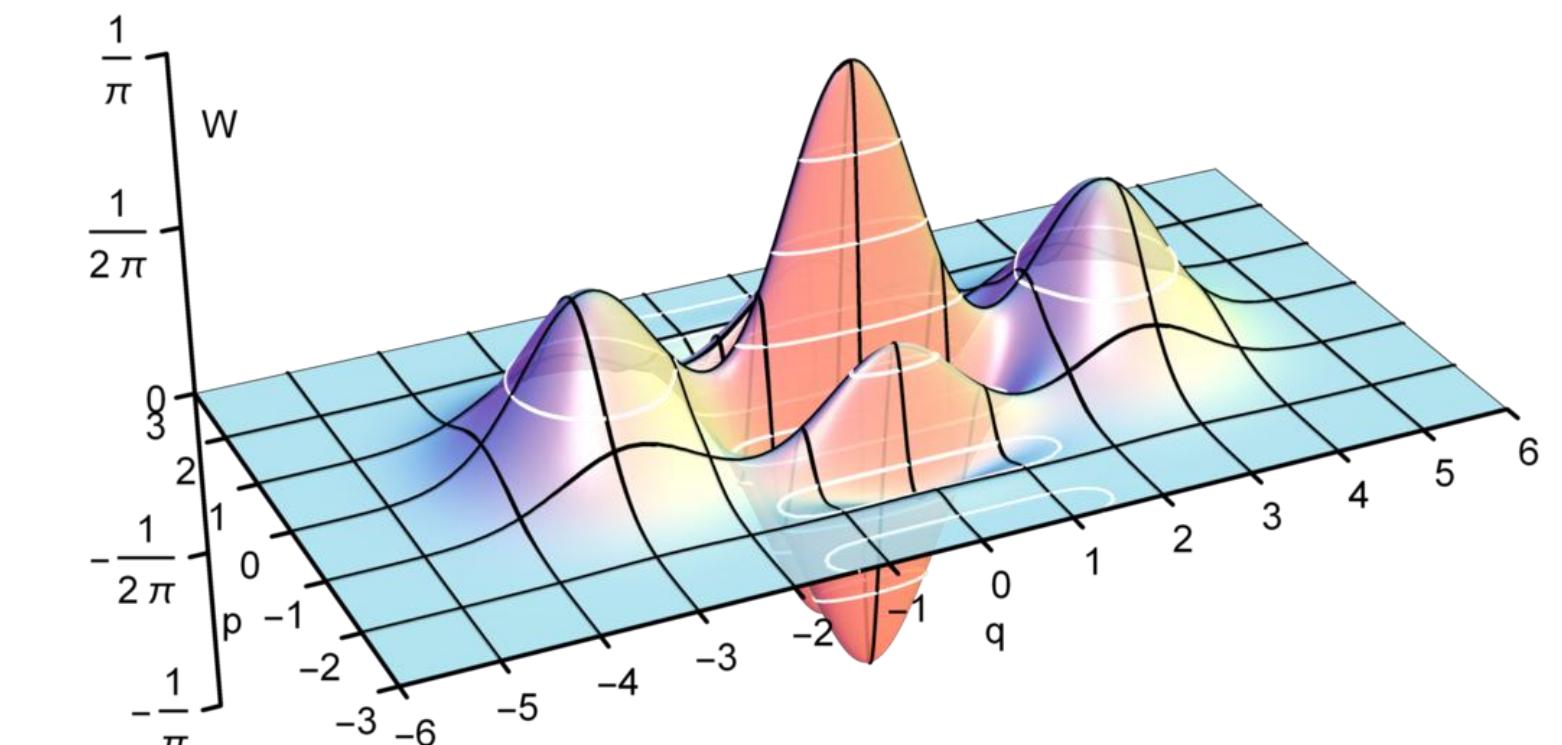


# Schrodinger法による Vlasovシミュレーション

1,2,3  
4  
5,6  
7,8  
9,10,11  
12

研究背景  
目的  
理論  
手法  
一次元プラズマ振動  
まとめと今後の目標



Wikipedia: Wigner quasiprobability distribution

# Vlasov方程式

Vlasov方程式 (プラズマの第一原理的方程式)

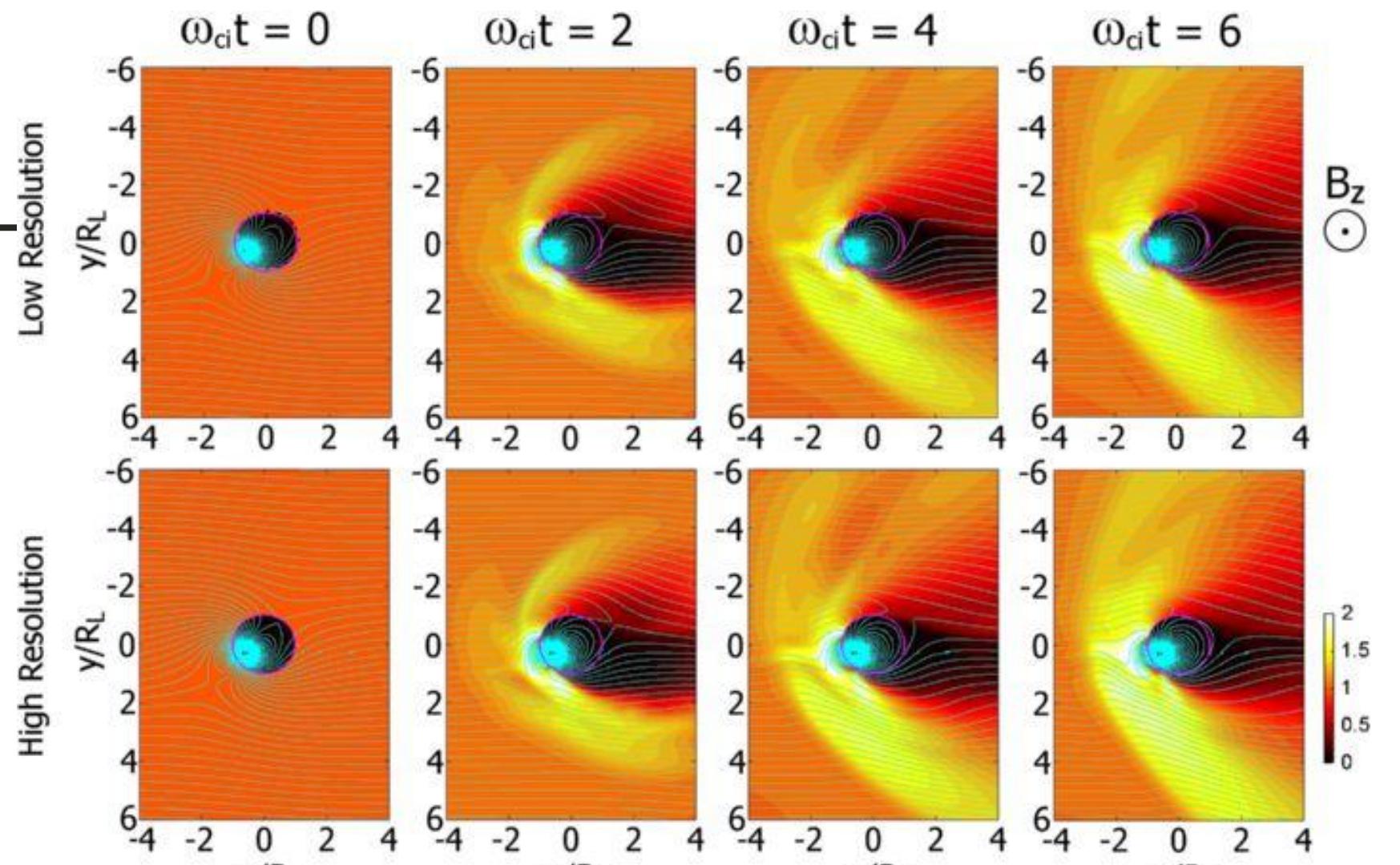
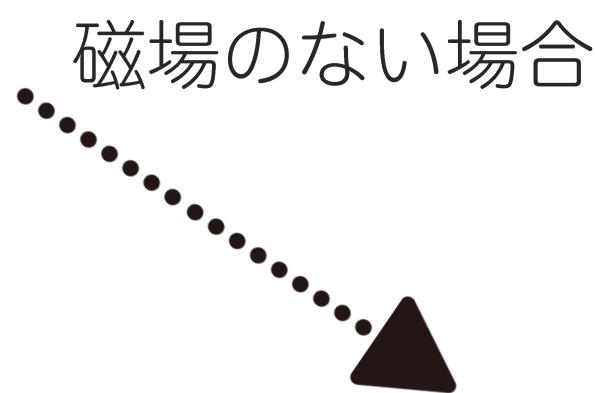
$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = 0$$

$$\begin{aligned} &+ \\ \mathbf{F} &= e \left( \mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B} \right) \\ &+ \\ &\text{Maxwell方程式} \end{aligned}$$

$f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ : 位相空間上の  
粒子の分布関数

$$\int d\mathbf{x} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = f(\mathbf{v}, t)$$

$$\int d\mathbf{v} f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = f(\mathbf{x}, t)$$



