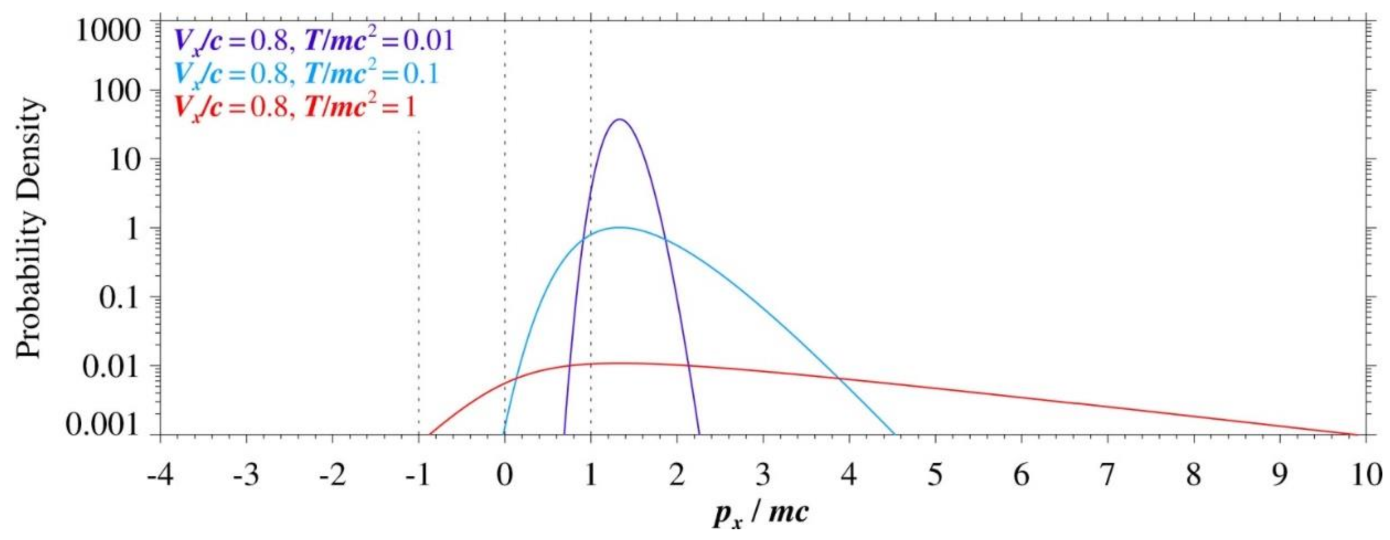
相対論的正規混合分布モデル

上野　玄太　　モデリング研究系　教授

相対論的プラズマの分布関数を解析するため、複数の相対論的Maxwell分布が構成する混合分布モデルを提案する。Maxwell分布は正規分布であるため、相対論的Maxwell分布を相対論的正規分布と呼ぶことにする。

まず、従来なされていなかった、バルク速度がゼロでない場合の正規化定数の導出を含め、相対論的正規分布の基本的な特性をまとめた。



確率変数	$\boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^3$	無次元　$\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^3$
パラメータ	$\boldsymbol{V} \in \mathbb{R}^3, \lvert\boldsymbol{V}\rvert < c$(バルク速度) $T \in \mathbb{R}, T > 0$(温度)	$\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^3, \lvert\boldsymbol{\beta}\rvert < 1$(バルク速度) $\Theta \in \mathbb{R}, \Theta > 0$(温度)
確率密度関数	$\frac{1}{C}\exp\left[-\frac{\gamma\left(\sqrt{m^2c^4+c^2\lvert\boldsymbol{p}\rvert^2}-\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{p}\right)}{T}\right]$	$\frac{1}{Z}\exp\left[-\gamma\left(\sqrt{1+\lvert\boldsymbol{u}\rvert^2}-\boldsymbol{\beta}'\boldsymbol{u}\right)\Theta^{-1}\right]$
(ローレンツ因子)	$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\lvert\boldsymbol{V}\rvert^2/c^2}}$	$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\lvert\boldsymbol{\beta}\rvert^2}}$
(正規化定数)	$C = 4\pi m^2 cT\gamma K_2(mc^2/T)$	$Z = 4\pi\Theta\gamma K_2(\Theta^{-1})$
最頻値	$\gamma m\boldsymbol{V}$	$\gamma\boldsymbol{\beta}$
1次モーメント	$\gamma m\boldsymbol{V}\frac{K_3(mc^2/T)}{K_2(mc^2/T)}$	$\gamma\boldsymbol{\beta}\frac{K_3(\Theta^{-1})}{K_2(\Theta^{-1})}$
2次モーメント	$\gamma^2m^2\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}\frac{K_4(mc^2/T)}{K_2(mc^2/T)}+mT\mathbf{I}\frac{K_3(mc^2/T)}{K_2(mc^2/T)}$	$\gamma^2\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}'\frac{K_4(\Theta^{-1})}{K_2(\Theta^{-1})}+\Theta\mathbf{I}\frac{K_3(\Theta^{-1})}{K_2(\Theta^{-1})}$

