

プラズマ粒子シミュレーションにおけるカッパ分布の生成方法

Loading kappa distributions in particle simulation

銭谷誠司 (Seiji Zenitani)^{1,2} and 中野慎也 (Shin'ya Nakano)^{3,4}

¹⁾ 〒 657-8501 神戸市灘区六甲台町 1-1 神戸大学都市安全研究センター ^{a)}

²⁾ *Research Center for Urban Safety and Security, Kobe University, 1-1 Rokkodai-cho, Nada-ku, Kobe 657-8501, JAPAN*

³⁾ 〒 190-8562 東京都立川市緑町 10-3 統計数理研究所

⁴⁾ *The Institute of Statistical Mathematics, 10-3 Midori-cho, Tachikawa, Tokyo 190-8562, JAPAN*

^{a)} Electronic mail: zenitani@port.kobe-u.ac.jp

I. カッパ分布

宇宙空間物理学では、高エネルギー部分に「べき乗」成分をもつカッパ分布 (kappa distribution) がよく利用される。カッパ分布は 1960 年代に Vasyliunas, Olbert らのグループによって宇宙空間のプラズマ研究に導入された。^{8,10} その後、太陽圏のプラズマ観測が進むにつれて、Maxwell 分布に収まらない高エネルギー成分が普遍的に観測されるようになり、熱的コア成分と高エネルギーの「べき乗」成分をまとめて扱うことができるカッパ分布の有用性も認知されてきた。現在では、太陽・太陽風・太陽圏深部などさまざまな環境のプラズマ分布関数の議論でカッパ分布が使われている。⁶

カッパ分布の表式は以下の通りである。

$$f(\mathbf{v})d^3v = \frac{N}{(\pi\kappa\theta^2)^{3/2}} \frac{\Gamma(\kappa+1)}{\Gamma(\kappa-1/2)} \left(1 + \frac{\mathbf{v}^2}{\kappa\theta^2}\right)^{-(\kappa+1)} d^3v \quad (1)$$

ここで N は数密度、 κ はカッパ分布のべき指数、 θ は最頻速度、 Γ はガンマ関数である。特に、微分エネルギーフラックス ($\mathcal{F}(E)dE = N(E)\mathbf{v}dE = f(\mathbf{v})v^2\mathbf{v}d^3v$) が高エネルギー側で $\mathcal{F}(E) \propto E^{-\kappa}$ となる。また、 $\kappa \rightarrow \infty$ の極限では、Maxwell-Boltzmann 分布に漸近する。

最初に規格化定数を確認する。規格化定数を A とおいて、 $\mathbf{v} \rightarrow v$ に変換する。

$$A \iiint \left(1 + \frac{\mathbf{v}^2}{\kappa\theta^2}\right)^{-(\kappa+1)} d^3v = 4\pi A \int_0^\infty \left(1 + \frac{v^2}{\kappa\theta^2}\right)^{-(\kappa+1)} v^2 dv = N \quad (2)$$

積分式の中で $x \equiv v^2/\kappa\theta^2$ とおいて、ベータ関数 $B(x, y)$ の公式を使うと

$$\frac{1}{2}(\kappa\theta^2)^{3/2} \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{(1+x)^{\kappa+1}} dx = \frac{1}{2}(\kappa\theta^2)^{3/2} B\left(\frac{3}{2}, \kappa - \frac{1}{2}\right) = \frac{\pi^{1/2}}{4} (\kappa\theta^2)^{3/2} \frac{\Gamma(\kappa-1/2)}{\Gamma(\kappa+1)} \quad (3)$$

となり、これを (2) 式に代入・整理して以下を得る。

$$A = \frac{N}{(\pi\kappa\theta^2)^{3/2}} \frac{\Gamma(\kappa+1)}{\Gamma(\kappa-1/2)} \quad (4)$$