Vlasovシミュレーションによる  
太陽風と小天体の相互作用

Umeda +, 2015

磁場のない場合

Vlasov-Poisson系

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} - \frac{e}{m} \nabla U \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = 0$$

+

$$\Delta U = -4\pi\rho_e$$

# Vlasov方程式の計算手法

---

## OPICシミュレーション

分布関数を粒子に代表させ、ラグランジュ的に解く

精度を上げるには膨大な粒子数が必要

## OVlasovシミュレーション

分布関数を離散化して、オイラー的に解く

6次元の位相空間を離散化しなければならない

## ☆Schrodinger法

波動関数から**量子力学的な分布関数**を構成し、波動関数の時間発展を計算する

6次元→3次元に圧縮することができる

### 古典的な分布関数

$$f = f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$$

### 時間発展(Vlasov方程式)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = 0$$

### Wigner関数(量子力学的な分布関数)

$$f_W(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) = \frac{m}{2\pi\hbar} \int d\mathbf{r} \varphi\left(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t\right) \varphi^*\left(\mathbf{x} - \frac{\mathbf{r}}{2}, t\right) e^{-i\frac{m\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}}$$



### 時間発展(Schrodinger方程式)

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = H\varphi(\mathbf{x}, t)$$

Wigner, 1932

Wigner関数(量子力学的な分布関数)の導入

$$f_W(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$$

$$= \frac{m}{2\pi\hbar} \int d\mathbf{r} \varphi\left(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t\right) \varphi^*\left(\mathbf{x} - \frac{\mathbf{r}}{2}, t\right) e^{-i\frac{m\mathbf{v}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}}$$

Fieux, 1970

Schrodinger法の定式化

Bertrand+, 1980

Schrodinger法によるプラズマのシミュレーション

⋮

↓ 宇宙論に取り入れられる

Widrow+, 1993

Schrodinger法による  
ダークマターのシミュレーション

Kopp+, 2017

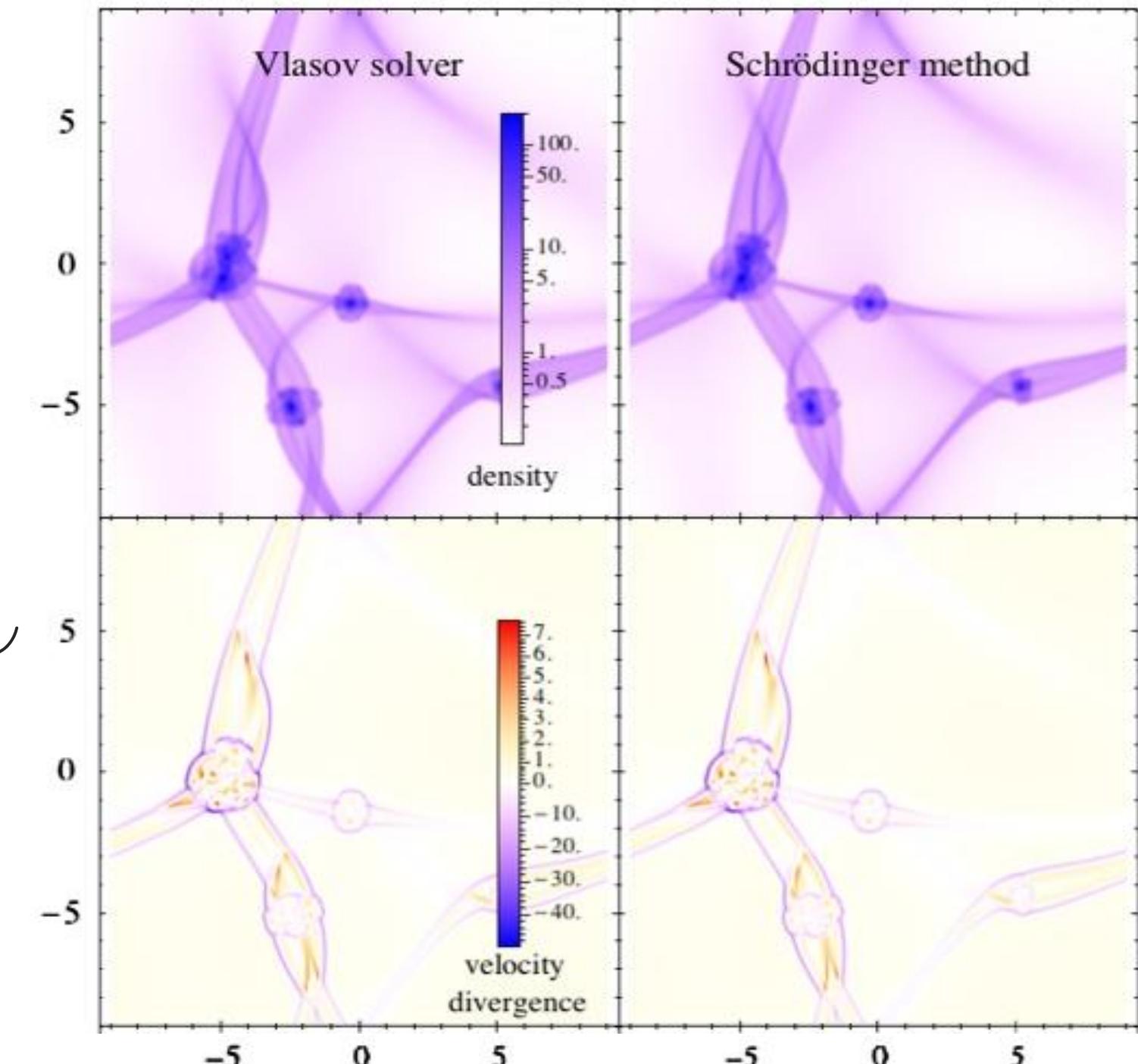
Schrodinger法による  
ダークマターのシミュレーション

Mocz+, 2018

Schrodinger法による  
ダークマターのシミュレーション

Vlasovシミュレーション

Schrodinger法



Vlasov法とSchrodinger法による  
ダークマターシミュレーションの比較  
(上:密度 下:速度分散)

Kopp+, 2017

# 研究目的

---

Wigner関数(量子力学的な分布関数)

$$f_W(x, v, t) = \frac{m}{2\pi\hbar} \int d\mathbf{r} \varphi\left(\mathbf{x} + \frac{\mathbf{r}}{2}, t\right) \varphi^*\left(\mathbf{x} - \frac{\mathbf{r}}{2}, t\right) e^{-i\frac{mv\cdot\mathbf{r}}{\hbar}}$$

時間発展

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial t} = H\varphi(x, t)$$

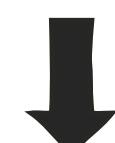
Wigner関数の時間発展方程式を導出し、ブラソフ方程式との対応関係を調べ  
誤差を定量評価する



時間発展を高速に計算するコードを実装する  
(Schrodinger方程式 + Poisson方程式)



Schrodinger法により1次元静電プラズマをシミュレーションする



解析解との比較をし、実際の誤差と理論から予測される誤差を比較する

# Wigner関数の時間発展

Wigner関数(1次元)

$$f_W(x, v, t) = \frac{m}{2\pi\hbar} \int dr \varphi\left(x + \frac{r}{2}, t\right) \varphi^*\left(x - \frac{r}{2}, t\right) e^{-i\frac{mvr}{\hbar}}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \underbrace{\varphi\left(x + \frac{r}{2}, t\right)}_{\text{左}} \underbrace{\varphi^*\left(x - \frac{r}{2}, t\right)}_{\text{右}} \right]$$

$$i\hbar \frac{\partial \varphi\left(x + \frac{r}{2}\right)}{\partial t} = H\varphi\left(x + \frac{r}{2}\right) \quad -i\hbar \frac{\partial \varphi^*\left(x - \frac{r}{2}\right)}{\partial t} = H\varphi^*\left(x - \frac{r}{2}\right)$$



Wigner関数の時間発展

$$\frac{\partial f_W}{\partial t} + v \frac{\partial f_W}{\partial x} + \frac{e}{m} E(x) \frac{\partial f_W}{\partial v} = -\frac{\hbar^2}{24m^3} \frac{e}{\partial x^2} \frac{\partial^3 f_W}{\partial v^3}$$

Vlasov方程式

$$\frac{\hbar^2}{24m^3} \frac{e}{\partial x^2} \frac{\partial^3 f_W}{\partial v^3} \sim \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{\lambda_p^2} \left(\frac{\hbar}{mV_0}\right)^2 = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\lambda_e^2}{\lambda_p^2} \equiv \alpha^2$$

$\lambda_e$ : 電子のド・ブロイ波長  
量子のスケール

$\lambda_p$ : プラズマのスケール

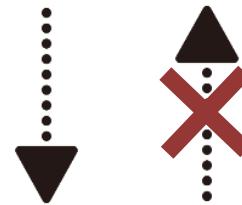
パラメータとして扱う

$$\alpha = \frac{1}{2\pi} \frac{\lambda_e}{\lambda_p} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\lambda_p} \frac{h}{mV_0} \dots \rightarrow \begin{array}{l} \text{扱う物理現象} \\ \text{によって決まる定数} \end{array}$$