また、相対論的正規分布のパラメータ(バルク速度、温度)の最尤推定量(MLE)が満たす単純な方程式(1)(2)を導出した。

標本統計量

$$\begin{cases} G \equiv \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\sqrt{1+\lvert\boldsymbol{u}_j\rvert^2} \\ \boldsymbol{m} \equiv \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\boldsymbol{u}_j \end{cases}$$

(1) $$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \frac{\boldsymbol{m}}{\sqrt{\lvert\boldsymbol{m}\rvert^2+\left(\frac{K_3(\hat{\Theta}^{-1})}{K_2(\hat{\Theta}^{-1})}\right)^2}}$$ [$\hat{\Theta}$の関数]

(2) $$\hat{\Theta} = \frac{1}{3}\left[\sqrt{1+\lvert\boldsymbol{m}\rvert^2\left(\frac{K_2(\hat{\Theta}^{-1})}{K_3(\hat{\Theta}^{-1})}\right)^2}\,G-\lvert\boldsymbol{m}\rvert^2\frac{K_2(\hat{\Theta}^{-1})}{K_3(\hat{\Theta}^{-1})}-\frac{K_1(\hat{\Theta}^{-1})}{K_2(\hat{\Theta}^{-1})}\right]$$ [$\hat{\Theta}$の関数]

(2)をNewton法で解き$\hat{\Theta}$を求める　→ (1)に代入し$\hat{\boldsymbol{\beta}}$を求める

次に、相対論的正規分布の重み付き和で表現される相対論的正規混合モデルを提案した。

相対論的正規分布(無次元)
$$\phi(\boldsymbol{u};\boldsymbol{\beta},\Theta) \equiv \frac{1}{Z(\boldsymbol{\beta},\Theta)}\exp\left[-\frac{1}{\sqrt{1-\lvert\boldsymbol{\beta}\rvert^2}}\left(\sqrt{1+\lvert\boldsymbol{u}\rvert^2}-\boldsymbol{\beta}'\boldsymbol{u}\right)\Theta^{-1}\right]$$

g成分混合分布モデル　$\sum_{i=1}^{g}\pi_i\phi(\boldsymbol{u};\boldsymbol{\beta}_i,\Theta_i)$　ただし$\pi_i>0,\ \sum_{i=1}^{g}\pi_i=1$　　g=2 が当面の目標

データ　$\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n$　← PICシミュレーションの結果 n =7,849,273 (784万)

最尤法　$\sum_{j=1}^{n}\log\sum_{i=1}^{g}\pi_i\phi(\boldsymbol{u}_j;\boldsymbol{\beta}_i,\Theta_i)$　← 対数尤度の最大化により$\pi_i,\boldsymbol{\beta}_i,\Theta_i$ を推定

相対論的正規混合分布のパラメータ、すなわち各成分分布の混合比率、バルク速度、および温度を推定するためのEMアルゴリズムを開発した。特に、EMアルゴリズムのMステップにおいては、完全データの対数尤度の条件付き期待値を最大化することが保証されている解を持つ方程式(3)(4)を導出した。