同様にしてエネルギー密度を計算する。途中の式展開の都合上、 $\kappa > 3/2$ でなければならない。

$$\mathcal{E} = 4\pi A \int_0^\infty \left(1 + \frac{v^2}{\kappa\theta^2}\right)^{-(\kappa+1)} \left(\frac{1}{2}mv^2\right) v^2 dv = 2\pi mA \int_0^\infty \left(1 + \frac{v^2}{\kappa\theta^2}\right)^{-(\kappa+1)} v^4 dv \quad (5)$$

$$= \pi mA (\kappa\theta^2)^{3/2} B\left(\frac{5}{2}, \kappa - \frac{3}{2}\right) = \frac{3}{4} \frac{\kappa}{\kappa - 3/2} Nm\theta^2 \quad (6)$$

自由度 3、比熱比 $\gamma = 5/3$ のプラズマ系のエネルギーは、温度 (ボルツマン定数を含む) を T として

$$\mathcal{E} = \frac{1}{\gamma-1} NT = \frac{3}{2} NT \quad (7)$$

であるから

$$T = \frac{\kappa}{2\kappa - 3} m\theta^2 \quad (8)$$

を得る。

カッパ分布のサンプルを図1に示す。フォーマットやべき指数 κ の値は、当該分野で有名な Summers and Thorne⁹ 論文の図1に合わせたものである。 κ の値が大きくなるにつれて、分布が Maxwell 分布に近づいていくようすがわかる。

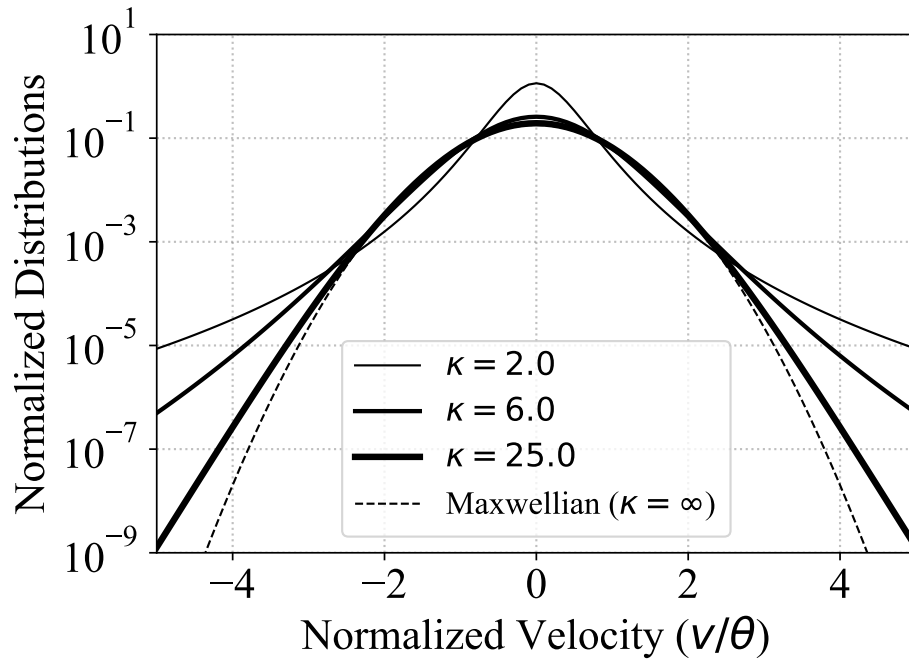


FIG. 1. カッパ分布の関数形のサンプル。点線は Maxwell 分布で $\kappa = \infty$ の極限に収束する。

II. 乱数生成アルゴリズム

プラズマ粒子 (Particle-in-cell; PIC) シミュレーションやモンテカルロシミュレーションでカッパ分布プラズマを扱うためには、カッパ分布に従う速度分布を乱数生成する必要がある。カッパ分布は、統計学の基本分布の1つである t 分布 (「スチューデントの t 分布」ともいう) の多変量版に対応する。変数が1つの単変量の t 分布を乱数生成する方法は、例えば Bailey² 法などが知られている。そして、多変量 t 分布を乱数生成する方法も統計学のソフ

トウェアパッケージなどで使われている。⁴ 本稿では、3変量の t 分布に対応させてカッパ分布を乱数生成する方法¹を少しアレンジして紹介する。

準備のため、Maxwell–Boltzmann 分布の生成方法を考える。

$$f(\mathbf{v})d^3v = N\left(\frac{m}{2\pi T}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2T}\right)d^3v \quad (9)$$