:誤差を決定するパラメータ

# ほしい分布を再現する波動関数の決め方

$$\varphi(x, t = 0)$$



$$f_W(x, v, t = 0) = \frac{m}{2\pi\hbar} \int dr \varphi\left(x + \frac{r}{2}, t = 0\right) \varphi^*\left(x - \frac{r}{2}, t = 0\right) e^{-i\frac{mv r}{\hbar}}$$

波動関数から量子力学的な分布関数を求めるることは容易だが  
ほしい分布を再現するような波動関数を求めるることは難しい

## コールドプラズマ振動

$$\varphi(x, t = 0) = \exp\left[\frac{i}{\alpha} \cos k_0 x\right]$$

..... $\rightarrow f_W(x, v, t = 0) = \delta(v - V_0 \sin k_0 x)$

# 数値計算の方法

## Schrodinger方程式

$$i \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left( -\frac{\alpha}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{U(x)}{\alpha} \right) \varphi$$

$$\alpha = \frac{1}{2\pi} \frac{\lambda_e}{\lambda_D}$$



$$\varphi(x, t + \Delta t) = H(\Delta t) \varphi(x, t) \quad H(\Delta t) = \exp \left[ -i \left( -\frac{\alpha}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{U(x)}{\alpha} \right) \Delta t \right]$$

$$\hat{T} = -\frac{\alpha}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \hat{V} = \frac{V(x)}{\alpha} \quad e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A, B]+\dots} \quad (\text{BCH公式})$$

## スプリットステップフーリエ法

$$H(\Delta t) = \exp[-i(\hat{T} + \hat{V})\Delta t] = e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} e^{-i\hat{V}\Delta t} e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} + O(\Delta t^3)$$

$$\varphi_x^{n+1} = \left( e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} e^{-i\hat{V}\Delta t} e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} \right) \varphi_x^n$$

Schrodinger方程式 Poisson方程式



フーリエ変換で計算可能



GPUで高速に計算可能

コードはPythonライブラリCuPy  
を利用して実装

GPUはRTX3080を使用

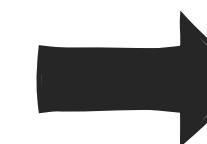
# 数値計算における条件

Wigner関数が表現可能な速度の上限  
 $v_{\max}$ によるグリッド幅  $\Delta x$  の制限



$$\Delta x = \frac{\pi}{v_{\max}/V_0} \alpha$$

スプリットステップフーリエ法において  
 1ステップあたりの誤差を抑える条件(CFL  
 条件)によるタイムステップ幅  $\Delta t$  の制限



$$\Delta t \ll \frac{2 \Delta x^2}{\alpha \pi^2} = \frac{2}{\left(\frac{v_{\max}}{V_0}\right)^2} \alpha$$

$\alpha$  (誤差)を小さくする



計算コストが増大する

$\alpha$  を調節する必要がある

$$\alpha = \frac{1}{2\pi} \frac{\lambda_e}{\lambda_p} = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{\lambda_p} \frac{h}{mV_0}$$

パラメータとして扱う

扱う物理現象  
によって決まる定数

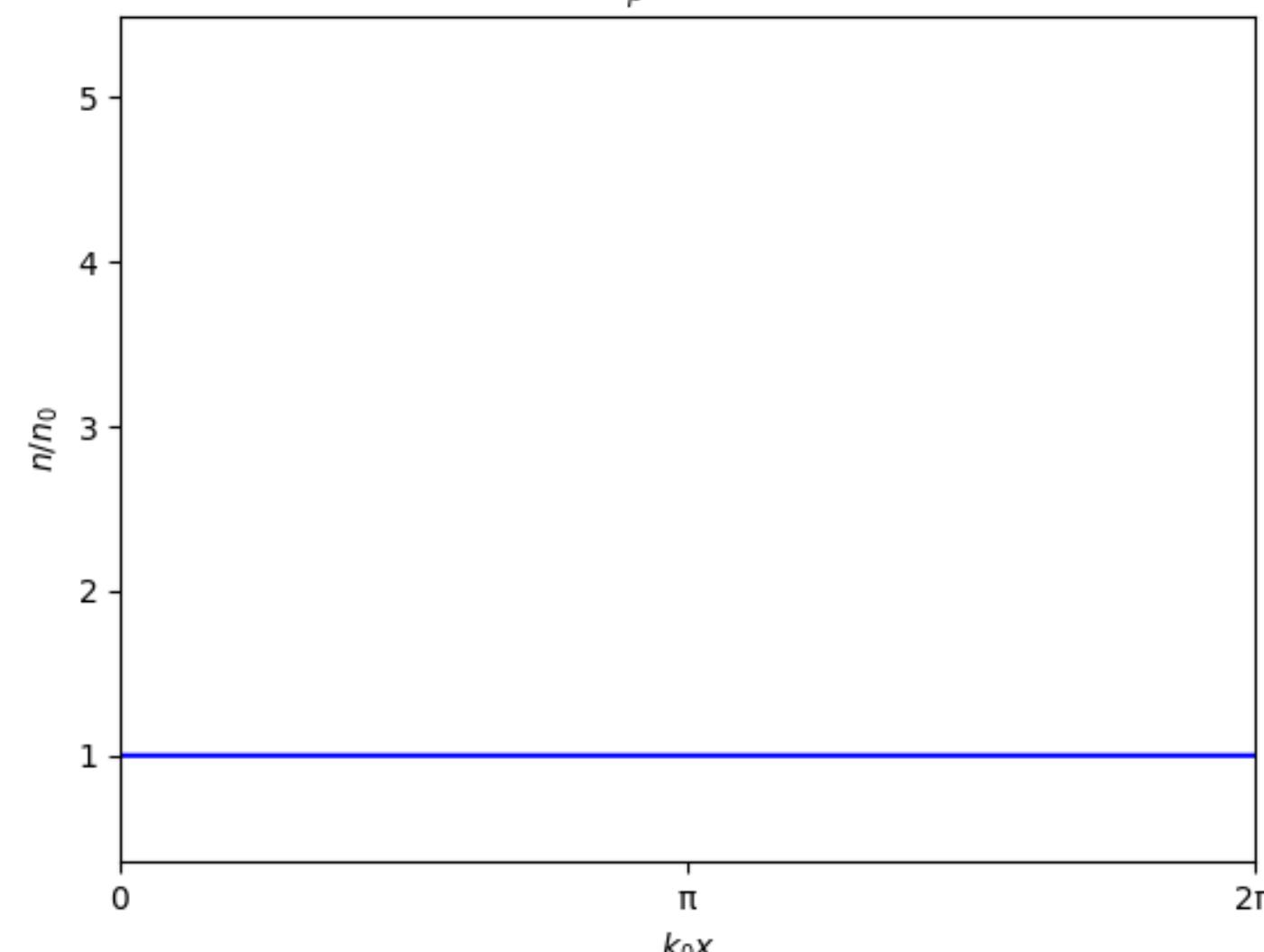
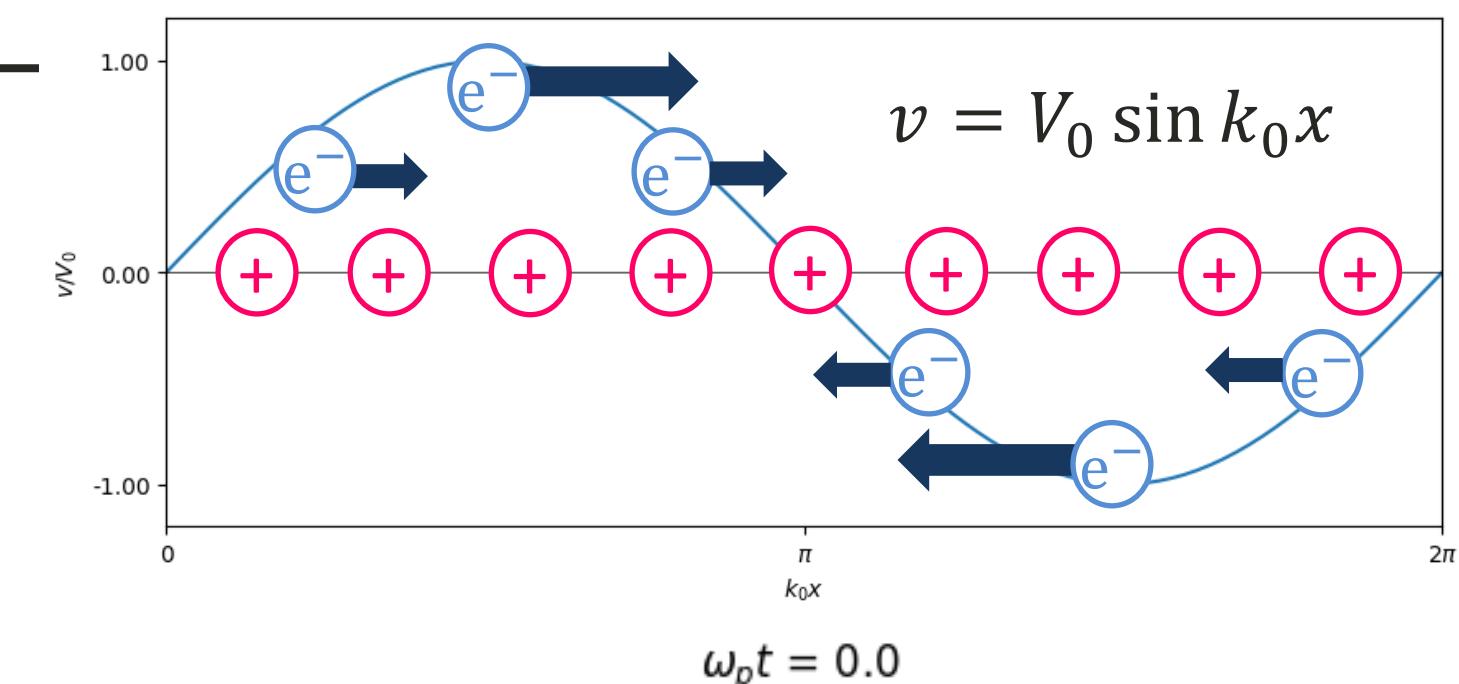
# 1次元プラズマ振動の数値計算

