 1997)

セルの物理量

$$v_j^n = \frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} v(x,t^n)\,dx$$

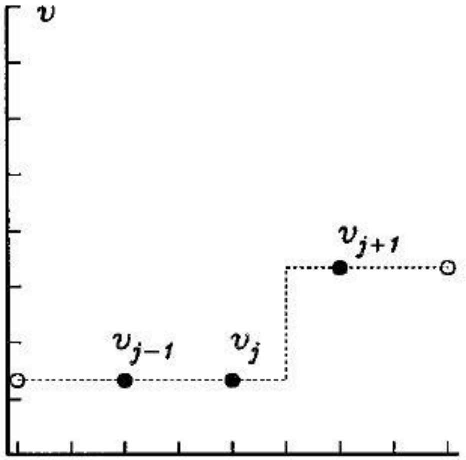
補間値は5点のステンシルから

$$v_{j+1/2}^L = \frac{2v_{j-2} - 13v_{j-1} + 47v_j + 27v_{j+1} - 3v_{j+2}}{60}$$



・スムーズな領域では5次精度
→不連続面付近で数値振動が生じる
→TVDスキームを採用することでこの数値振動を回避

・3点のセルの情報だけでは滑らかな領域なのか不連続面なのか判定できない
→5点のセル情報を用いることで判定が可能になる



MP5法

・単調性を維持するよう、補間値を許容範囲に収まるように決定する

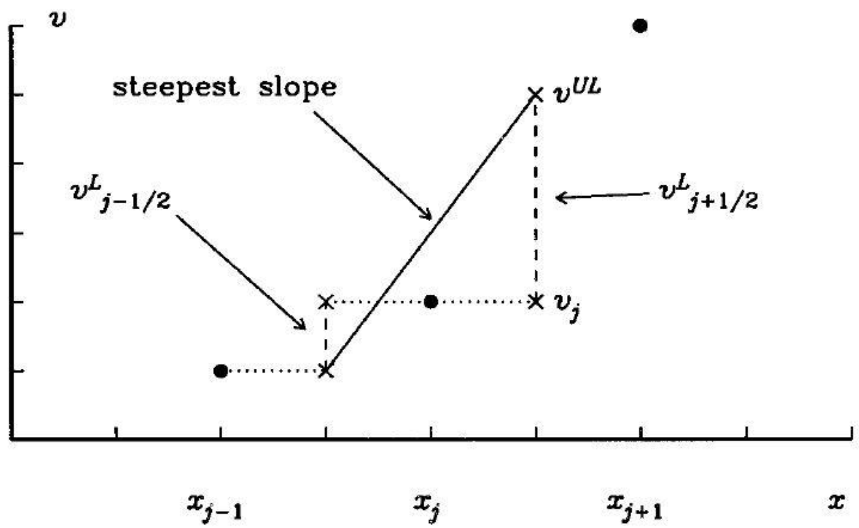
upper limit

$$v^{UL} = v_j + \alpha(v_j - v_{j-1})$$

・α = 4 に設定

monotonicity preserving

$$\begin{aligned} v^{MP} &= \mathrm{median}(v_j, v_{j+1}, v^{UL}) \\ &= v_j + \mathrm{minmod}[v_{j+1} - v_j, \alpha(v_j - v_{j-1})] \end{aligned}$$



補間値はv_j と v^{MP} 間に収まる

$$v^L_{j+1/2} \leftarrow \mathrm{median}\left(v^L_{j+1/2}, v_j, v^{MP}\right)$$

極値付近で精度が落ちてしまう

・median関数は3つの引数の中間値を返す

・minmod関数はmedian関数でのひとつの引数が0の場合と等しい

$$\mathrm{minmod}[x, y] = \mathrm{median}(x, y, 0)$$

→ x , y で0に近い方の値を返す

x , y が0をまたいでる場合は0の値を返す

MP5法

・極値付近の扱い①

左と右から直線的に外挿

$$\begin{cases} v^{FL} = v_j + \tfrac{1}{2}(v_j - v_{j-1}) \\ v^{FR} = v_{j+1} + \tfrac{1}{2}(v_{j+1} - v_{j+2}) \end{cases}$$

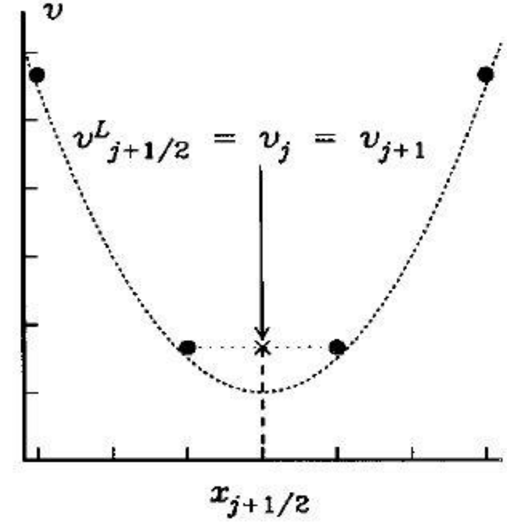
average

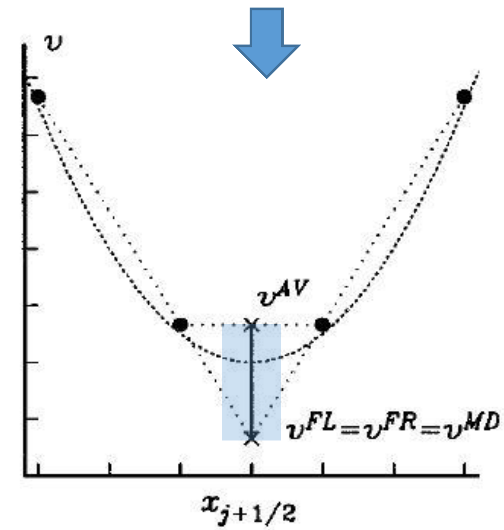
$$v^{AV} = \tfrac{1}{2}(v_j + v_{j+1})$$

median

$$\begin{aligned} v^{MD} &= \mathrm{median}(v^{AV}, v^{FL}, v^{FR}) \\ &= v^{AV} - \frac{1}{2} d^{MM}_{j+1/2} \end{aligned}$$

$$\begin{cases} d^{MM}_{j+1/2} = \mathrm{minmod}\,(d_j, d_{j+1}) \\ d_j = v_{j-1} + v_{j+1} - 2v_j \end{cases}$$





$$v^L_{j+1/2} \in I[v_j, v_{j+1}, v^{MD}]$$

→補間値がこの範囲内に落ち着く

MP5法

・極値付近の扱い②

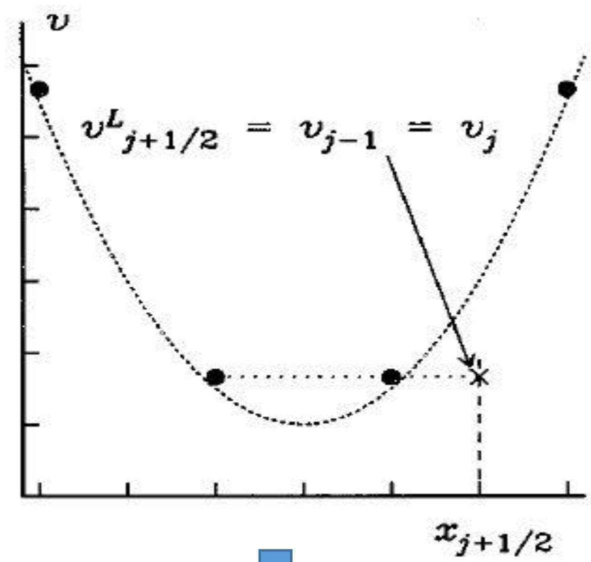
large curvature

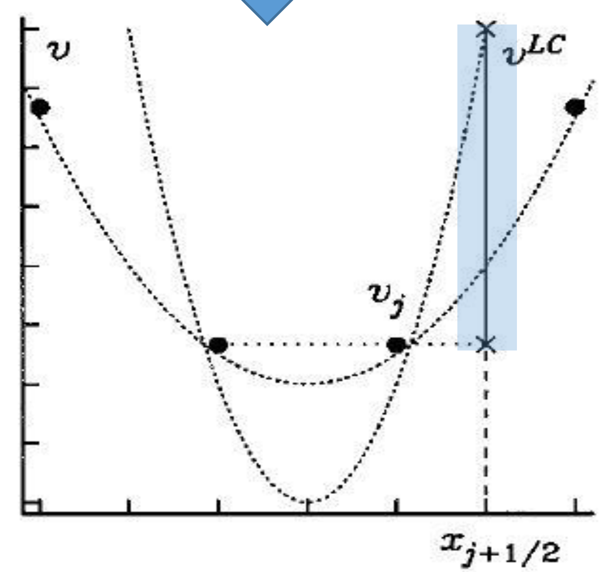
$$v^{LC} = v_j + \tfrac{1}{2}(v_j - v_{j-1}) + \tfrac{4}{3}d^{MM}_{j-1/2}$$

