不変集合の概念に依拠した階層の分離と連結と, その雲微物理過程への応用可能性 (火山噴煙にも), に関する若干の考察

10, Nov, 2008, 火山噴火の数値シミュレーション研究集会

海洋研究開発機構
地球シミュレータセンター
島 伸一郎

概要

「連結階層シミュレーション」とは何か, 不変集合に着目し, 数学的な定式化を試みる

さらに, 雲微物理過程(や火山噴煙)への適用可能性について議論する

話の流れ

1. 軽く自己紹介
2. 連結階層シミュレーション
3. 不変多様体の概念に依拠した階層の分離と連結
4. 例1) 振動性反応拡散系への適用
5. 例2) 雲微物理過程への適用 (火山噴煙にも共通)
6. まとめと今後の課題

1. 自己紹介

島 伸一郎

2005/3 京都大学 理学研究科 物理学･宇宙物理学専攻 博士(理学)

2005/4〜 海洋研究開発機構 地球シミュレータセンター 研究員

専門: 非線形動力学, 数理物理学, シミュレーション科学

これまでの研究

- 結合自励振動子系、反応拡散系、非局所結合系、回転らせん波
  - 自励振動子集団の協同現象, 自発的にどの様な動的構造が出来るのか？
- 線状弾性体の非線形動力学 (暴れるホースのモデル)

現在の研究

- 連結階層シミュレーションの基礎理論の探求と応用 (複雑な現象もなるべく単純に)
  - 反応拡散系において連結階層シミュレーションの検証
  - 超水滴法という新しい雲解像モデルの開発, 連結階層の可能性

2. 連結階層シミュレーションとは?

物理法則の階層性

注目する現象により, 現象を記述する物理法則は変わってくる

e.g.「分子原子の運動方程式」と 熱力学極限における「状態方程式」

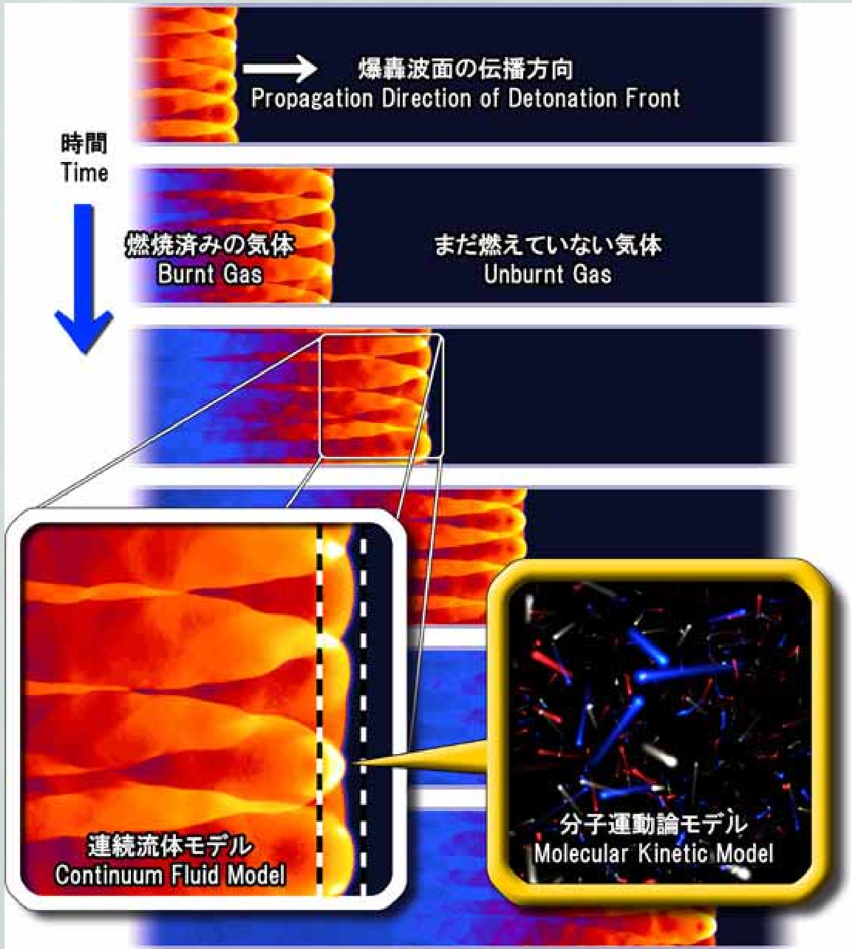
複数の階層にまたがる現象が存在する

注目する系の部分により, 階層が違う事がある.