## コールドプラズマ振動

$$\varphi(x, t = 0) = \exp\left[\frac{i}{\Delta V} \cos k_0 x\right]$$

.....→  $f_W(x, v, t = 0) = \delta(v - V_0 \sin k_0 x)$

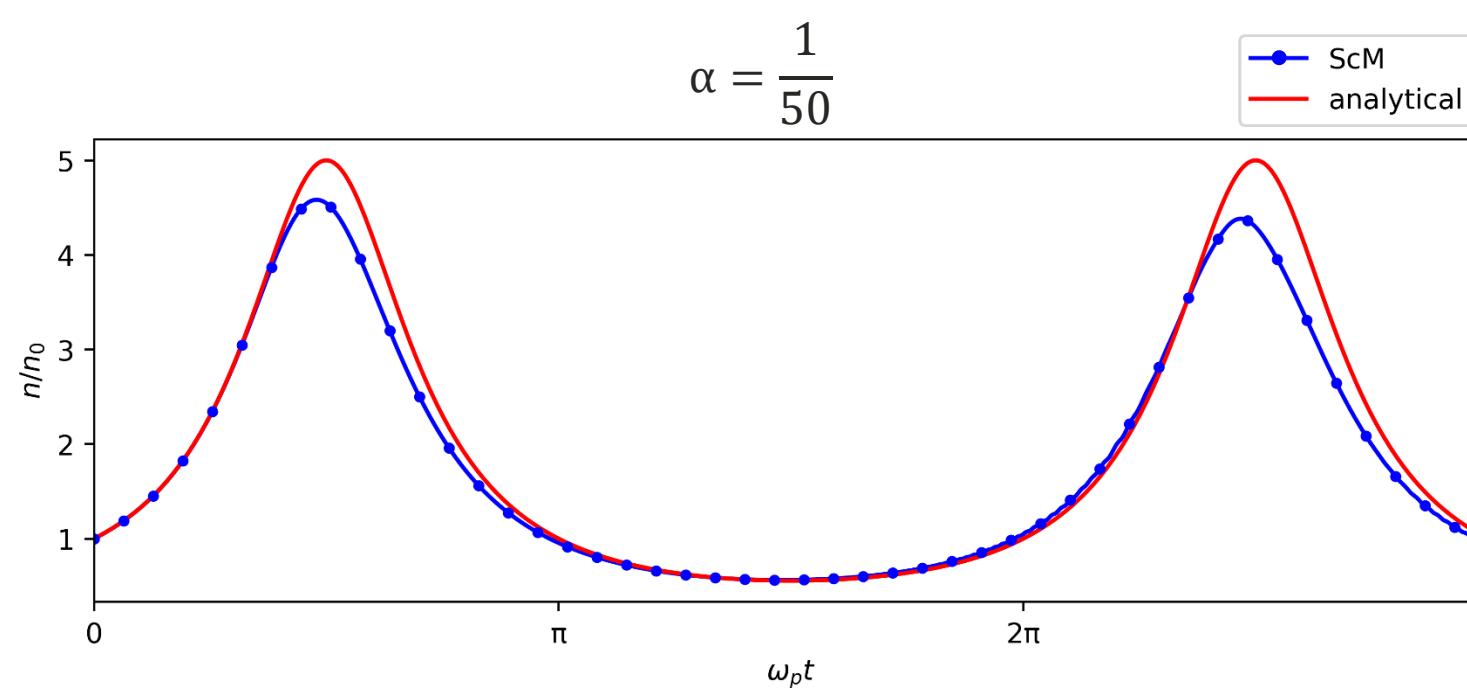
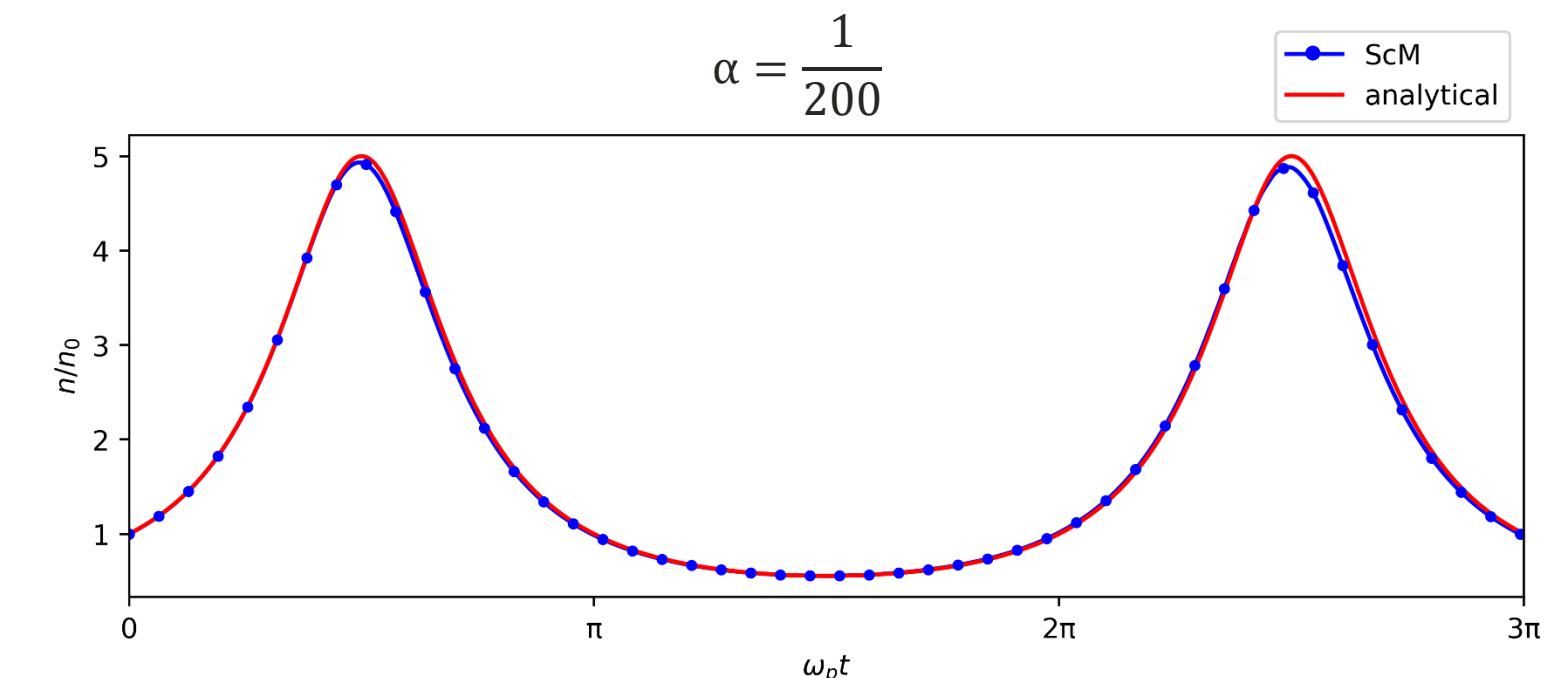
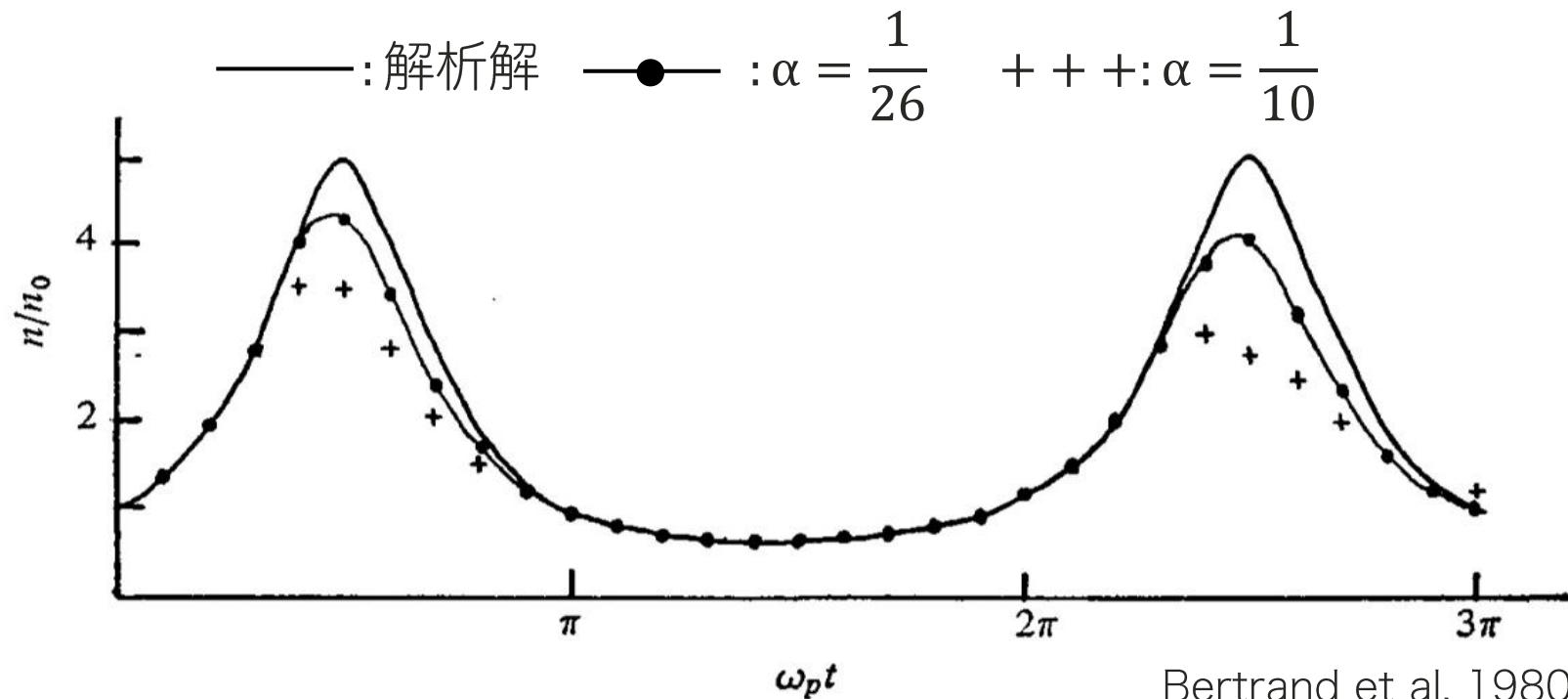
- 密度  $n_0 = 1$  のイオンが固定
- 長さ  $L = 2\pi/k_0$  の周期境界条件
- 初期条件  $v = V_0 \sin k_0 x$   $n_e = n_0 = 1$
- 誤差パラメータ  $\alpha : \frac{1}{50} \sim \frac{1}{1000}$
- グリッド数 = 2048
- タイムステップ幅 =  $\frac{1}{10^5}$