$$v^L_{j+1/2} \in I[v_j, v^{UL}, v^{LC}]$$

→補間値がこの範囲内に落ち着く

・3点のステンシルで制約していたものをステンシルを5点に増やすことで緩和させ極値付近をより正確にとらえることができる





MP5法

・時間積分には3段のTVDルンゲクッタ法

$$w^{(0)} = v^n$$

$$w^{(1)} = w^{(0)} + \sigma L(w^{(0)})$$

$$w^{(2)} = \tfrac{3}{4}w^{(0)} + \tfrac{1}{4}(w^{(1)} + \sigma L(w^{(1)}))$$

$$w^{(3)} = \tfrac{1}{3}w^{(0)} + \tfrac{2}{3}(w^{(2)} + \sigma L(w^{(2)}))$$

$$v^{n+1} = w^{(3)}$$

Spatial operator

$$L(v)_j = -(v_{j+1/2} - v_{j-1/2})$$

CFL number

$$\sigma = a\frac{\Delta t}{\Delta x}$$

MP5法は空間5次精度、時間3次精度

少なくても3次精度以上は期待される

MP5法

・MP5法で保証されているのは単調性、無振動性

⇒ 正値性を保証するような新たな制限が必要

Positivity-preserving method for high-order conservative schemes solving compressible Euler equations

(Hu & Adams & Shu 2013)

による HAS limiter (positive limiter) を採用

advection equation

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0\ , \quad u(x) > 0$$

離散化

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} &= u_i^n - \nu(u_{i+1/2}^n - u_{i-1/2}^n) \\ &= \frac{1}{2}\left\{(u_i^n - 2\nu u_{i+1/2}^n) + (u_i^n + 2\nu u_{i-1/2}^n)\right\} \end{aligned}$$

$$\nu = a\frac{\Delta t}{\Delta x} \quad : \ \mathrm{CFL\ number}$$

修正後

$$u_{i+1/2}^{\mathrm{HAS}} = \theta(u_{i+1/2}^{\mathrm{MP5}} - u_i^n) + u_i^n$$

1次風上差分

・θ の値の取り方によって
1次風上差分が含まれてくる

HAS limiter (positive limiter)

$$\theta = \min\left\{\frac{u_i^n}{u_i^n - u_{\min}}\ ,\ 1\right\} \qquad u_{\min} = \left\{\boxed{u_i^n - 2\nu u_{i+1/2}^n}\ ,\ \boxed{u_{i+1}^n + 2\nu u_{i+1/2}^n}\ ,\ 0\right\}$$

・ $\boxed{}$ が負になるとθは0≦θ<1の値をもつ

数学的証明

$\nu > 0 \Leftrightarrow a > 0$ で $u_i^n - 2\nu u_{i+1/2}^{\mathrm{MP5}} < 0$

$u_i^{n+1} < 0$ の場合を考える

$$\Rightarrow \begin{cases} u_{\min} = u_i^n - 2\nu u_{i+1/2}^{\mathrm{MP5}} \\ \theta = \dfrac{u_i^n}{u_i^n - (u_i^n - 2\nu u_{i+1/2}^{\mathrm{MP5}})} = \dfrac{u_i^n}{2\nu u_{i+1/2}^{\mathrm{MP5}}} \end{cases}$$

修正後の境界の物理量は

$$u_{i+1/2}^{\mathrm{HAS}} = \frac{u_i^n}{2\nu}\left(1 + 2\nu - \frac{u_i^n}{u_{i+1/2}^{\mathrm{MP5}}}\right)$$

離散化した式に代入して

$$u_i^{n+1} = \frac{1}{2}\left\{(u_i^n - 2\nu u_{i+1/2}^{\mathrm{HAS}}) + (u_i^n + 2\nu u_{i-1/2}^{\mathrm{MP5}})\right\}$$

$$= \frac{1}{2}\left\{(1 - 2\nu)u_i^n + \frac{u_i^{n\,2}}{u_{i+1/2}^{\mathrm{MP5}}} + 2\nu u_{i-1/2}^{\mathrm{MP5}}\right\}$$

$\Rightarrow$ $0 < \nu \leq \dfrac{1}{2}$ の条件の下で、$u_i^{n+1} > 0$

CFL条件をまとめると

$$\begin{cases} a > 0 \rightarrow \quad 0 < \nu \leq \dfrac{1}{2} \\ a < 0 \rightarrow \quad -\dfrac{1}{2} \leq \nu < 0 \end{cases}$$