適切に階層を分離し連結することで,
効率良い数値計算を目指す

例0. 爆轟の連結階層シミュレーション(河野)

局所平衡性の破れをきちんと評価する



3. 不変集合の概念に依拠した階層の分離と連結

一般的な視点から1つの定式化を試みるが, まだ厳密で無い部分も多々ある

ミクロモデル, ミクロ原理, ミクロ階層

ミクロモデルは以下の様な力学系で表されるとする,

$$\frac{d\boldsymbol{A}}{dt} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{A}), \qquad \boldsymbol{A}(t) \in \Gamma$$

偏微分方程式系も(無限にあるかもしれないが)加算個の自由度に分解できるとして上記に含む

ノイズの様なランダム力は今の所考えない

不変集合

以下を満たす $\mathrm{I} \subset \Gamma$ を, Γの不変集合と呼ぶ.

$$^{\exists}t,\ \boldsymbol{A}(t) \in \mathrm{I} \Rightarrow {}^{\forall}t,\ \boldsymbol{A}(t) \in \mathrm{I}$$

.. 続き

マクロモデル, マクロ階層

不変集合 I 上に取られた適当な座標系を ϕ としよう

この時, 不変集合 I の近傍における，ミクロのダイナミクスは ϕ について閉じた形で表せるであろう.

$$\frac{d\phi}{dt} = F_{\mathrm{macro}}(\phi)$$

これをマクロモデル, ϕ をマクロ変数と呼ぶ

マクロモデルの導出

特異摂動展開や繰り込みを使う事で，与えられた ϕ に対してマクロモデルが導出できる, はず.

不変集合が安定な場合

長時間後の系の挙動を知りたいならば, マクロモデルを調べれば十分

連結階層により, ミクロからマクロへの遷移を調べる事が出来る.

不変集合が安定集合と不安定集合を持つ場合

階層の共存や，階層間の遍歴が起こる可能性がある.

→ 連結階層シミュレーションの出番！(特にほとんどの時空間領域でマクロに滞在する現象に対して効果的)

4. 例1) 振動性反応拡散系への適用

4の概要

「不変集合の概念に依拠した連結階層シミュレーション」と言う方法論が，拡散結合する自励振動子場の数値シミュレーションに有効であるか検証する.

今回, **マクロの自発的な破綻を伴わない現象について, 誤差O(ε ^2)の連結方法を提案し，系の振舞いが定性的に再現される事を確認**

4の話の流れ

1. 拡散結合する自励振動子系とは?
2. CGL方程式と位相方程式の連結
3. 連結階層シミュレーションの結果
4. まとめと今後の展開

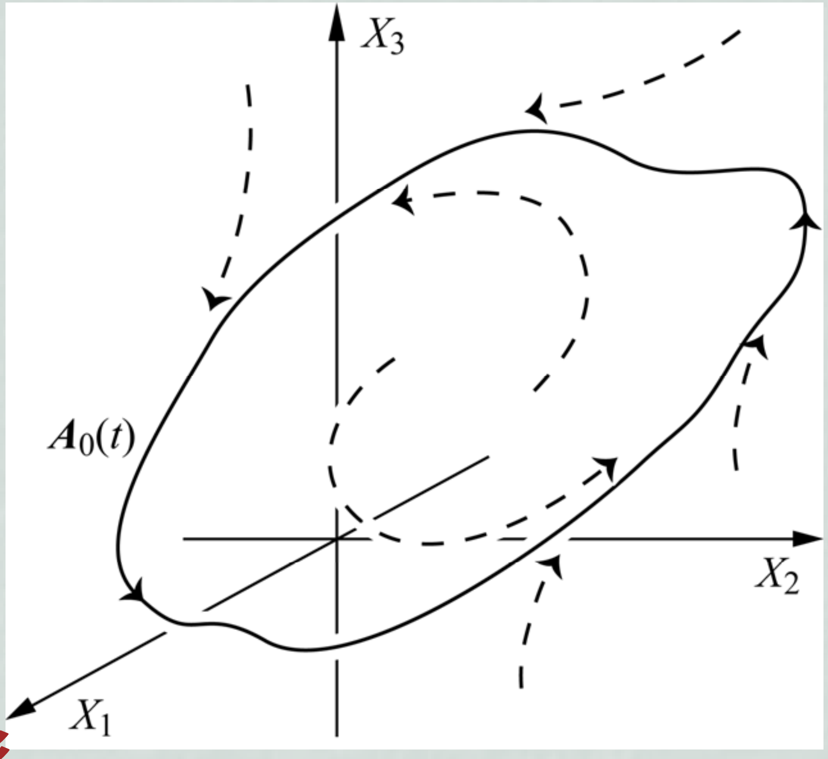
4.1. 拡散結合する自励振動子系とは?