初期値　$\pi_i^{(0)},\boldsymbol{\beta}_i^{(0)},\Theta_i^{(0)}\quad(i=1,\cdots,g)$

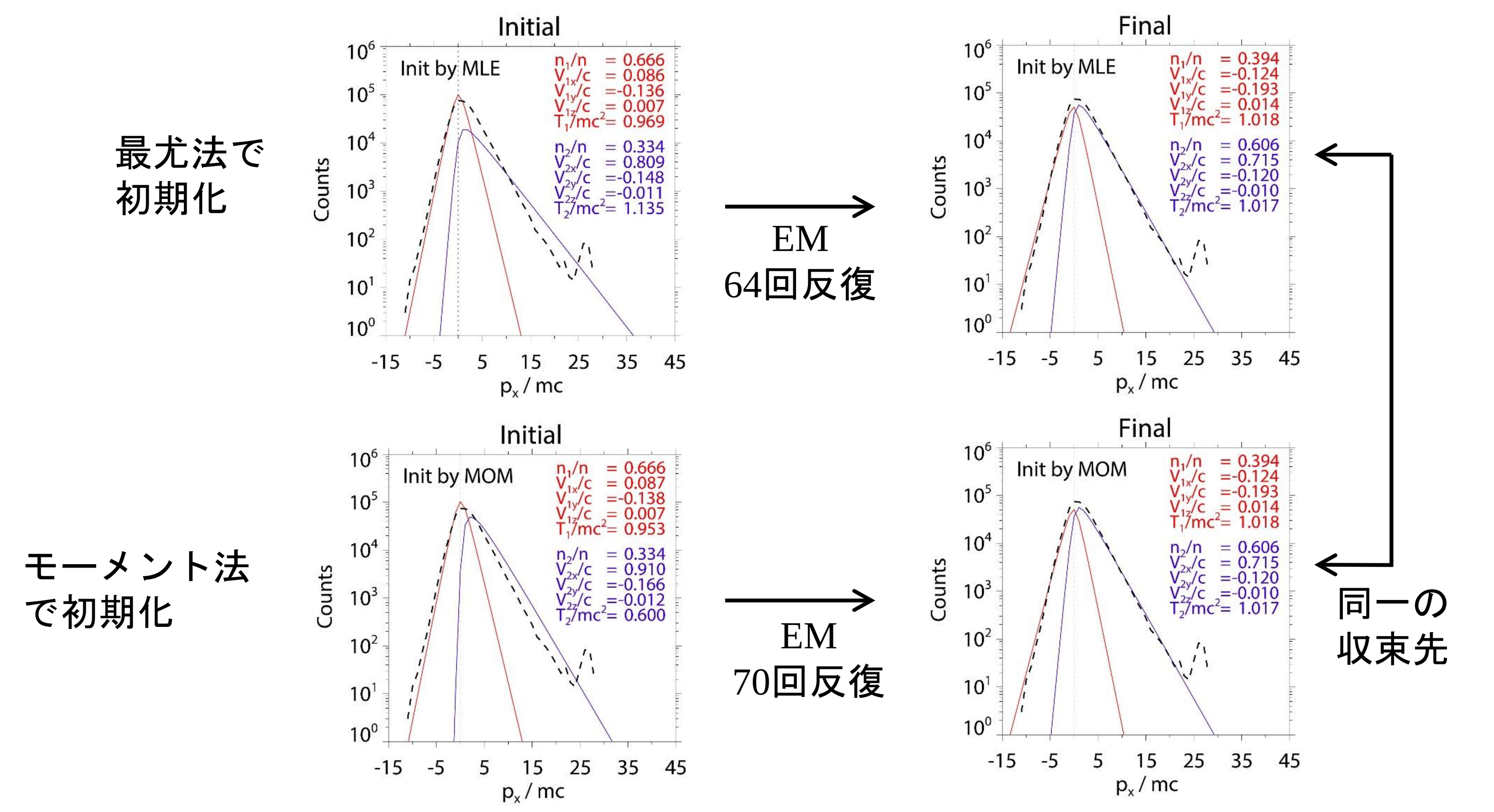
Eステップ
$$\tau_{ij}^{(k)} = \frac{\pi_i^{(k)}\phi(\boldsymbol{u}_j;\boldsymbol{\beta}_i^{(k)},\Theta_i^{(k)})}{\sum_{i=1}^{g}\pi_i^{(k)}\phi(\boldsymbol{u}_j;\boldsymbol{\beta}_i^{(k)},\Theta_i^{(k)})}$$

Mステップ
$$\pi_i^{(k+1)} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{g}\tau_{ij}^{(k)}$$

(3) $$\boldsymbol{\beta}_i^{(k+1)} = \frac{\boldsymbol{m}_i^{(k)}}{\sqrt{\lvert\boldsymbol{m}_i^{(k)}\rvert^2+\left(\frac{K_3(1/\Theta_i^{(k+1)})}{K_2(1/\Theta_i^{(k+1)})}\right)^2}}$$

(4) $$\Theta_i^{(k+1)} = \frac{1}{3}\left[\sqrt{1+\lvert\boldsymbol{m}_i^{(k)}\rvert^2\left(\frac{K_2(1/\Theta_i^{(k+1)})}{K_3(1/\Theta_i^{(k+1)})}\right)^2}\,E_i^{(k)}-\lvert\boldsymbol{m}_i^{(k)}\rvert^2\frac{K_2(1/\Theta_i^{(k+1)})}{K_3(1/\Theta_i^{(k+1)})}-\frac{K_1(1/\Theta_i^{(k+1)})}{K_2(1/\Theta_i^{(k+1)})}\right]$$