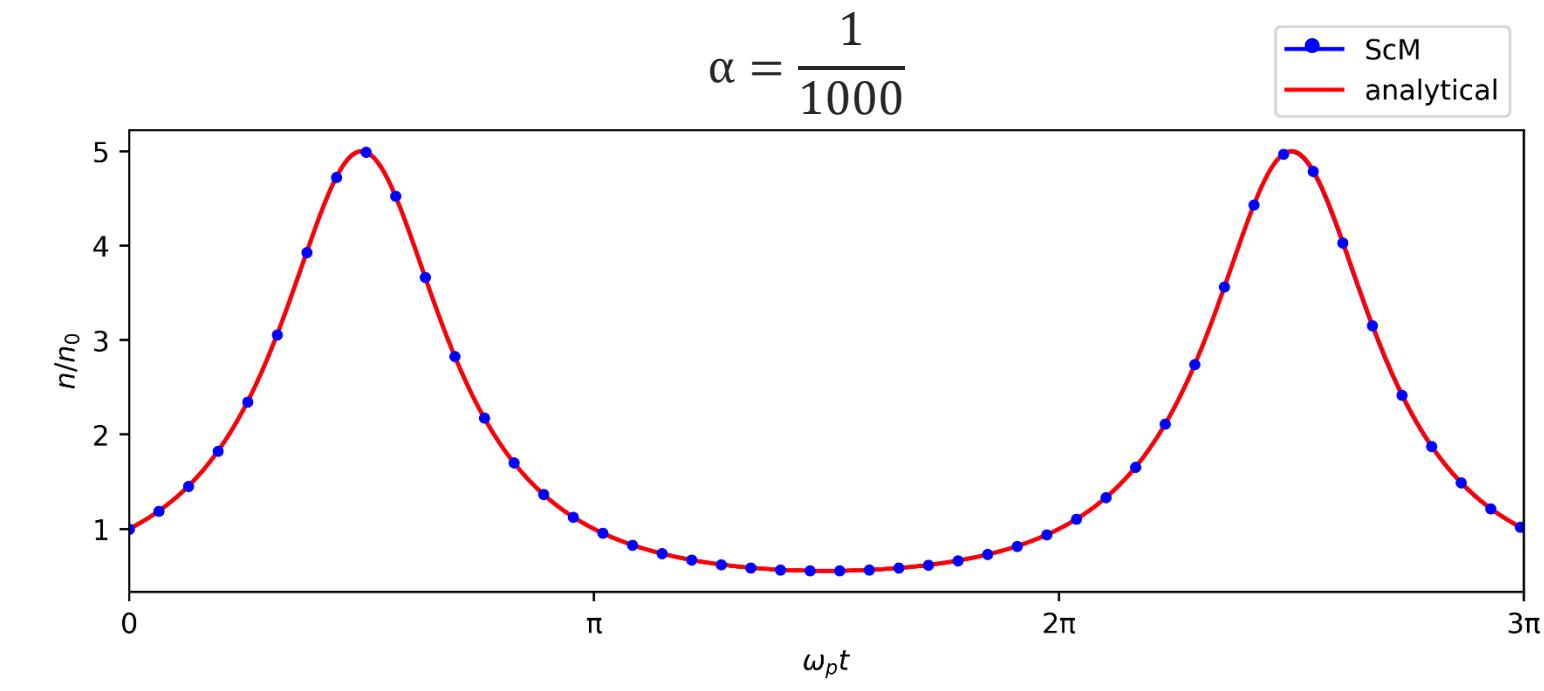
電子数密度の時間変化

# 1次元プラズマ振動の数値計算結果

ボックス中心における電子数密度の時間変化



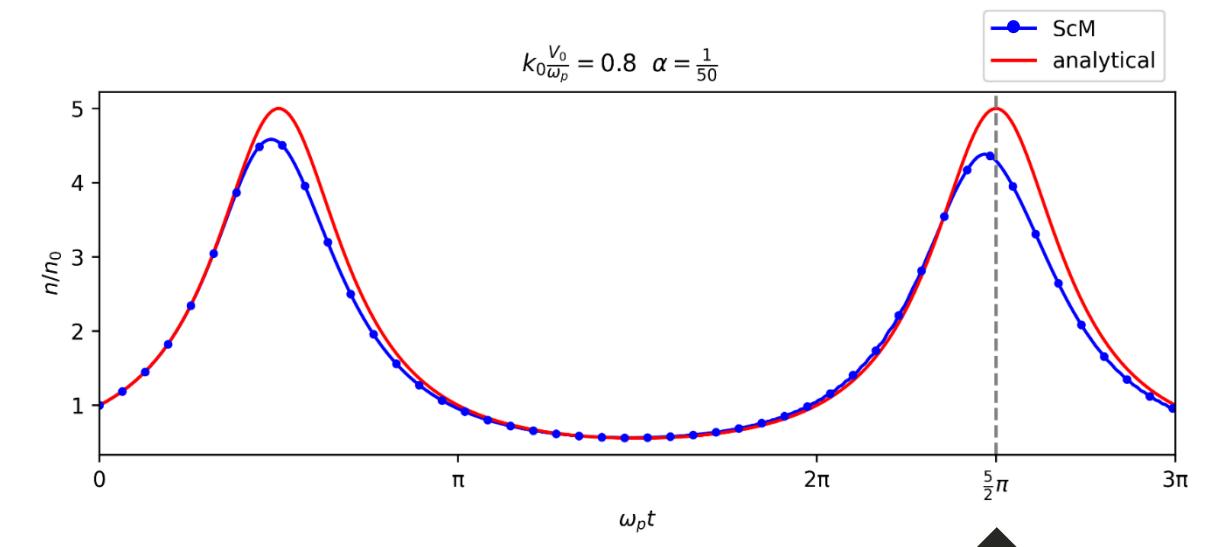
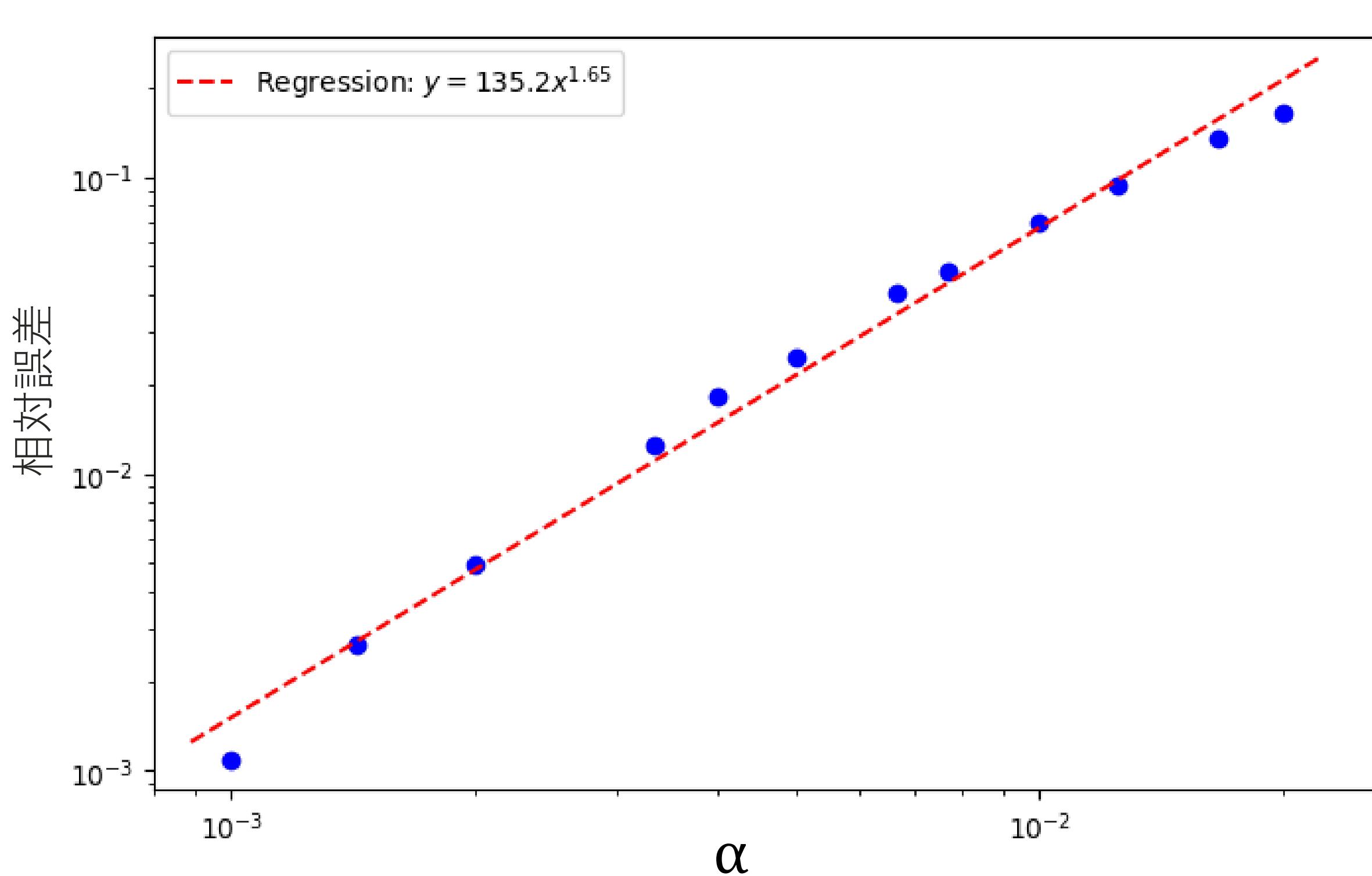
$k_0 x = \pi$  における電子数密度の時間変化



$k_0 x = \pi$  における電子数密度の時間変化

11/12

# 1次元コールドプラズマ振動の数値計算



ピークにおける相対誤差を  
様々な $\alpha$ で計算

電子数密度の相対誤差

対数をとり線形回帰：(誤差)  $\propto \alpha^{1.65}$

理論予測：(誤差)  $\propto \alpha^2$

# まとめと今後の目標

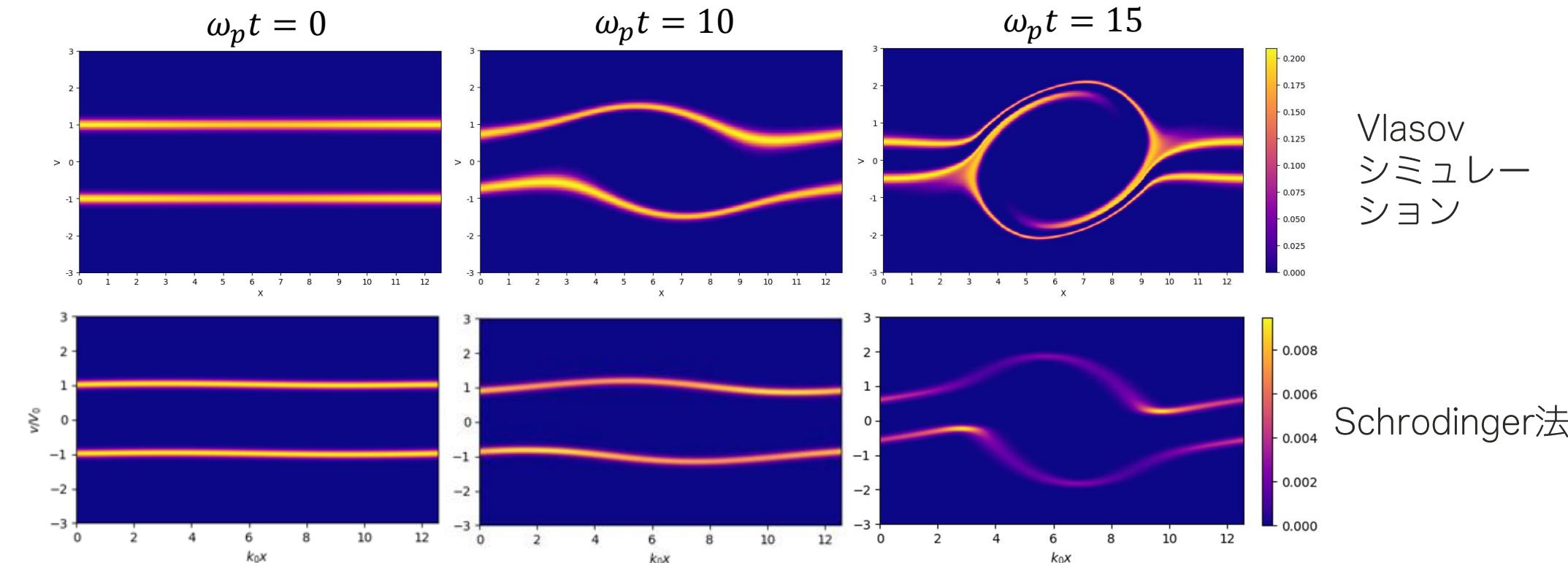
---

○Vlasov方程式を数値計算する新たな手法となりうるSchrodinger法において  
生じる誤差を定量的に評価した

○Schrodinger法を実行するコードを実装し、1次元プラズマ振動の  
シミュレーションをした結果、解析解を誤差約0.1%で再現することができた

○Schrodinger法のVlasov方程式に対する誤差の $\alpha$ 依存性として理論予測 $\alpha^2$ に対し  
数値計算で $\alpha^{1.65}$ という結果が得られた

☆1次元プラズマ振動以外の現象  
(2流体不安定性など)をシミュ  
レーショントし、Vlasovシミュ  
レーションによる結果と比較  
する



2流体不安定性のシミュレーション結果

## 補足

# Wigner関数

波動関数から分布関数  $f_W(x, v, t)$  を構築する

○密度演算子を定義