ここで、熱速度を

$$v_{\text{th}} \equiv \sqrt{\frac{2T}{m}} \quad (10)$$

と定義する。Maxwell–Boltzmann 分布に従う乱数を生成する標準的な方法は Box–Muller 法であろう。³ Box–Muller 法は2つの独立した一様乱数 $u_1, w_1 \sim U(0, 1)$ を使って

$$r_1 = \sqrt{-2 \ln u_1} \sin(2\pi w_1) \quad (11)$$

$$r_2 = \sqrt{-2 \ln u_1} \cos(2\pi w_1) \quad (12)$$

のように2つの正規乱数 $r_1 \sim \mathcal{N}(0, 1)$, $r_2 \sim \mathcal{N}(0, 1)$ を生成する。このとき、 r_1, r_2 はそれぞれ独立した分布である。Maxwell–Boltzmann 分布は分散 $\sigma^2 = (1/2)v_{\text{th}}^2$ の正規分布に対応するから、(11), (12) 式を σ 倍すれば速度分布を得ることができる。実用上は、これらの手順を2回繰り返して、4つの一様乱数 (u_1, u_2, w_1, w_2) から速度ベクトル3成分 (r_1, r_2, r_3) と余りの1つ (r_4) を生成することが多いだろう。また、多くの言語では、一様乱数 u の定義域は $0 \leq u < 1$ である。粒子数が多い場合、 $u = 0$ が現れて $\ln u = -\text{inf}$ となるため、例えば $u = 1 - u$ とおいて $u = 0$ を避ける工夫も必要である。

本稿では、べき指数 κ が2以上の整数あるいは半整数のカッパ分布を考える。 $\nu = 2\kappa - 1$ 、 $\sigma^2 = \kappa\theta^2/\nu$ とおくと、(1) 式を多変量 (p 変量) の t 分布に対応させることができる。カッパ分布の場合は $p = 3$ である。

$$f(\mathbf{v})d^3v = \frac{N}{\nu^{p/2}\pi^{p/2}\sigma^p} \frac{\Gamma[(\nu + p)/2]}{\Gamma(\nu/2)} \left(1 + \frac{1}{\nu} \frac{\mathbf{v}^2}{\sigma^2}\right)^{-\frac{(\nu+p)}{2}} d^3v \quad (13)$$

一般に、 p 次元の多変量 t 分布に従う乱数は、 p 次元の正規分布 ($(r_1, r_2, \dots, r_p) \sim \mathcal{N}_p(0, 1)$) と自由度 ν のカイ二乗分布 $r_5 \sim \chi_\nu^2$ の組み合わせで生成することができる。^{4,5} そこで、分散 $\sigma^2 = 1$ の3変量 t 分布に従う速度ベクトル $\bar{\mathbf{v}}$ の3成分を

$$\bar{v}_x = \frac{r_1}{\sqrt{r_5/\nu}}, \quad \bar{v}_y = \frac{r_2}{\sqrt{r_5/\nu}}, \quad \bar{v}_z = \frac{r_3}{\sqrt{r_5/\nu}} \quad (14)$$

で生成する。自由度 ν のカイ二乗分布 r_5 は、独立した正規乱数 $n_i \sim \mathcal{N}(0, 1)$ を ν 個足し合わせたものである。

$$r_5 = \sum_{i=1, \nu} n_i^2 \quad (15)$$

ここで Box-Muller 法の表式 ((11) 式・(12) 式) を利用して (15) 式をさらに簡略化する。¹¹ ν が偶数で $\nu = 2k$ となる場合は、 $U_i \cdot W_i$ を一様乱数として

$$r_5 = \sum_{i=1}^k \left(-2 \ln U_i \{ \sin^2(2\pi W_i) + \cos^2(2\pi W_i) \} \right) = -2 \ln \prod_{i=1}^k U_i$$

となるから、 W_i は不要で U_i のみが必要である。この一様乱数 U_i についても $U_i = 0$ を避ける工夫が必要である。また、 $\nu = 2k + 1$ が奇数の場合は

$$r_5 = -2 \ln \prod_{i=1}^k U_i + \bar{n}^2 \quad (16)$$

となり、もう 1 つ正規乱数 $\bar{n} \sim \mathcal{N}(0, 1)$ が必要になる。

最後に、分散 σ^2 を考慮して目的の \mathbf{v} ベクトルを得る。

$$v_x = \sigma \bar{v}_x, \quad v_y = \sigma \bar{v}_y, \quad v_z = \sigma \bar{v}_z \quad (17)$$