EMアルゴリズムのパラメータの初期値には、データを成分分布の数と同数のグループに分割し、各グループで得られる最尤推定値またはモーメント法による推定値を使用する。

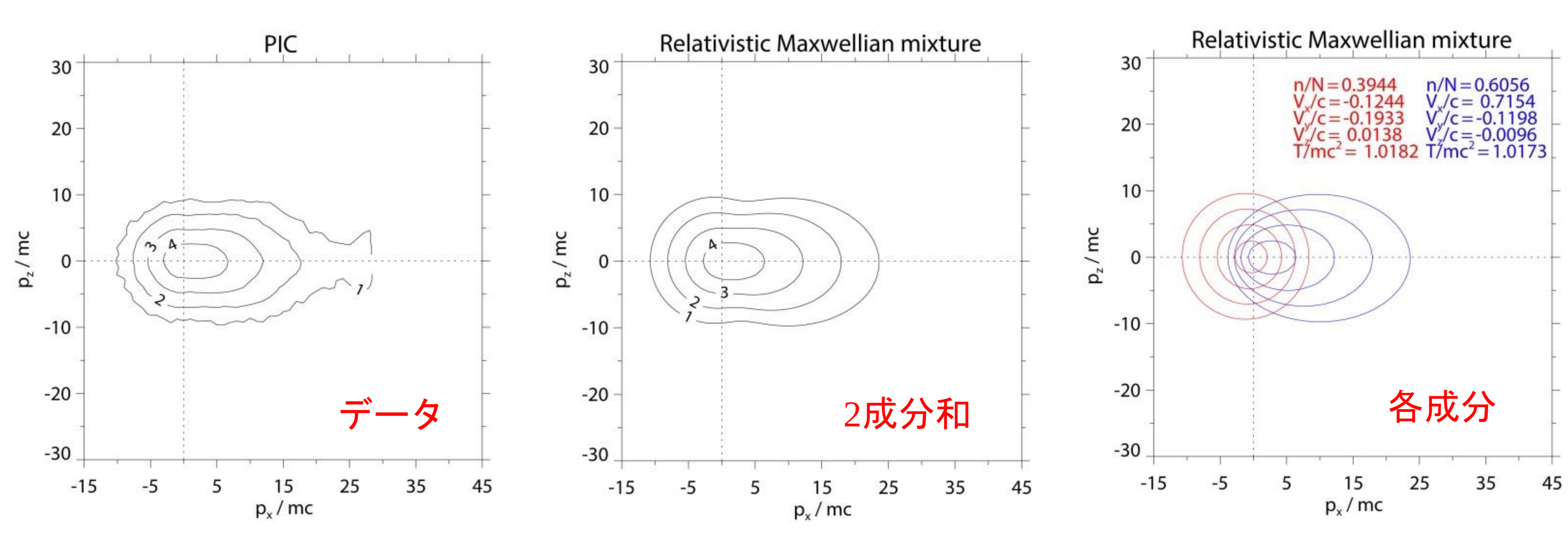


相対論的な電子-陽電子プラズマのPICシミュレーションの結果に2成分の相対論的正規混合分布を適用し、シミュレートされた分布関数を2個の成分に分離した。その結果、各成分のマクロ量の情報を抽出が可能となった。例えば、一方の成分のバルク速度は大きく、もう一方の成分はほぼ停滞していること、2個の成分の温度はほぼ同じで、PICシミュレーションの初期温度と一致していることが分かった。これらのパラメータに基づいて、衝撃波や不連続性などの大規模なプラズマ環境を推測することが可能である。

k	$\pi_1^{(k)}$	$\beta_{1x}^{(k)}$	$\beta_{1y}^{(k)}$	$\beta_{1z}^{(k)}$	$\Theta_1^{(k)}$	$\pi_2^{(k)}$	$\beta_{2x}^{(k)}$	$\beta_{2y}^{(k)}$	$\beta_{2z}^{(k)}$	$\Theta_2^{(k)}$	$\ell(\Psi^{(k)})$
0	0.666	0.086	–0.136	0.007	0.969	0.334	0.809	–0.148	–0.011	1.135	-5.553514×10^7
64	0.394	–0.125	–0.193	0.014	1.018	0.606	0.715	–0.120	–0.010	1.017	-5.510865×10^7

バルク速度差の物理的意味

等温の物理的意味



Reference
Genta Ueno and Seiji Zenitani, "Relativistic Maxwellian mixture model", Physics of Plasmas **28**, 122106 (2021) https://doi.org/10.1063/5.0059126