自励振動子

ある周期軌道 $\boldsymbol{A}_0(t+T)=\boldsymbol{A}_0(t)$ が漸近安定な力学系

$$\frac{d\boldsymbol{A}}{dt}=\boldsymbol{F}(\boldsymbol{A}).$$

エネルギーの流入と散逸が必要



Stuart-Landau(SL) 方程式

$$\frac{dA}{dt}=(1+i\omega_0)A-(1+ic_2)|A|^2A, \qquad A\in\boldsymbol{C}$$

力学系の超臨界Hopf分岐点近傍における標準形

拡散結合する自励振動子系 (振動性反応拡散系)

$$\underbrace{\boxed{\partial_t \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{A})}}_{\text{自励振動子}} + \underbrace{\boldsymbol{D}\Delta\boldsymbol{A}}_{\text{拡散項}}.$$

Complex Ginzburg-Landau(CGL) 方程式

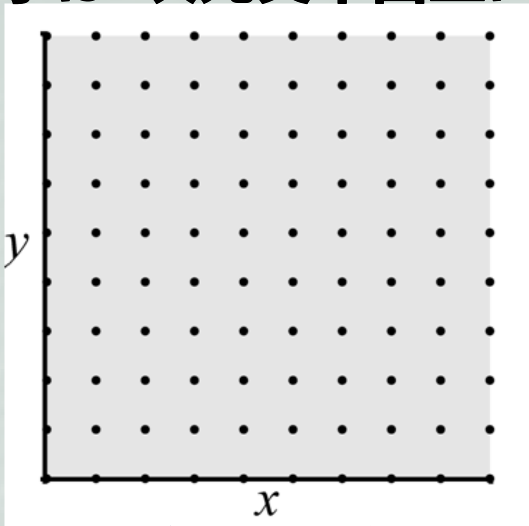
$$\partial_t A = (1+i\omega_0)A - (1+ic_2)|A|^2 A + (1+c_1)\Delta A, \qquad A \in \boldsymbol{C}$$

反応拡散系の超臨界Hopf分岐点近傍における標準形

今回, CGL eq. を我々の原理と見なす

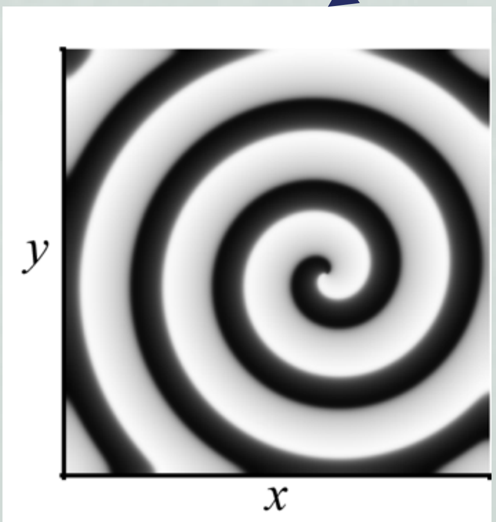
状態の表示について

自励振動子は2次元実平面上に分布している

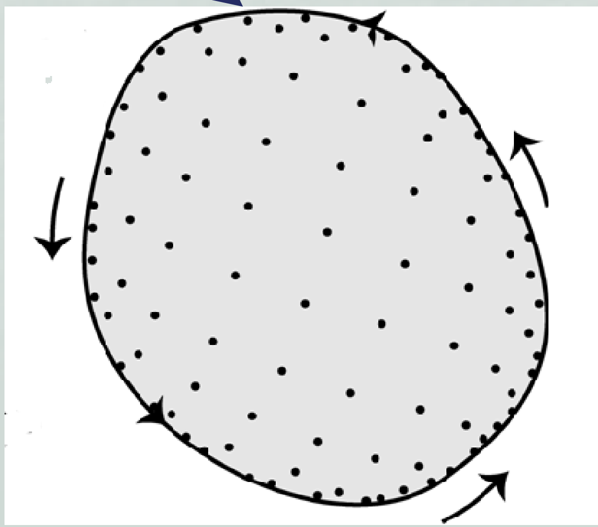


各点における振動子の状態を色で表す

実平面から状態空間への写像$A(\boldsymbol{r},t)$



実平面上でのパターン



個別振動子の状態空間表示

4.3. CGL方程式(ミクロ)と位相方程式(マクロ)

原理, ミクロ階層: Complex Ginzburg-Landau (CGL) equation

$$\partial_t A = (1 + i\omega_0)A - (1 + ib)|A|^2 A + (1 + a)\Delta A, \quad A \in \mathbf{C}$$