advection test 正値性の確認

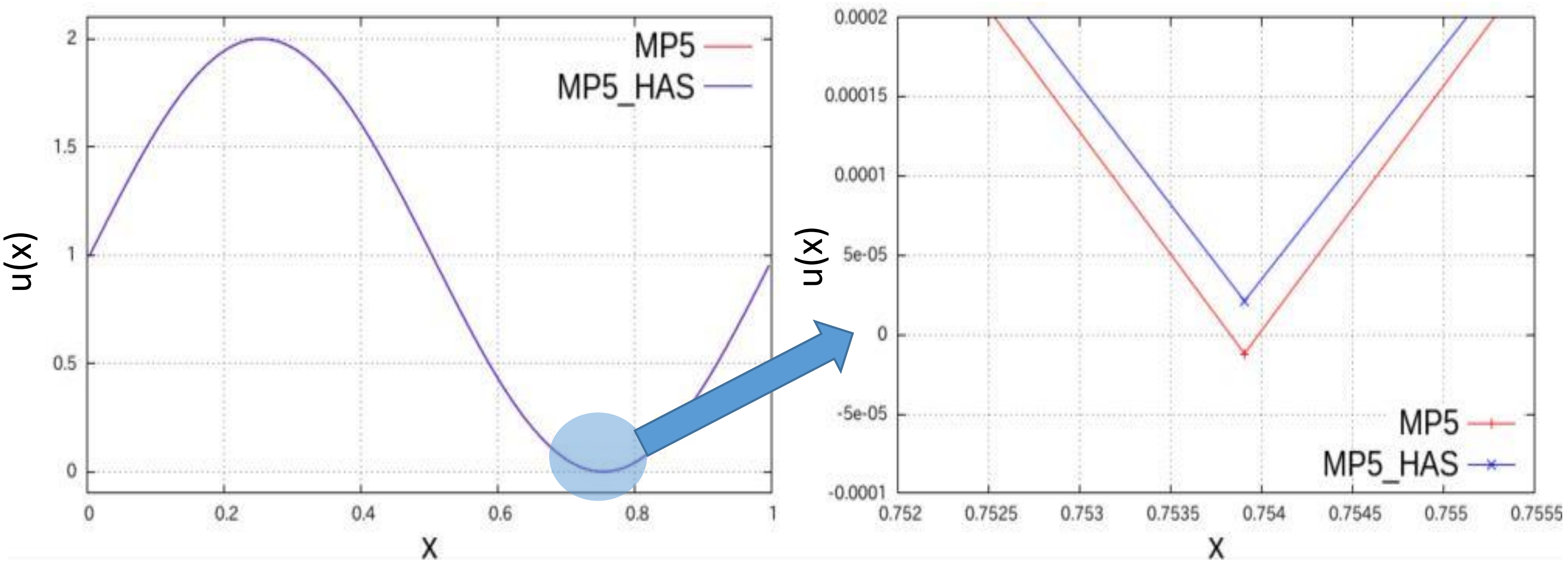
初期条件

$$u(x,0) = \sin(2\pi x) + 1$$

・移流速度 0.5　・CFL 0.1

・$\Delta t = 1.5625 * 10^{-3}$　・4ステップ目

・128メッシュ



・HAS limiterによりnegative からpositive に補正されている

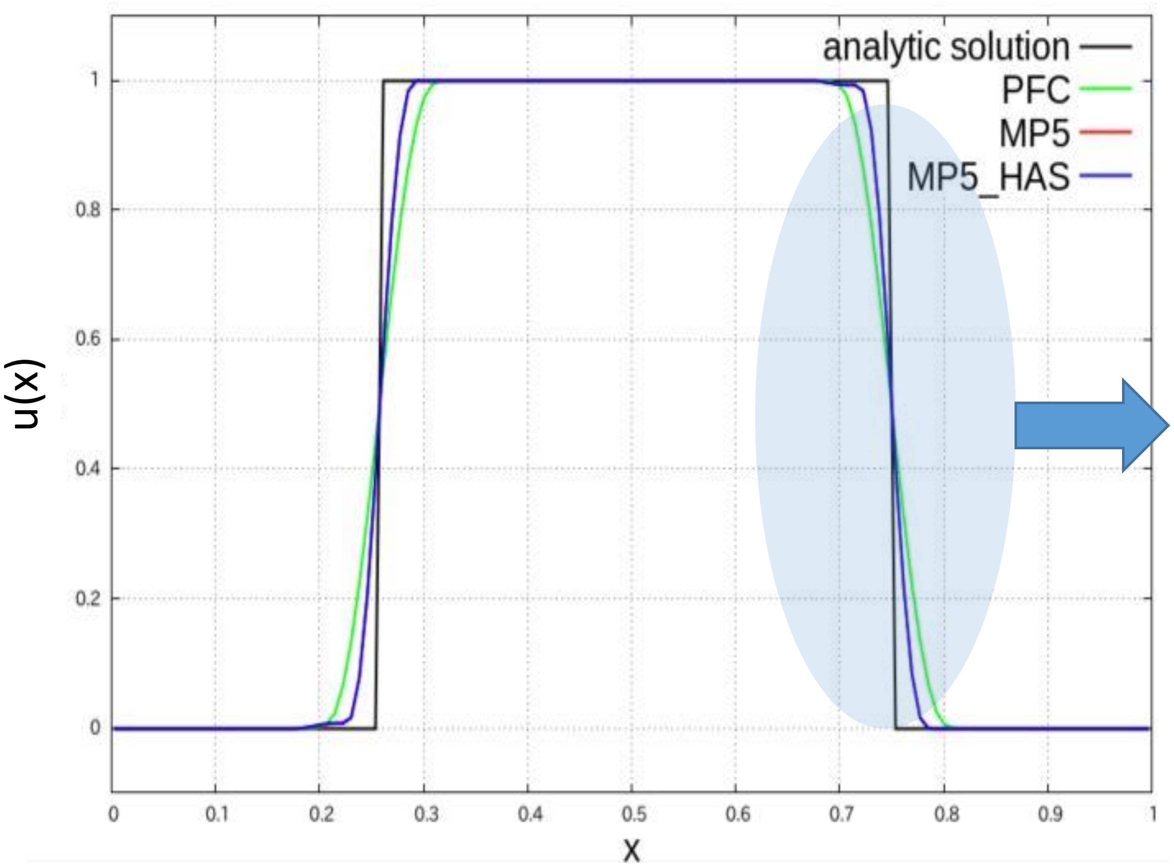
advection test（矩形波）

Advection equation

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a\frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

初期条件 : 矩形波

$$u(x,0) = \begin{cases} 1 & 0.25 < x < 0.75 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$



- 移流速度 0.5
- CFL 0.1
- 128mesh
- t=8.0

- MP5、MP5_HASともにPFCよりも数値拡散が小さい

advection test（矩形波）

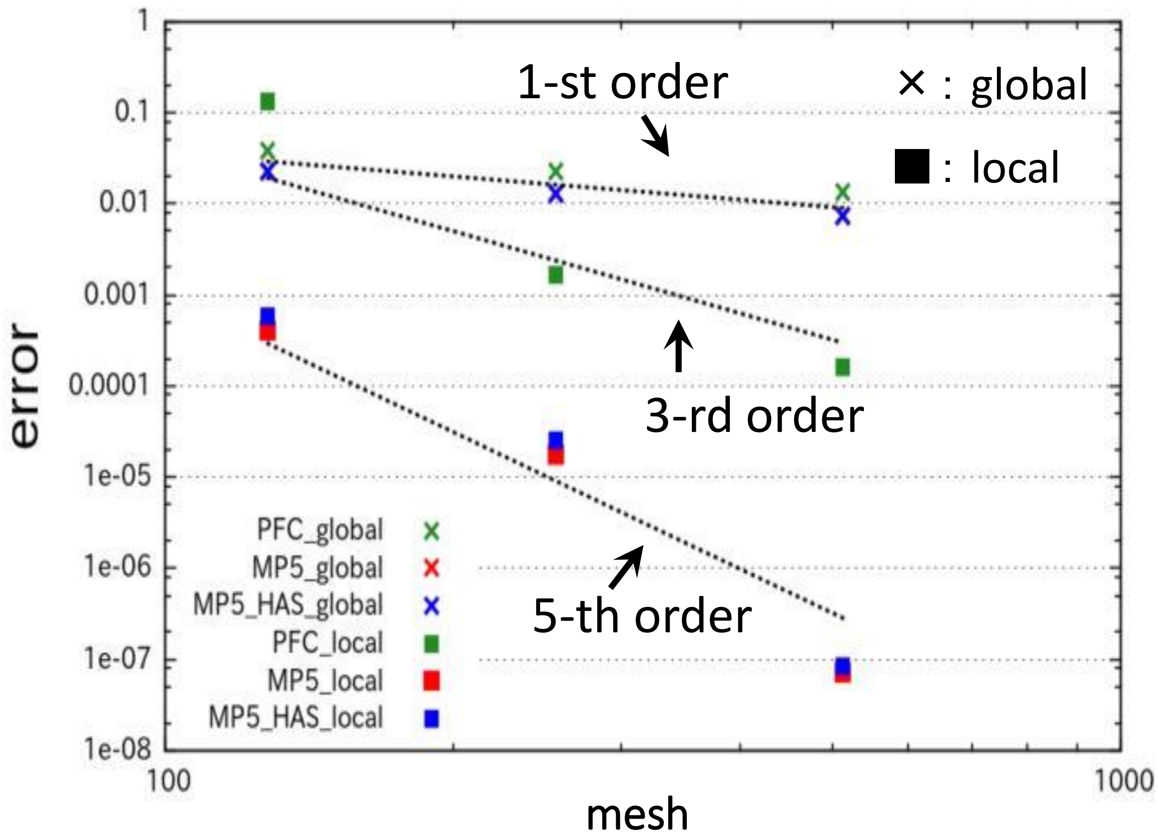
・Errorの評価

$$\varepsilon_{\mathrm{global}} = \frac{1}{N}\sum_{j=0}^{N-1}\left|u_j^{\mathrm{ana}} - u_j^{\mathrm{num}}\right| \quad \varepsilon_{\mathrm{local}} = \left|u^{\mathrm{ana}}(a,t) - u^{\mathrm{num}}(a,t+b\Delta t)\right|$$

初期条件：矩形波

$$u(x,0) = \begin{cases} 1 & 0.25 < x < 0.75 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

・移流速度 0.5　・CFL 0.1　・t=8.0



- どのスキームもglobal errorは1次精度
  → slope limiter が効いているため
- local error は
  PFC : 3次精度
  MP5、MP5_HAS : 5次精度
- positive limiter がほとんど効いていないので、MP5、MP5_HASの精度はほとんど変わらない