温度が非等方であったり、重心速度がゼロでない場合のカッパ分布の一般形は以下のようになる。磁場方向と垂直方向で係数を変えたバイカッパ分布 (bi-kappa distribution) もここに含まれる。

$$f(\mathbf{v}) d^3 v = \frac{N}{\nu^{p/2} \pi^{p/2} |\Sigma|^{1/2}} \frac{\Gamma[(\nu + p)/2]}{\Gamma(\nu/2)} \left(1 + \frac{1}{\nu} (\mathbf{v} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1} (\mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}) \right)^{-\frac{(\nu+p)}{2}} d^3 v \quad (18)$$

ここでも $p = 3$ で、 $\boldsymbol{\mu}$ は平均速度ベクトル、 Σ は分散共分散行列、 $|\Sigma|$ はその行列式である。そして、コレスキー分解 $\Sigma = \mathbf{A}\mathbf{A}^T$ で得られる行列 \mathbf{A} を使って、(17) 式の代わりに

$$\mathbf{v} = \boldsymbol{\mu} + \mathbf{A}\bar{\mathbf{v}} \quad (19)$$

とする。この行列 \mathbf{A} を Maxwell 分布の段階にかけて、事前に非等方 Maxwell 分布を作ってから、カイ二乗分布を使ってカッパ分布を生成しても良い。

この手順を表 I の擬似コードにまとめた。一様乱数のいくつか (u_i, U_i) については、定義域が 0 を含まないように注意する。最初に Box-Muller³ の手続きを繰り返して、3 成分の速度ベクトルを得る。次に、 κ が半整数 ($5/2, 7/2, \dots$) の場合は $\kappa - 1/2$ 個の一様乱数を

TABLE I. カッパ分布を乱数生成するアルゴリズム

$\nu \leftarrow 2\kappa - 1$
 generate uniform random $u_1, u_2, w_1, w_2 \in (0, 1]$
 $\bar{v}_x \leftarrow \sqrt{-2 \ln u_1} \sin(2\pi w_1)$
 $\bar{v}_y \leftarrow \sqrt{-2 \ln u_1} \cos(2\pi w_1)$
 $\bar{v}_z \leftarrow \sqrt{-2 \ln u_2} \sin(2\pi w_2)$
 $n \leftarrow \sqrt{-2 \ln u_2} \cos(2\pi w_2)$
if κ is an integer **then**
 generate uniform random $U_1, U_2, \dots, U_{\kappa-1} \in (0, 1]$
 $\chi_\nu^2 \leftarrow -2 \ln \left(\prod_{i=1}^{\kappa-1} U_i \right) + n^2$
elseif κ is a half integer **then**
 generate uniform random $U_1, U_2, \dots, U_{\kappa-1/2} \in (0, 1]$
 $\chi_\nu^2 \leftarrow -2 \ln \left(\prod_{i=1}^{\kappa-1/2} U_i \right)$
endif
 $A \leftarrow \frac{\sqrt{\kappa\theta^2/\nu}}{\sqrt{\chi_\nu^2/\nu}} = \sqrt{\frac{(2\kappa-3)T}{m\chi_\nu^2}}$
 $v_x \leftarrow \mu_x + A\bar{v}_x$
 $v_y \leftarrow \mu_y + A\bar{v}_y$
 $v_z \leftarrow \mu_z + A\bar{v}_z$
return v_x, v_y, v_z

使って自由度 ν のカイ二乗分布 χ_ν^2 を計算する。 κ が整数の場合は、 $\kappa - 1$ 個の一様乱数と 1 個の正規乱数を使って自由度 ν のカイ二乗分布 χ_ν^2 を計算する。 1 個の正規乱数には、Maxwell-Boltzmann 分布を作る際に余った r_4 を流用すれば良い。最後に、カイ二乗分布と分散を考慮して速度 3 成分を得る。一連の手続きで $\kappa + 3$ あるいは $\kappa + 7/2$ 個の一様乱数を使っている。 (17) 式の代わりに (19) 式を使う場合は、適宜、定数 A を行列 \mathbf{A} に書き直せば良い。