相空間:

$$\Gamma = \prod_{x} \mathbf{C}$$

不変集合: 一様振動解を表す軌道

$$\mathrm{I} = \{\prod_{x} \exp(i\omega t) \mid {}^{\forall}t\}, \ \omega := \omega_0 - b$$

マクロ変数: 位相

$$\phi \in \mathbf{R}, \text{ 実際}, \mathrm{I} = \{\prod_{x} \exp(i\phi) \mid \phi \in \mathbf{R}\}$$

不変集合Iの近傍に拡張されたマクロ変数:

$$\phi(\boldsymbol{x}) = \Theta(\boldsymbol{x}) - b \log R(\boldsymbol{x}), \text{ ただし } A(\boldsymbol{x}) = R(\boldsymbol{x}) \exp(i\Theta(\boldsymbol{x}))$$

マクロモデル (不変集合の近傍で有効): 位相モデル

$$\partial_t \phi(\vec{\boldsymbol{r}}, t) = \omega + \alpha \nabla^2 \phi + \beta (\nabla \phi)^2 + O(\varepsilon^2),$$
$$\alpha = 1 + ab$$
$$\beta = b - a$$

マクロがO(ε) で有効な必要十分条件は, 0< **ε** <<1**として**,

$$\left\| A \right| - 1 \right| < \varepsilon \quad \cdots ①$$

i.e., **位相特異点の周りでマクロモデルは破綻する**

ミクロ-マクロの連結方法: (ミクロ領域のActivation/Deactivation)

条件①はミクロでのみ判定できる.