$$\rho(r, r', t) = \varphi(r, t)\varphi^*(r', t)$$

○重心座標、相対座標に変換

$$\begin{cases} x = (r + r')/2 \\ R = r - r' \end{cases} \quad \cdots \cdots \rightarrow \quad \rho\left(x + \frac{R}{2}, x - \frac{R}{2}, t\right) = \varphi\left(x + \frac{R}{2}, t\right)\varphi^*\left(x - \frac{R}{2}, t\right)$$

○相対座標についてフーリエ変換

$$f_W(x, v, t) = \frac{m}{2\pi\hbar} \int \rho\left(x + \frac{R}{2}, x - \frac{R}{2}, t\right) e^{-i\frac{mvR}{\hbar}} dR = \frac{m}{2\pi\hbar} \int dr \varphi\left(x + \frac{R}{2}, t\right)\varphi^*\left(x - \frac{R}{2}, t\right) e^{-i\frac{mvR}{\hbar}}$$

$f_W$ に求める性質

$$\int dk f_W(x, v) = |\varphi(x)|^2 \quad \int dx f_W(x, v) = |\varphi(v)|^2 \quad f_W(x, v, t) \in \text{Re} \quad f_W(x, v, t) > 0$$

## 補足

# Wigner関数の性質

$$f_W(x, k, t) = \frac{1}{2\pi} \int dR \varphi\left(x + \frac{R}{2}, t\right) \varphi^*\left(x - \frac{R}{2}, t\right) e^{-ikR}$$