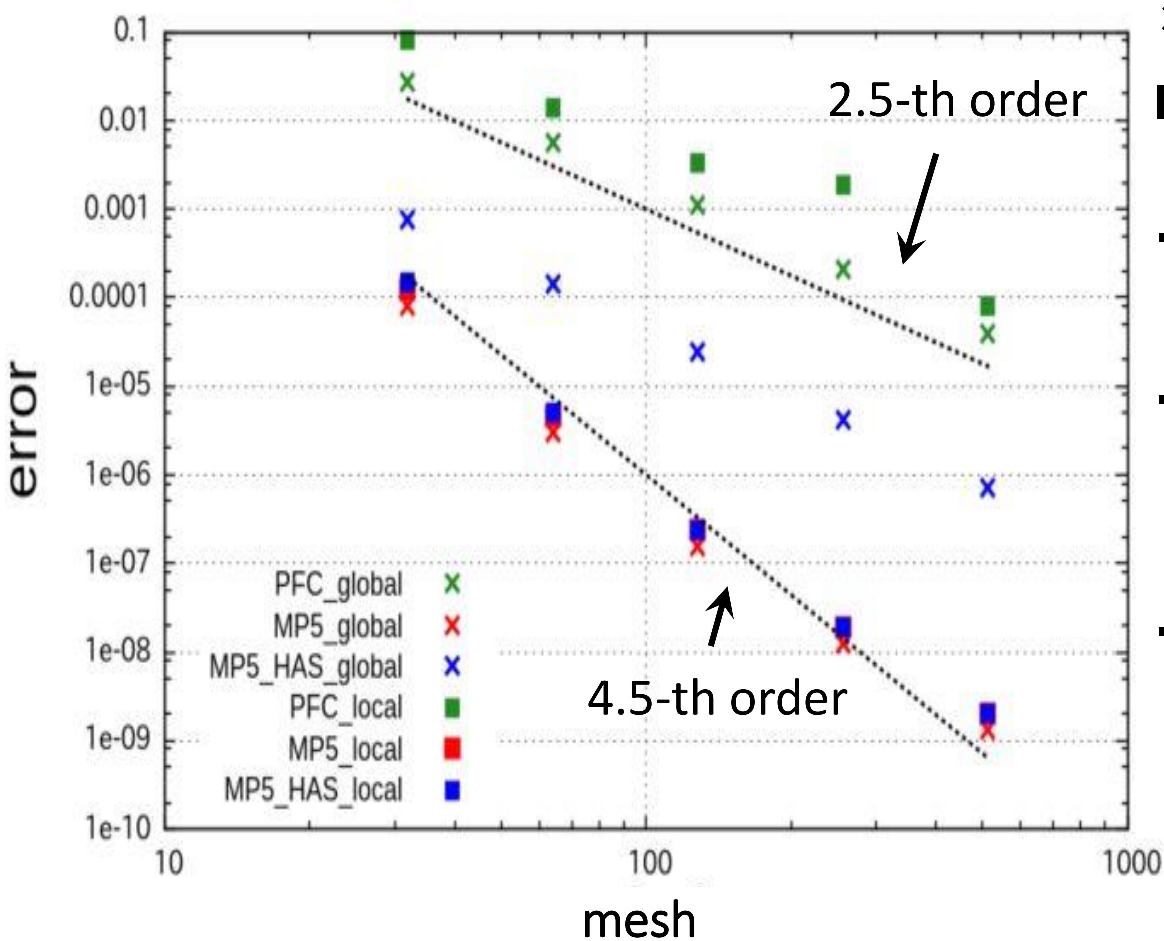
advection test（sin波）

・Errorの評価

初期条件：sin波

$$u(x,0) = \sin(2\pi x) + 1$$

・移流速度 0.5　・CFL 0.1　・t=8.0



×：global

■：local

・連続的なので local、global にerrorの差はあまりない

・global error は
PFC、MP5_HAS : 2.5次精度
MP5 : 4.5次精度

・positive limiter が効いているため、MP5_HASの精度が落ちている

(1+1)-d Vlasov simulation

(1+1)-d Vlasov Poisson equation

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v\frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial \phi}{\partial x}\frac{\partial f}{\partial v} = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \dfrac{\partial f}{\partial t} + v\dfrac{\partial f}{\partial x} = 0 & \text{(x-space)} \\ \dfrac{\partial f}{\partial t} - \dfrac{\partial \phi}{\partial x}\dfrac{\partial f}{\partial v} = 0 & \text{(v-space)} \end{cases}$$

・2本の1次元移流方程式に分割

$$\Delta^2\phi = 4\pi G(\rho - \overline{\rho}) = 4\pi G\left(\int_0^\infty f dv - \overline{\rho}\right)$$

・重力ポテンシャルはフーリエ変換による畳み込み法

$\overline{\rho}$: mean density

σ : velocity dispersion

A : amplitude

初期条件

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

Jeans wavenumber

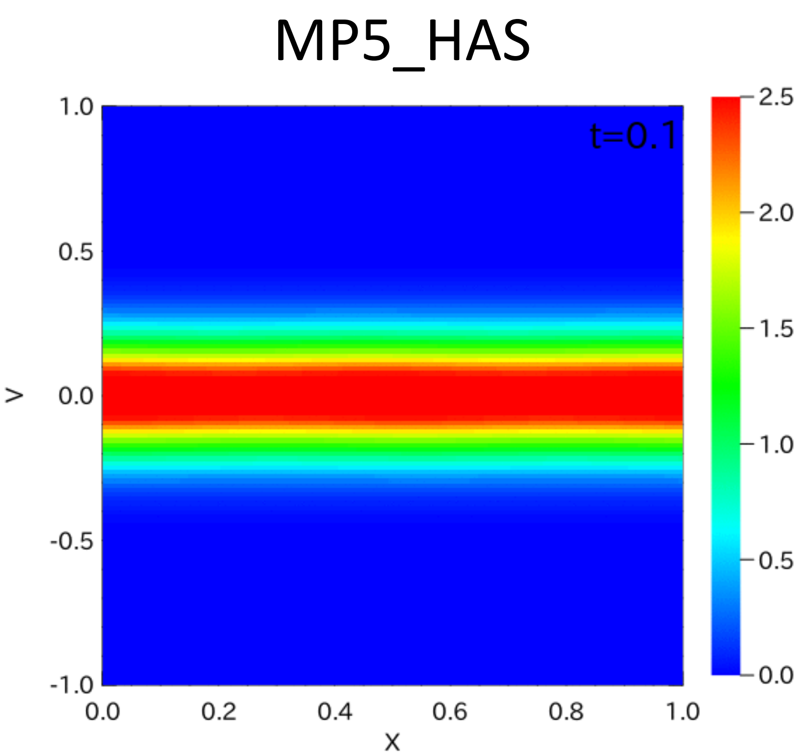
$$k_J = \left(\frac{4\pi G\overline{\rho}}{\sigma^2}\right)^{1/2}$$

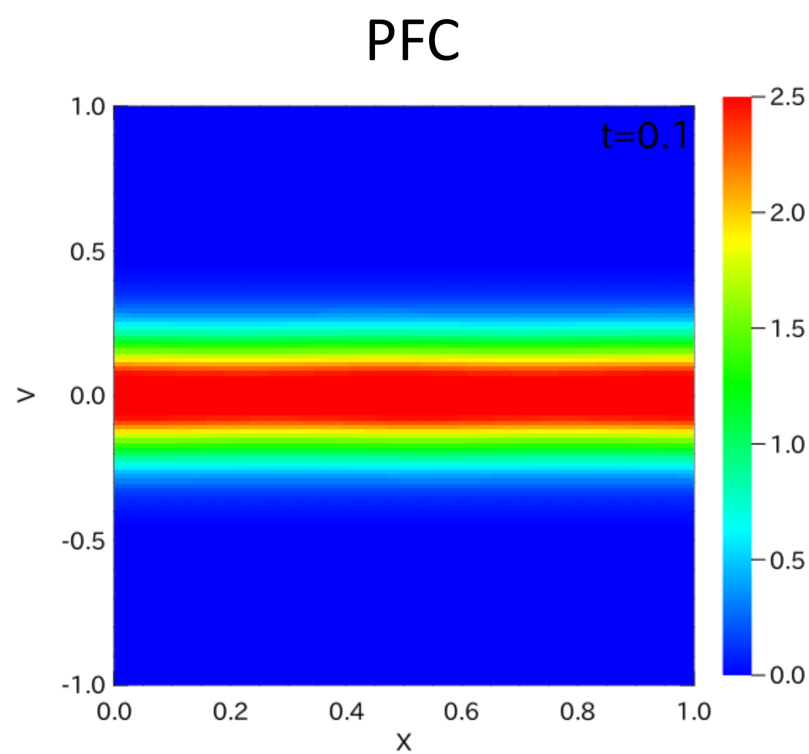
$k < k_J \Rightarrow$ 重力不安定性

$k > k_J \Rightarrow$ Landau damping

MP5_HAS と PFC の比較

- t=8.0まで
- x空間、v空間ともに128メッシュ
- amplitude A = 0.01
- k/k_J = 0.5 → 重力不安定性によるゆらぎの成長