III. 検証

このアルゴリズムを使って $\kappa = 3.5$ の等方カッパ分布を乱数生成した結果を図 2、図 3 に示す。速度の関数 $F(|v|)$ 、あるいはエネルギーの関数 $F(E)$ の形で、数値結果（青のヒストグラム）と解析解（破線）を比較している。両図からは数値結果と解析解がよく一致することがわかる。解析解はそれぞれ $\sim v^{-2\kappa}$ 、 $\sim E^{-\kappa-1/2}$ に漸近する。また、図 2 からは θ が最頻速度であることが確認できる。

点線は Oka et al.⁷ が提案した内接 Maxwell 分布である。Maxwell 分布の最頻速度は v_{th} であるが、これがカッパ分布の最頻速度 θ と一致するように Maxwell 分布の温度を再設定する。

$$f_M(\mathbf{v})d^3v = N_M \left(\frac{1}{\pi\theta^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{v^2}{\theta^2}\right) d^3v \quad (20)$$

そのうえで、 $F_\kappa(\theta) = F_M(\theta)$ となるように密度 N_M を設定する。

$$N_M \equiv e \frac{\Gamma(\kappa+1)}{\Gamma(\kappa-1/2)} \kappa^{-\frac{3}{2}} \left(1 + \frac{1}{\kappa}\right)^{-(\kappa+1)} N \quad (21)$$

e はオイラー数 $e = 2.718\dots$ である。ここで

$$A(v) \equiv \frac{F_M(v)}{F_\kappa(v)} = \left(\frac{\kappa + (v/\theta)^2}{\kappa + 1} \right)^{\kappa+1} \exp\left(1 - \frac{v^2}{\theta^2}\right) \quad (22)$$

とにおいて、その微分

$$\frac{\partial}{\partial v} A(v) = \frac{2v}{(1+\kappa)\theta^2} \left(1 - \frac{v^2}{\theta^2}\right) \left(\frac{\kappa + (v/\theta)^2}{\kappa + 1} \right)^\kappa \exp\left(1 - \frac{v^2}{\theta^2}\right) \quad (23)$$

の符号を考慮すると、 $A(v)$ が最大値 $A(\theta) = 1$ を持つことがわかる。よって、常に $F_\kappa(v) \geq F_M(v)$ である。高エネルギー側の

$$\int_\theta^\infty (F_\kappa(v) - F_M(v)) dv \quad (24)$$

の成分をカッパ分布が持つ非熱的エネルギー成分と見做すこともできる。Oka et al.⁷ の図 1 で示されているとおり、 $\kappa \lesssim 4$ では全体の半分を超えるエネルギーを非熱的部分が担っている。

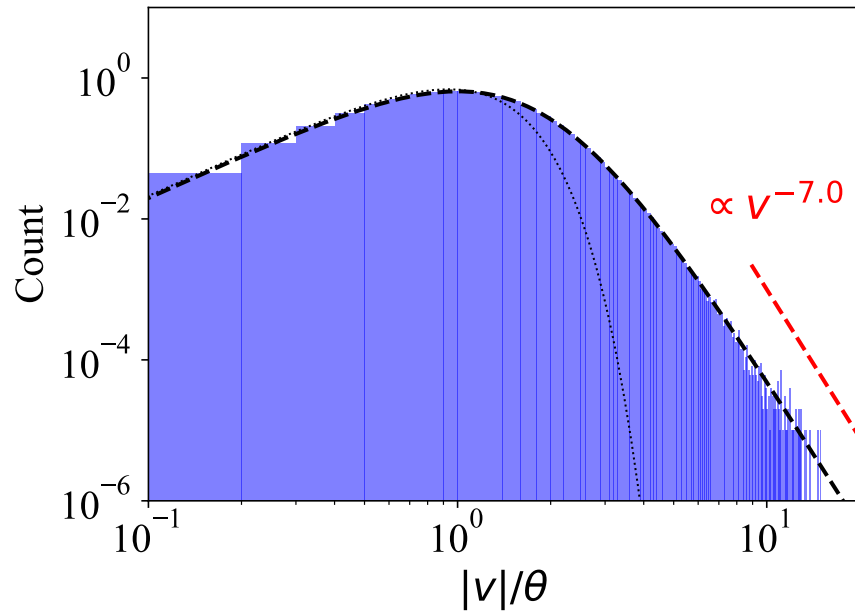


FIG. 2. $\kappa = 3.5$ のカッパ分布に従って乱数生成した粒子速度分布（青のヒストグラム）と解析解（黒の破線）。黒の点線は内接 Maxwell 分布である。