### $f_W$ に求める性質

$$\int dk f_W(x, k) = |\varphi(x)|^2 \quad \int dx f_W(x, v) = |\varphi(k)|^2$$

$$f_W(x, k, t) \in \text{Re}$$

$$f_W(x, k, t) > 0$$

### 実数値関数

$$\begin{aligned} f_W^*(x, k, t) &= \frac{1}{2\pi} \int dR \varphi^*\left(x + \frac{R}{2}, t\right) \varphi\left(x - \frac{R}{2}, t\right) e^{ikR} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int dR' \varphi\left(x + \frac{R'}{2}, t\right) \varphi^*\left(x - \frac{R'}{2}, t\right) e^{-ikR'} = f_W \end{aligned}$$

### 位置の分布

$$\begin{aligned} \int dk f_W(x, k) &= \frac{1}{2\pi} \int dR \varphi\left(x + \frac{R}{2}\right) \varphi^*\left(x - \frac{R}{2}\right) \int dk e^{-ikR} \\ &\quad \delta(R) \\ &= \varphi(x, t) \varphi^*(x, t) = |\varphi(x)|^2 \end{aligned}$$

### 速度の分布

$$\begin{aligned} \int dx f_W(x, k) &= \frac{1}{2\pi} \iint dx dR \varphi\left(x + \frac{R}{2}\right) \varphi^*\left(x - \frac{R}{2}\right) e^{-ikR} \\ &= \frac{1}{2\pi} \iint dx dR \frac{1}{2\pi} \iint dk' dk'' \\ &\quad \times \varphi(k') \varphi(k'') e^{ik'\left(x + \frac{R}{2}\right)} e^{ik''\left(x - \frac{R}{2}\right)} e^{-ikR} \\ &= \iint dk' dk'' \varphi(k') \varphi(k'') \\ &\quad \times \frac{1}{2\pi} \int dx e^{i(k' - k'')x} \frac{1}{2\pi} \int dR e^{iR\left(\frac{k' + k''}{2} - k\right)} \\ &\quad \delta(k' - k'') \\ &= \varphi(k) \varphi^*(k) = |\varphi(k)|^2 \end{aligned}$$

.....►  $|\varphi(v)|^2$

## 補足

# Wigner関数の時間発展

### Wigner関数

$$f_W(x, k, t) = \frac{1}{2\pi} \int dr \rho \left( x + \frac{R}{2}, x - \frac{R}{2}, t \right) e^{-ikR}$$

$$\rho(r, r', t) = \varphi(r, t)\varphi^*(r', t)$$

STEP1. 密度演算子を重心座標、相対座標へ変換

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial \varphi(r, t)}{\partial t} \varphi^*(r', t) + \varphi(r, t) \frac{\partial \varphi^*(r', t)}{\partial t}$$

Schrodinger e.q.より

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H\varphi$$

電場のみを考慮

いま

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + U(r)$$

と書けるとする

このとき

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(r, t)}{\partial r^2} \varphi^*(r', t) + U(r)\varphi(r, t)\varphi^*(r', t) \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2m} \varphi(r, t) \frac{\partial^2 \varphi^*(r', t)}{\partial r'^2} - \varphi(r, t)U(r')\varphi^*(r', t) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\partial^2}{\partial r'^2} \right] \rho(r, r', t) + [U(r) - U(r')] \rho(r, r', t) \end{aligned}$$

$$\begin{cases} x = (r + r')/2 \\ R = r - r' \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial R}{\partial r} \frac{\partial}{\partial R} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial R} \\ \frac{\partial}{\partial r'} = \frac{\partial x}{\partial r'} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial R}{\partial r'} \frac{\partial}{\partial R} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial R} \end{cases}$$

$$\longrightarrow \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\partial^2}{\partial r'^2} = 2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial R}$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} 2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial R} \rho \left( x + \frac{R}{2}, x - \frac{R}{2}, t \right) \\ &\quad + \left[ U \left( x + \frac{R}{2} \right) - U \left( x - \frac{R}{2} \right) \right] \rho \left( x + \frac{R}{2}, x - \frac{R}{2}, t \right) \end{aligned}$$

## 補足

# Wigner関数の時間発展

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} 2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial R} \rho \left( x + \frac{R}{2}, x - \frac{R}{2}, t \right) \\ + \left[ U \left( x + \frac{R}{2} \right) - U \left( x - \frac{R}{2} \right) \right] \rho \left( x + \frac{R}{2}, x - \frac{R}{2}, t \right)$$

STEP2. 相対座標についてフーリエ変換

### 左辺

$$\frac{1}{2\pi} \int dR i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} e^{-ikR} = \frac{1}{2\pi} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int dR \rho e^{-ikR} = i\hbar \frac{\partial f_W}{\partial t}$$

### 右辺第一項

$$-\frac{1}{2\pi} \frac{\hbar^2}{m} \int dR \left[ \frac{\partial^2 \rho}{\partial x \partial R} \right] e^{-ikR} = -i\hbar \frac{\hbar k}{m} \frac{\partial f_W}{\partial x}$$

### 右辺第二項

$$\frac{1}{2\pi} \int dR \left[ U \left( x + \frac{R}{2} \right) - U \left( x - \frac{R}{2} \right) \right] \rho e^{-ikR} \\ = \frac{1}{2\pi} \int dk' \int dR \left[ U \left( x + \frac{R}{2} \right) - U \left( x - \frac{R}{2} \right) \right] f_W(x, k', t) e^{-i(k-k')R}$$

$$\left( \begin{array}{l} U \left( x \pm \frac{R}{2} \right) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\pm 1)^m}{m!} \frac{\partial^m U(x)}{\partial x^m} \left( \frac{R}{2} \right)^m \\ U \left( x + \frac{R}{2} \right) - U \left( x - \frac{R}{2} \right) = 2 \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(2m+1)!} \frac{\partial^{2m+1} U(x)}{\partial x^{2m+1}} \left( \frac{R}{2} \right)^{2m+1} \\ \sim R \frac{\partial U(x)}{\partial x} + \frac{R^3}{24} \frac{\partial^3 U(x)}{\partial x^3} \end{array} \right)$$

$$\approx i \frac{\partial U(x)}{\partial x} \frac{\partial f_W}{\partial k} - \frac{i}{24} \frac{\partial^3 U(x)}{\partial x^3} \frac{\partial^3 f_W}{\partial k^3}$$

## 補足

# Wigner関数の時間発展

$$f_W(x, k, t) = \frac{1}{2\pi} \int d\Delta \rho \left( x + \frac{\Delta}{2}, x - \frac{\Delta}{2}, t \right) e^{-ik\Delta} \quad \rho(r, r', t) = \varphi(r, t)\varphi^*(r', t)$$

まとめると

$$i\hbar \frac{\partial f_W}{\partial t} = -i\hbar \frac{\hbar k}{m} \frac{\partial f_W}{\partial x} + i \frac{\partial U(x)}{\partial x} \frac{\partial f_W}{\partial k} - \frac{i}{24} \frac{\partial^3 U(x)}{\partial x^3} \frac{\partial^3 f_W}{\partial k^3}$$

Wigner関数の時間発展

$$\frac{\partial f_W}{\partial t} + \frac{\hbar k}{m} \frac{\partial f_W}{\partial x} - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial U(x)}{\partial x} \frac{\partial f_W}{\partial k} = -\frac{1}{24\hbar} \frac{\partial^3 U(x)}{\partial x^3} \frac{\partial^3 f_W}{\partial k^3}$$

$\hbar k = p = mv$  だと思えば、

$$\frac{\partial f_W}{\partial t} + v \frac{\partial f_W}{\partial x} - \frac{1}{m} \frac{\partial U(x)}{\partial x} \frac{\partial f_W}{\partial v} = -\frac{\hbar^2}{24m^3} \frac{1}{\partial x^3} \frac{\partial^3 U(x)}{\partial x^3} \frac{\partial^3 f_W}{\partial v^3}$$

$eE(x) = -\frac{\partial U(x)}{\partial x}$  なので、

Wigner関数の時間発展

$$\frac{\partial f_W}{\partial t} + v \frac{\partial f_W}{\partial x} + \frac{e}{m} E(x) \frac{\partial f_W}{\partial v} = -\frac{\hbar^2}{24m^3} \frac{e}{\partial x^2} \frac{\partial^2 E(x)}{\partial x^2} \frac{\partial^3 f_W}{\partial v^3}$$

Vlasov方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{e}{m} E(x) \frac{\partial f}{\partial v} = 0$$

$$\frac{\hbar^2}{24m^3} \frac{e}{\partial x^2} \frac{\partial^2 E(x)}{\partial x^2} \frac{\partial^3 f_W}{\partial v^3} \sim \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{\lambda_p^2} \left( \frac{h}{mV_0} \right)^2 = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{\lambda_e^2}{\lambda_p^2} \equiv \alpha^2$$

$\lambda_e$ : 電子のド・ブロイ波長

量子のスケール

$\lambda_p$ : プラズマのスケール

# スプリットステップフーリエ法

---

## スプリットステップフーリエ法

$$\varphi_x^{n+1} = \left( e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} e^{-i\hat{V}\Delta t} e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} \right) \varphi_x^n$$

① 波数空間へ       $\varphi_k^n = F[\varphi_x^n]$

②  $e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} e^{-i\hat{V}\Delta t} e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t}$        $\varphi'_k = e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} \varphi_k^n = e^{-i\frac{\alpha}{4}k^2\Delta t} \varphi_k^n$