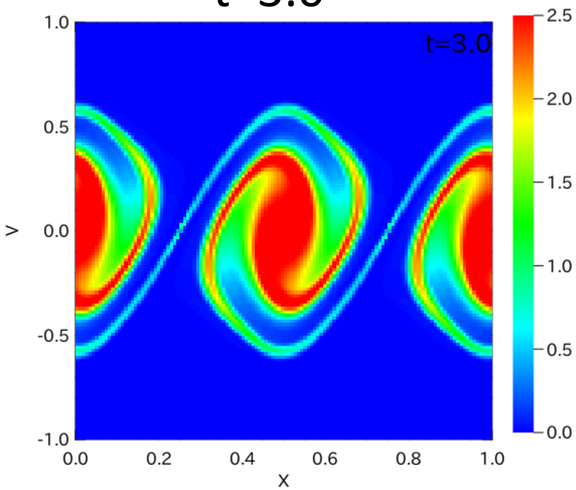




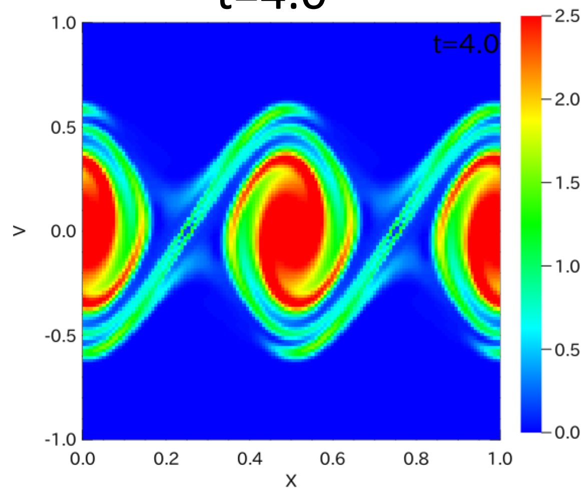
各時刻での位相空間

MP5_HAS

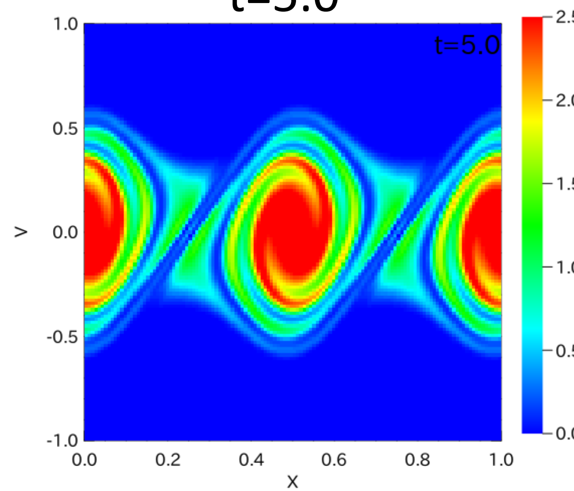
t=3.0



t=4.0

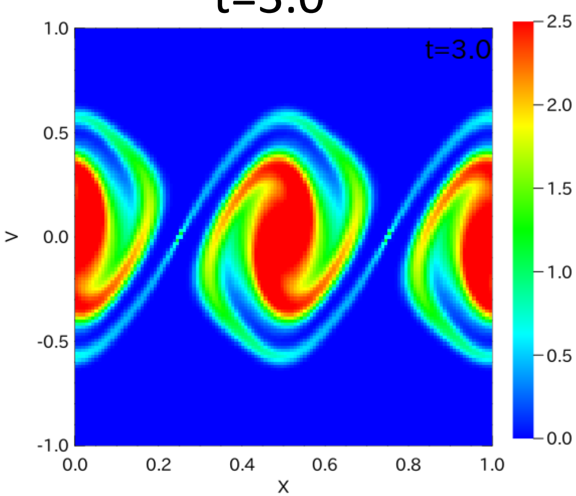


t=5.0

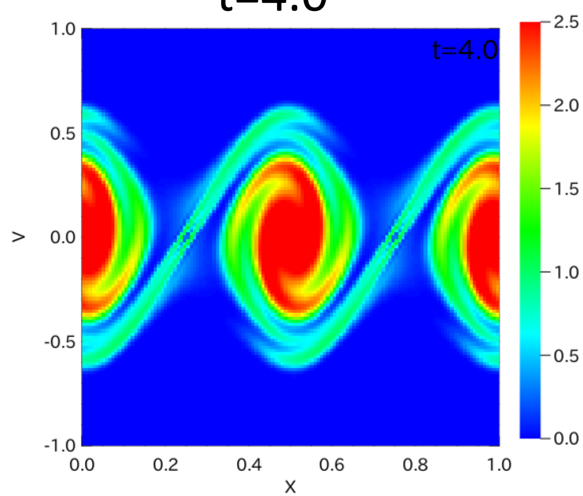


PFC

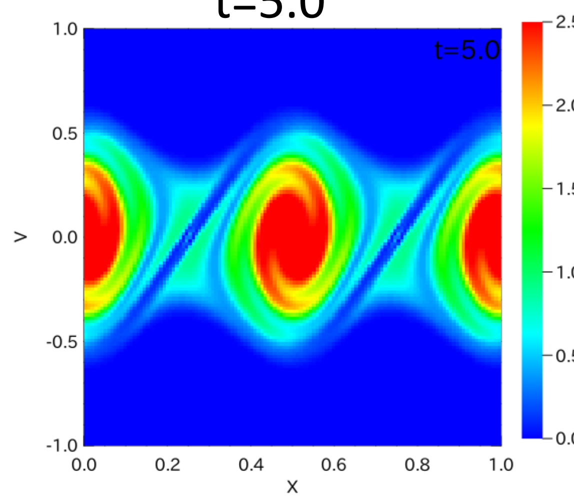
t=3.0



t=4.0



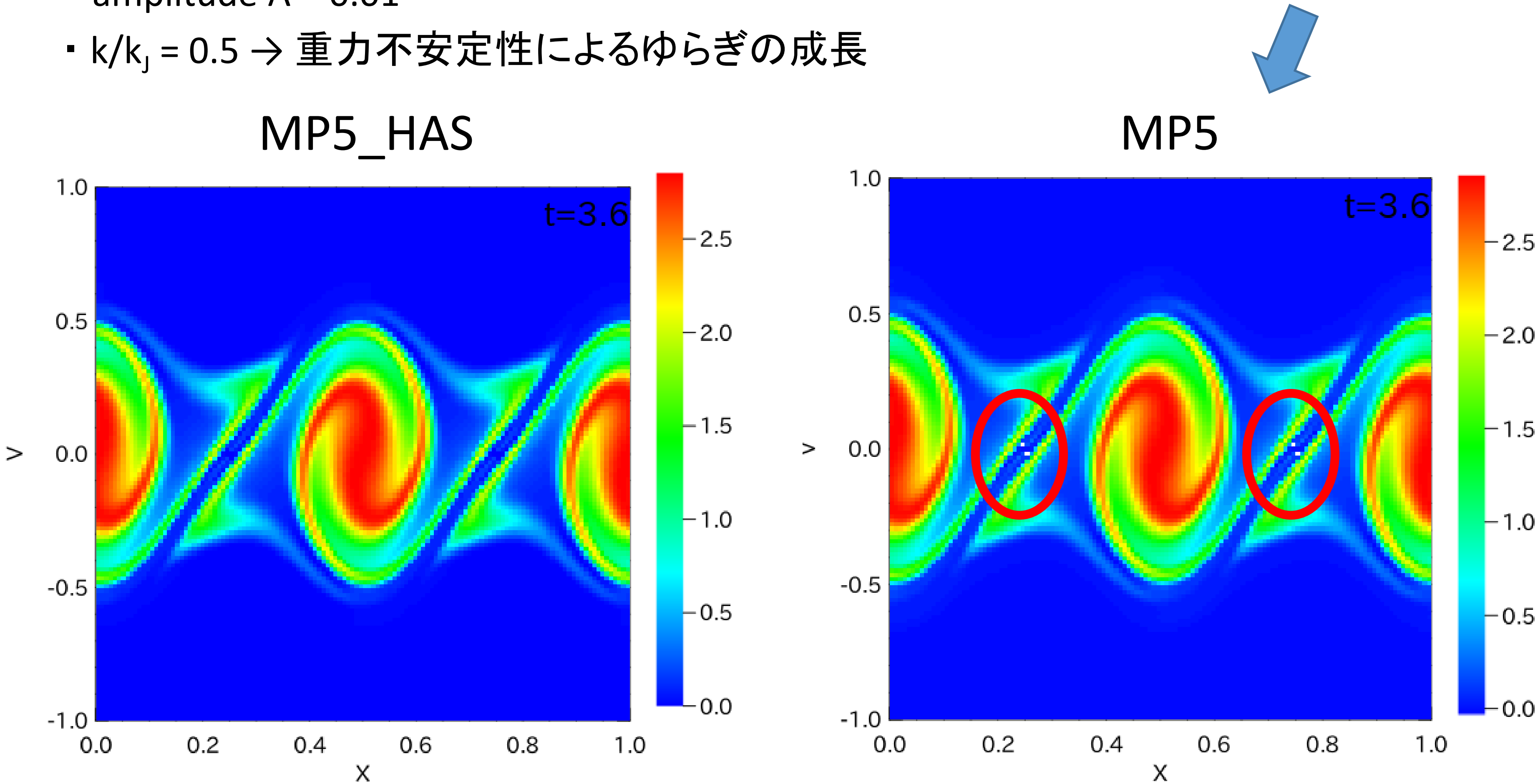
t=5.0



(1+1)-d Vlasov simulation 正値性の確認

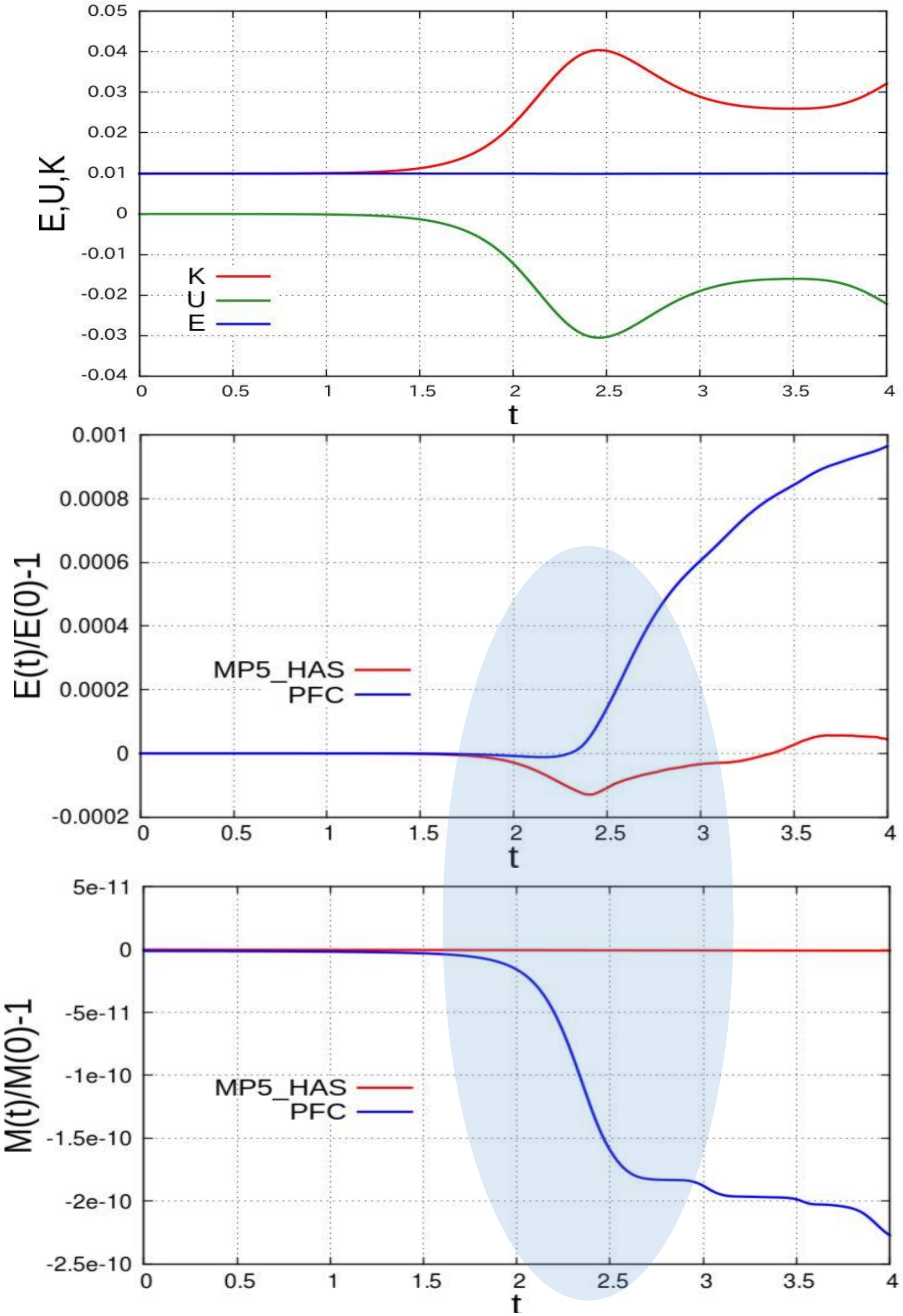
- t=3.6
- x空間、v空間ともに128メッシュ
- amplitude A = 0.01
- k/k_J = 0.5 → 重力不安定性によるゆらぎの成長

- 白い部分が
  負になっているところ



- Vlasov シミュレーションにおいてもpositive limiterによりnegative
  から positive に補正されている