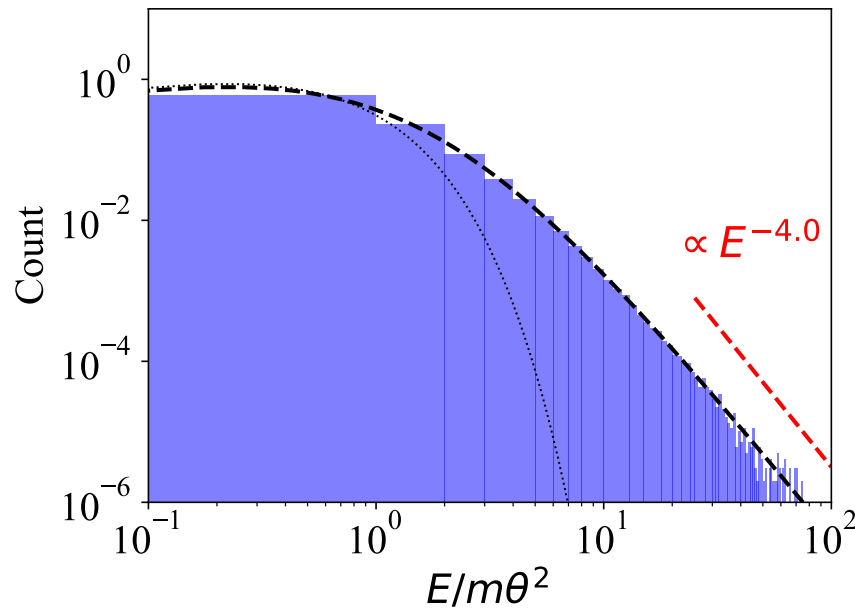


FIG. 3. $\kappa = 3.5$ のカッパ分布に従って乱数生成した粒子エネルギー分布（青のヒストグラム）と解析解（黒の破線）。黒の点線は内接 Maxwell 分布である。

REFERENCES

- ¹R. F. Abdul and R. L. Mace, *Phys. Plasmas* **22**, 102107 (2015).
- ²R. W. Bailey, *Math. Comp.* **62**, 779 (1994).
- ³G. E. P. Box and M. E. Muller, *Ann. Math. Stat.* **29**, 610 (1958).
- ⁴M. Hofert, *R Journal* **5**, 129 (2013)
- ⁵D P. Kroese, T. Taimre, Z. I. Botev, *Handbook of Monte Carlo methods*, John Wiley & Sons. (2011)
(邦訳: D.P. クローゼ、T. タイマー、Z. I. ボテフ著/伏見正則・逆瀬川浩孝監訳、モンテカルロ法ハンドブック、朝倉書店 2014)
- ⁶G. Livadiotis (ed.), *Kappa Distributions: Theory and Applications in Plasmas*, Elsevier, Amsterdam (2017).
- ⁷M. Oka, S. Ishikawa, P. Saint-Hilaire¹, S. Krucker, and R. P. Lin, *Astrophys. J.* **764**, 4 (2013).
- ⁸S. Olbert, in *Physics of the Magnetosphere*, ed. D. Carovillano & J. McClay (Astrophysics and Space Science Library, Vol. 10; Dordrecht: Reidel), 641 (1968)
- ⁹D. Summers and R. M. Thorne, *Phys. Fluids B*, **3**, 1835, doi:10.1063/1.859653 (1991).
- ¹⁰V. M. Vasyliunas, *J. Geophys. Res.* **73**, 2839 (1968).
- ¹¹四辻 哲章、*計算機シミュレーションのための確率分布乱数生成法*、プレアデス出版, ISBN:4903814351 (2010)