---

③ 実空間へ       $\varphi'_x = F^{-1}[\varphi'_k]$

④  $e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} e^{-i\hat{V}\Delta t} e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t}$        $\varphi''_x = e^{-i\hat{V}\Delta t} \varphi'_x = e^{-i\frac{V}{\alpha}\Delta t} \varphi'_x$

---

⑤ 波数空間へ       $\varphi''_k = F[\varphi''_x]$

⑥  $e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} e^{-i\hat{V}\Delta t} e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t}$        $\varphi_k^{n+1} = e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} \varphi''_k = e^{-i\frac{\alpha}{4}k^2\Delta t} \varphi''_k$

---

⑦ 実空間へ       $\varphi_x^{n+1} = F^{-1}[\varphi_k^{n+1}]$

## 補足

# $\alpha$ によるセッティングへの要請

速度が波動関数の波数として書き込まれる

ことからくる要請

$$k_{\max} = \frac{2\pi}{\lambda_{\min}} = \frac{\pi}{\delta x}$$

$$\downarrow \quad \hbar k_{\max} = m v_{\max}$$

$$\frac{v_{\max}}{V_0} = \frac{\hbar}{m V_0} \frac{\omega_p}{V_0} \frac{\pi}{\left(\delta x \frac{\omega_p}{V_0}\right)} = \alpha \frac{\pi}{\left(\delta x \frac{\omega_p}{V_0}\right)}$$

$$\alpha = \frac{\omega_p}{V_0} \frac{\hbar}{m V_0}$$

$$\downarrow \quad \delta x \frac{\omega_p}{V_0} = \frac{\pi}{v_{\max}/V_0} \alpha$$

スプリットステップフーリエ法

$$\varphi_x^{n+1} = \left( e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} e^{-i\hat{V}\Delta t} e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} \right) \varphi_x^n$$

1ステップあたりの位相変化が十分小さい必要がある(CFL条件)

運動エネルギーによる位相変化  $\gg$  ポテンシャルによる位相変化

$$\varphi_x^{n+1} \approx e^{-i\frac{\alpha}{2}k^2\Delta t} \varphi_k^n$$

$$\varphi_x^{n+1} = e^{-i\frac{V}{\alpha}\Delta t} \varphi_k^n$$

$$\downarrow$$

$$\frac{\alpha}{2} k_{\max}^2 \Delta t \ll 1$$

$$\downarrow \quad \Delta t \ll \frac{2}{\alpha} \frac{1}{k_{\max}^2}$$

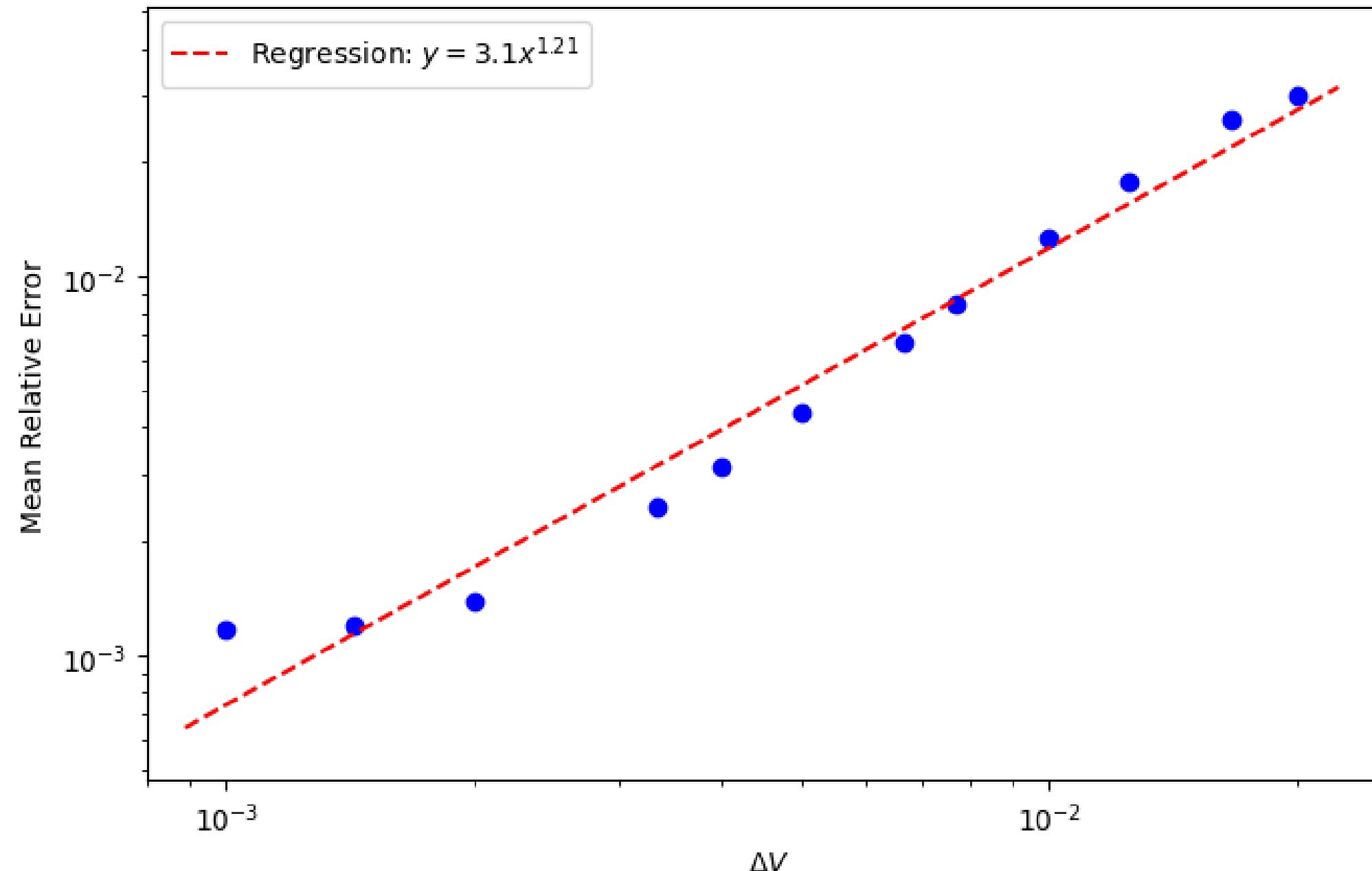
$$\downarrow \quad \Delta t \ll \frac{2 \delta x^2}{\alpha \pi^2}$$

$$k_{\max} = \frac{2\pi}{\lambda_{\min}} = \frac{\pi}{\delta x}$$

$\delta x$ :グリッド幅

$\lambda_{\min}$ :グリッド幅 $\delta x$ で表現できる最小波長  
(ナイキスト波長)

# 1次元コールドプラズマ波の数値計算(空間平均)



電子数密度の相対誤差の空間平均  $\omega_p t = 2\pi$

## 補足

# Vlasov方程式の粗視化と伏見関数

### Gaussian Filter

$$\bar{f}(x, p) = \frac{1}{2\pi} \int \frac{dx' dp'}{\sigma_x \sigma_p} \exp \left[ -\frac{(x - x')^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(p - p')^2}{2\sigma_p^2} \right] f(x', p')$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{f}_w - f) = -\frac{\hbar^2}{24} \frac{\partial^3 \overline{U(x)}}{\partial x^3} \frac{\partial^3 \overline{f_w}}{\partial p^3} + \frac{\sigma_p^2}{m} \frac{\partial^2 \bar{f}}{\partial x \partial p} + \sigma_x^2 \frac{\partial^2 \overline{U(x)}}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \bar{f}}{\partial x \partial p}$$

量子補正粗視化による誤差

### Wigner関数

$$f_w(x, k, t) = \frac{1}{2\pi} \int dR \varphi \left( x + \frac{R}{2}, t \right) \varphi^* \left( x - \frac{R}{2}, t \right) e^{-ikR}$$

### 粗視化したWigner関数

$$\bar{f}_w(x, p) = \frac{1}{2\pi} \int \frac{dx' dp'}{\sigma_x \sigma_p} \exp \left[ -\frac{(x - x')^2}{2\sigma_x^2} - \frac{(p - p')^2}{2\sigma_p^2} \right] f_w(x', p')$$

$\sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2}$  の条件を課すと、

### 伏見関数

$$\varphi_H(x, p, t) = \int dy K_H(x, y, p) \varphi(y)$$

$$K_H(x, p, t) = \frac{\exp \left( -\frac{(x - y)^2}{4\sigma_x^2} - \frac{i}{\hbar} p \left( y - \frac{x}{2} \right) \right)}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}} (2\pi\sigma_x^2)^{\frac{1}{4}}}$$

$$f_H(x, p, t) = |\varphi_H|^2$$

### $f_W$ に求める性質

$$\int dk f_W(x, k) = |\varphi(x)|^2$$

$$\int dx f_W(x, v) = |\varphi(k)|^2$$

$$f_W(x, k, t) \in \text{Re}$$

$$f_W(x, k, t) > 0$$