(1+1)-d Vlasov simulation



potential energy

$$U(t) = \frac{1}{2}\int \rho(x)\phi(x)dx$$

kinematic energy

$$K(t) = \frac{1}{2}\int\int f(x,v,t)v^2 dvdx$$

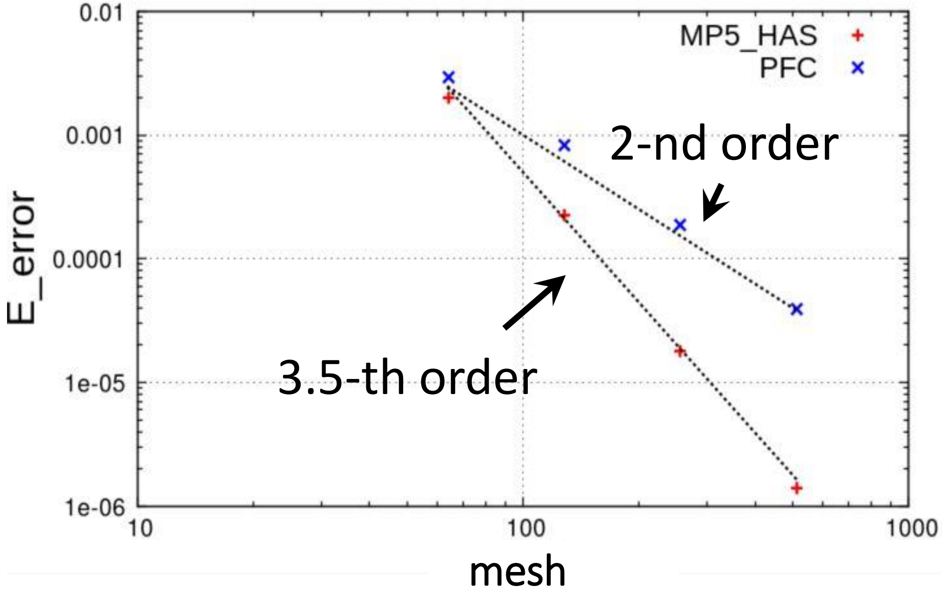
mass

$$M(t) = \int\int f(x,v,t)dvdx$$

- 質量保存、エネルギーともに MP5_HASの方が高い精度
- エネルギー誤差においてt=2.0付近で誤差が大きくなる
- PFCスキームでは質量が段階的に減少
  →数値拡散の影響？

1-d Vlasov simulation

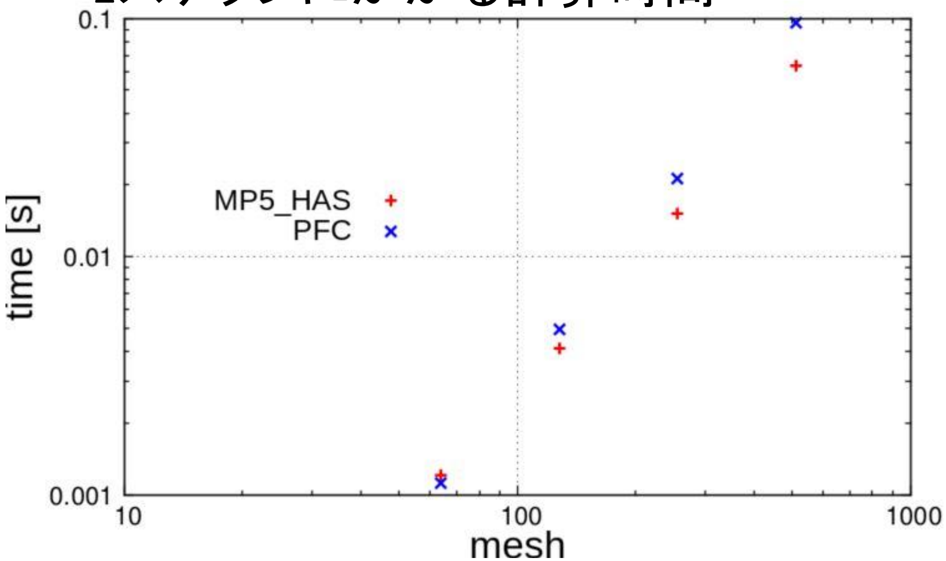
・メッシュ数を変えたときのエネルギー誤差



・t=4.0までのエネルギー誤差

・PFC : 2次精度
MP5_HAS : 3.5次精度

・1ステップにかかる計算時間



mesh	MP5_HAS [ms]	PFC [ms]
64	1.208182	1.124187
128	4.124856	4.956808
256	15.22956	21.26067
512	63.33457	96.25803