a) **マクロが自らは破綻しない現象**

毎ステップで,

i) **条件①を満たす領域を判定**

ii) **さらにひとまわり大きな領域をミクロに割り当てる**

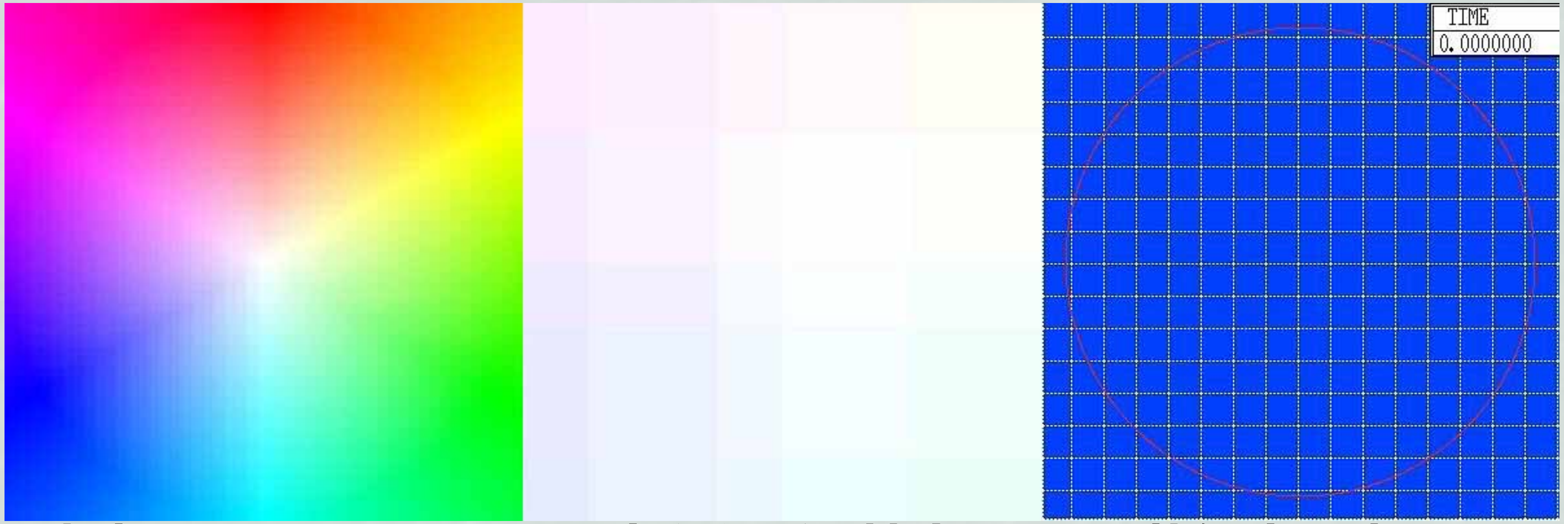
b) **マクロが自ら破綻する現象**

不変集合から系が離れていく所をどう評価するか？ (**思案中**)

4.4. 連結階層シミュレーションの結果

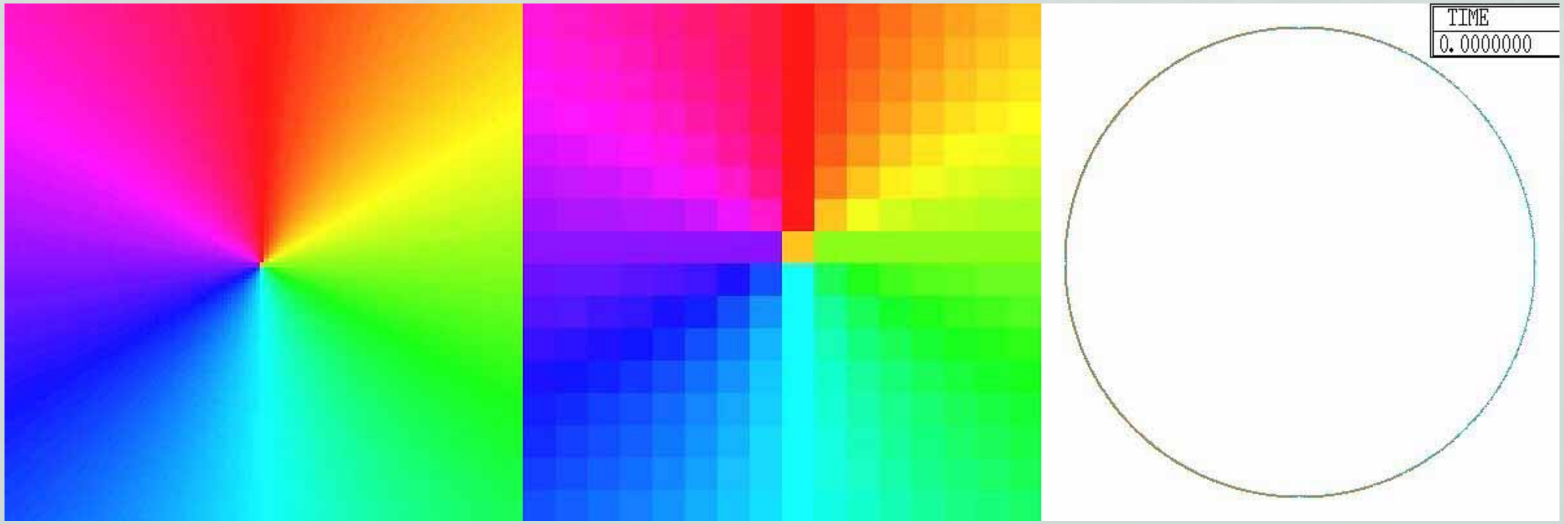
位相モデルの破綻を確認

CGL eq. による回転らせん波 (厳密)