・MP5_HASの方がPFCよりも1ステップあたりの計算時間が短い

まとめ

・MP5法による (1+1)-d Vlasov シミュレーション

⇒ 位相空間で細かい所まで表現

⇒ 質量保存、エネルギー誤差ともにPFCスキームより高い精度

⇒ 1ステップの計算時間は PFC より短い

・MP5法で計算途中に分布関数が負になるところをHAS limiter を採用することで正値性を保つことができた

今後

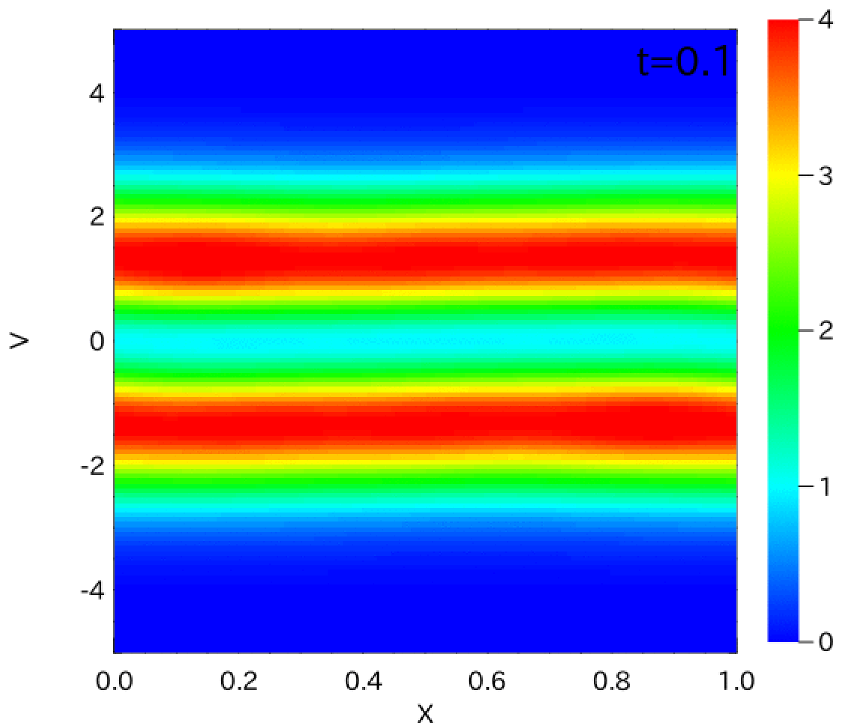
・t=2 付近で質量・エネルギー誤差が大きくなる原因の理解

（・MP5法によるVlasov シミュレーションを2次元に拡張）

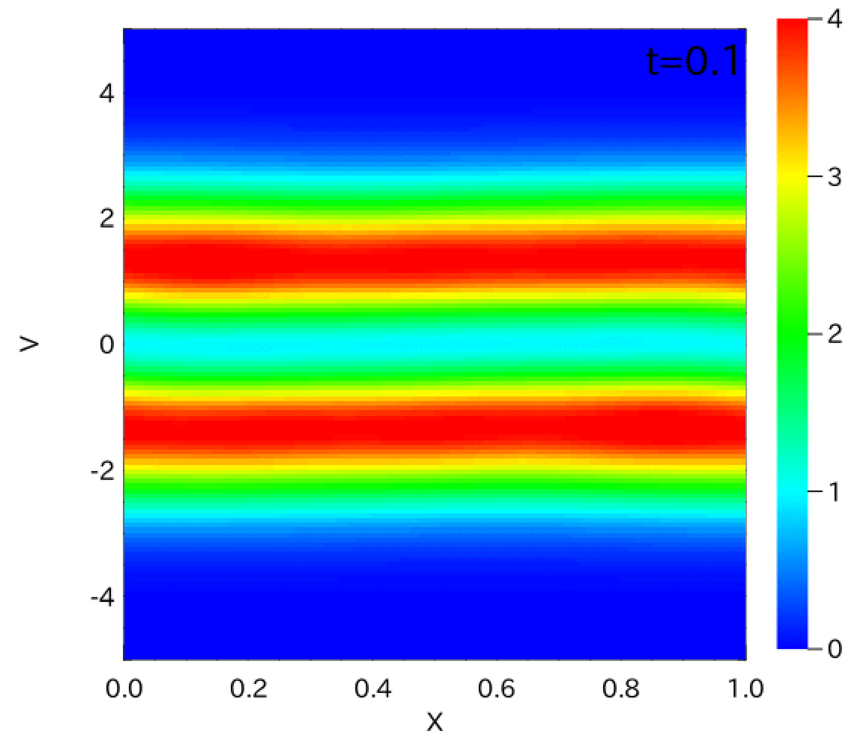
MP5_HAS と PFC の比較

- 2流不安定性
  - t=8.0まで
  - x空間、v空間ともに128メッシュ
  - amplitude = 0.01
  - 互いに逆向きの速度を与える

MP5_HAS



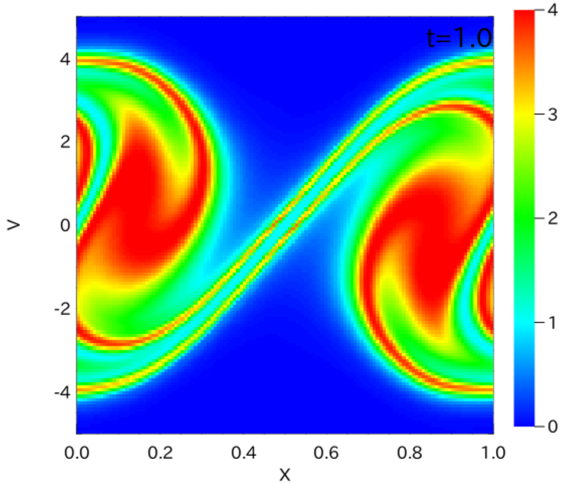
PFC



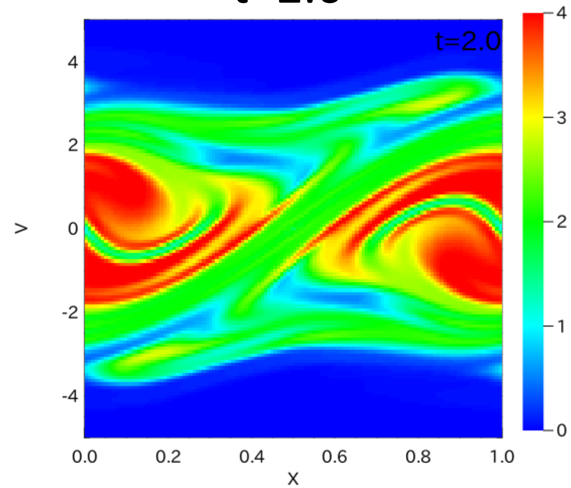
各時刻での位相空間

MP5_HAS

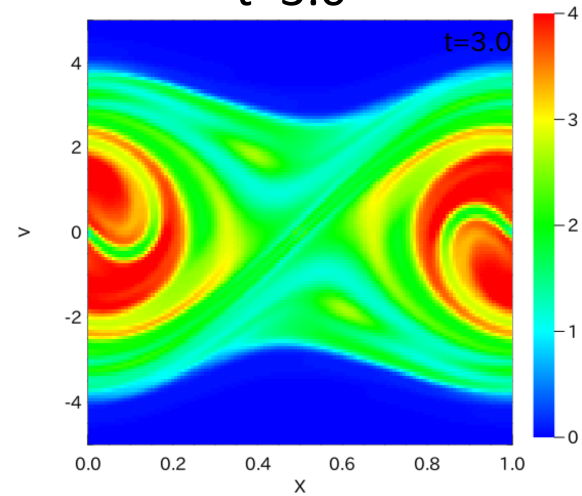
t=1.0



t=2.0

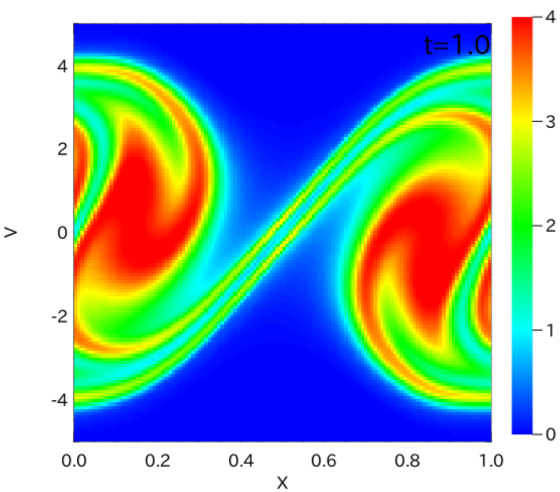


t=3.0

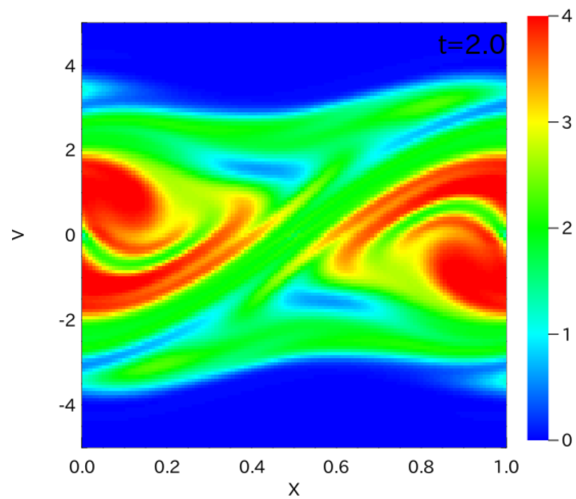


PFC

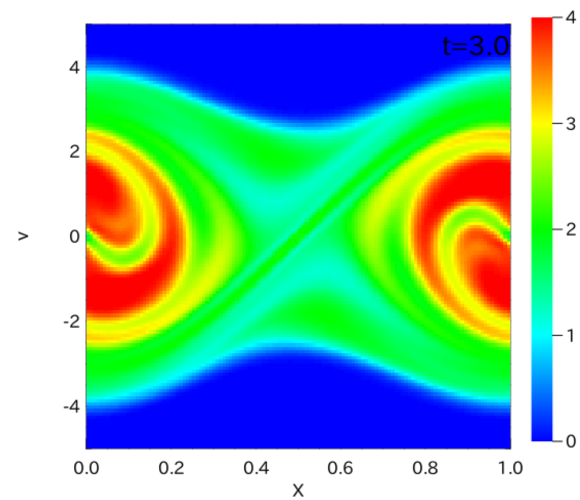
t=1.0



t=2.0



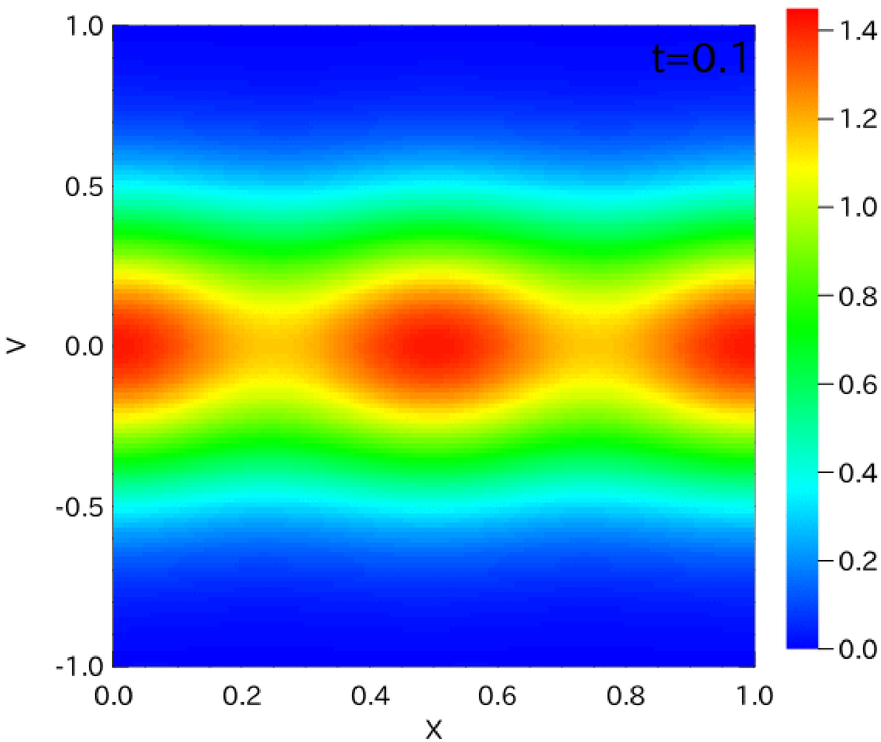
t=3.0



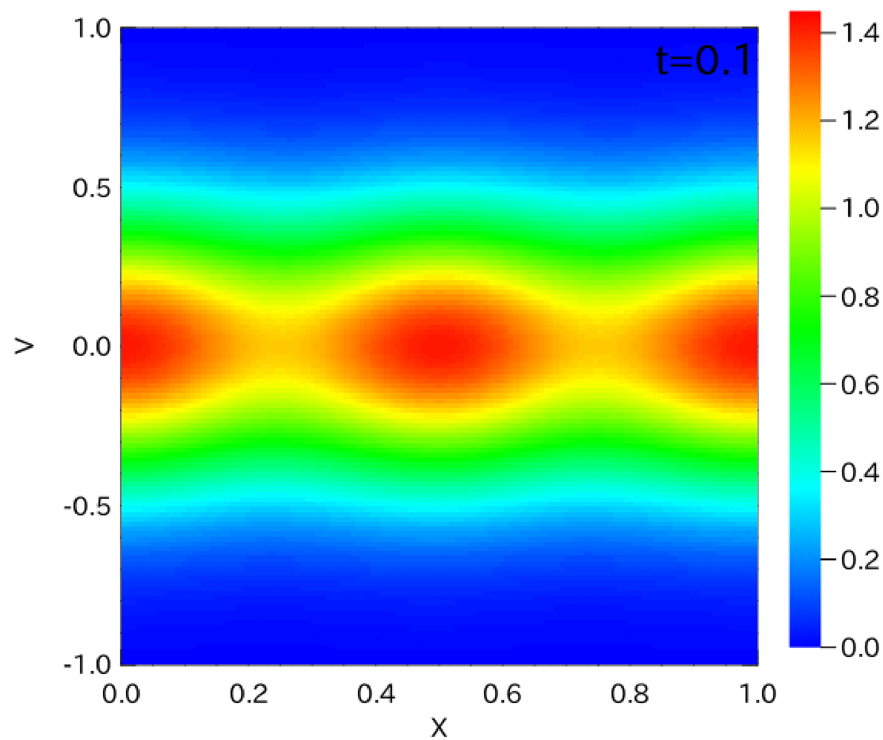
MP5_HAS と PFC の比較

- t=8.0まで
- x空間、v空間ともに128メッシュ
- amplitude = 0.1
- k/k_J = 1.1 → Landau dampingによるゆらぎの減衰

MP5_HAS



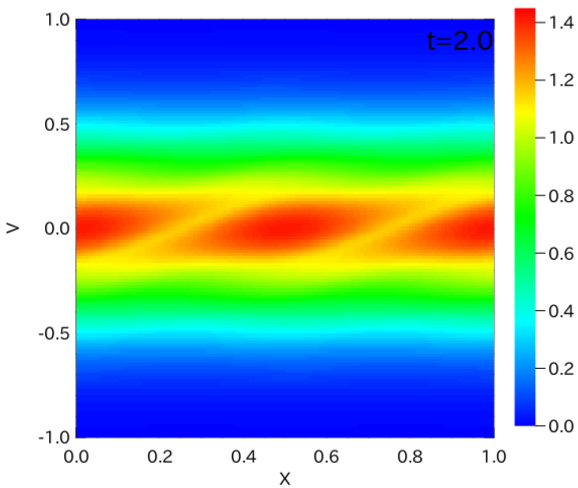
PFC



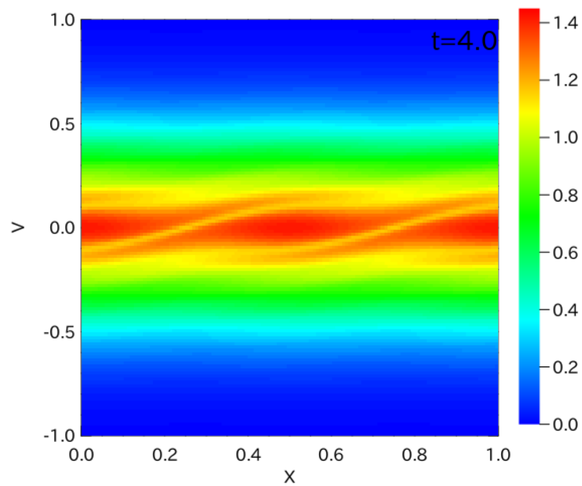
各時刻での位相空間

MP5_HAS

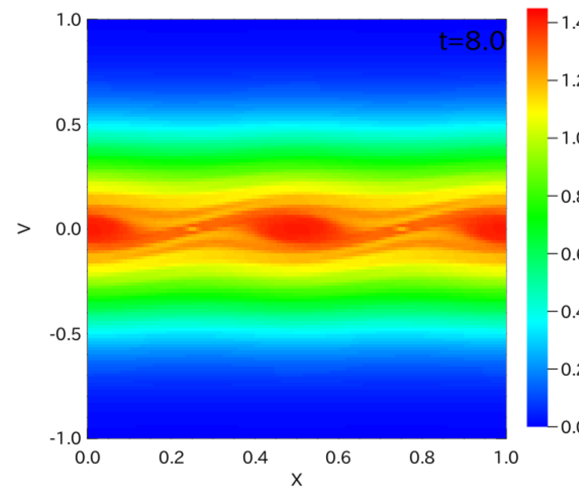
t=8.0



t=4.0

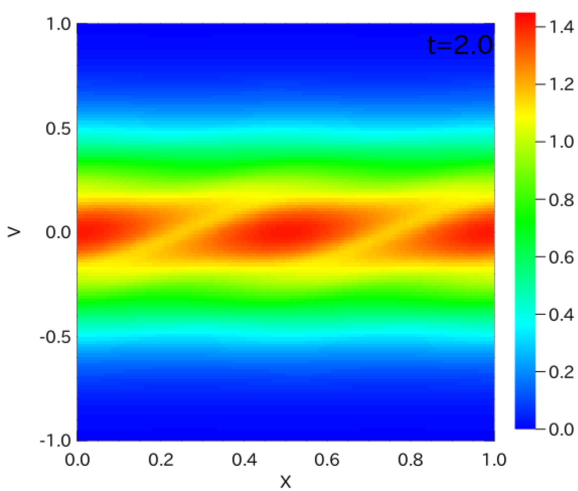


t=8.0

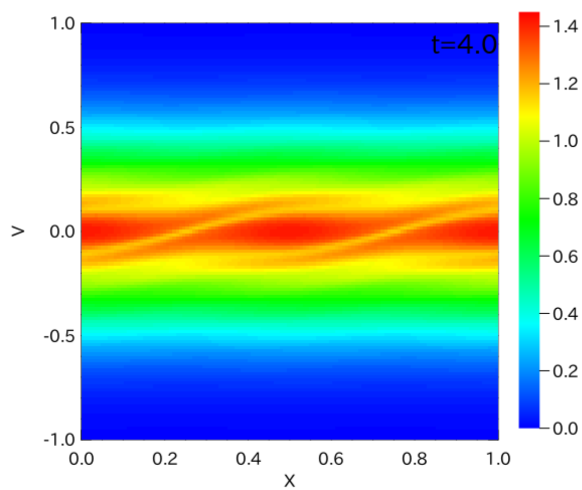


PFC

t=2.0



t=4.0



t=8.0