実空間でのパターン　　中心付近を拡大　　状態空間表示

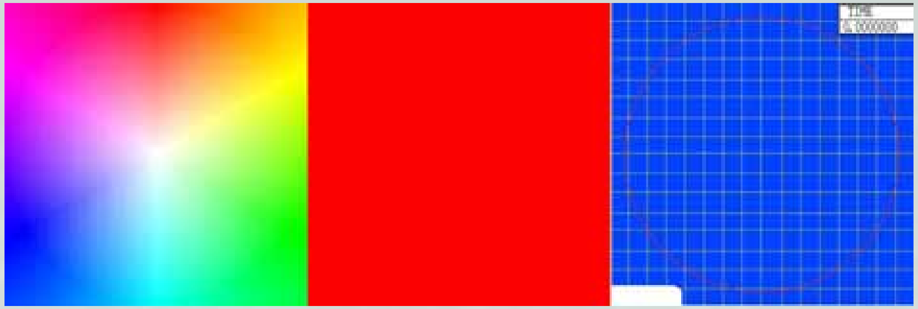
位相モデルによる回転らせん波: 位相特異点の振舞いを再現できない



原理計算 と 連結階層計算の比較

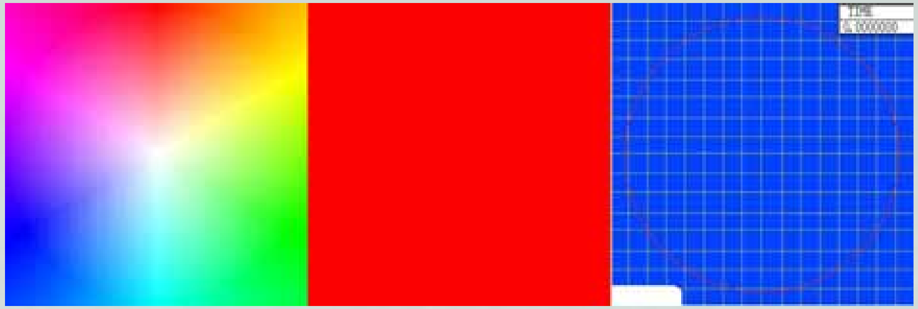
孤立した位相特異点 ミクロ領域

実空間でのパターン

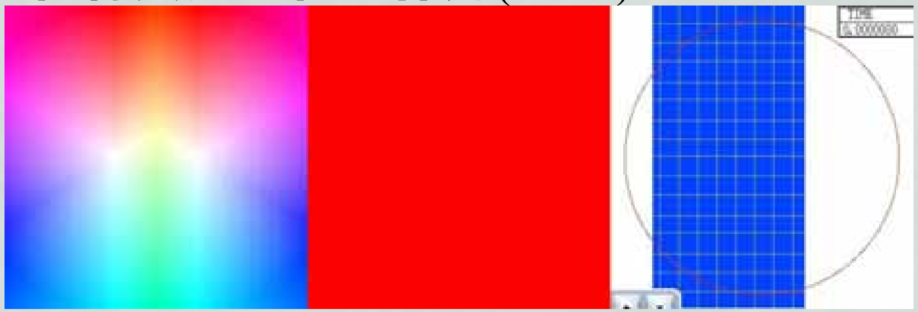


状態空間表示

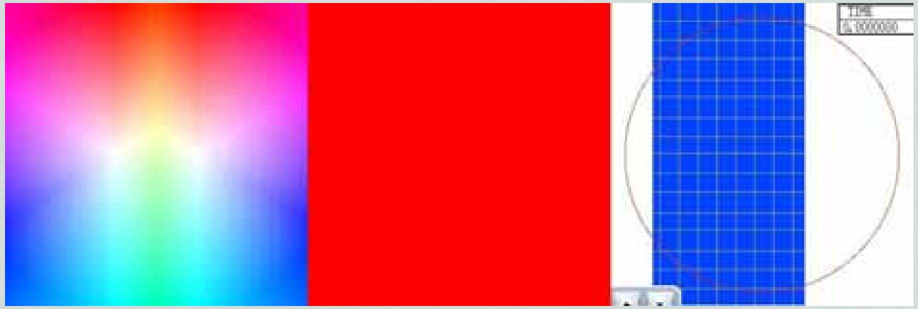
ε =0.1



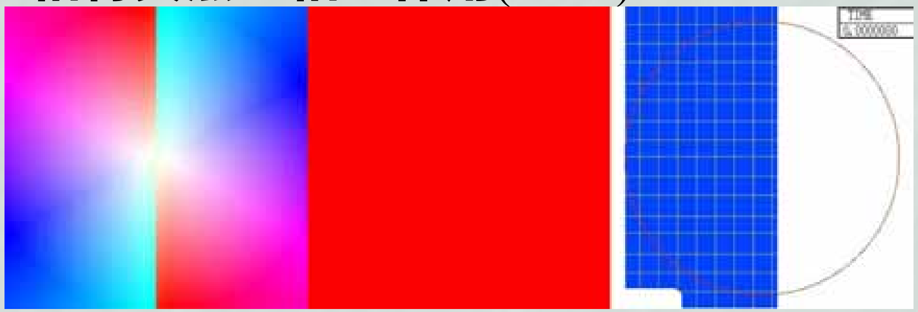
位相特異点の相互作用(＋－)



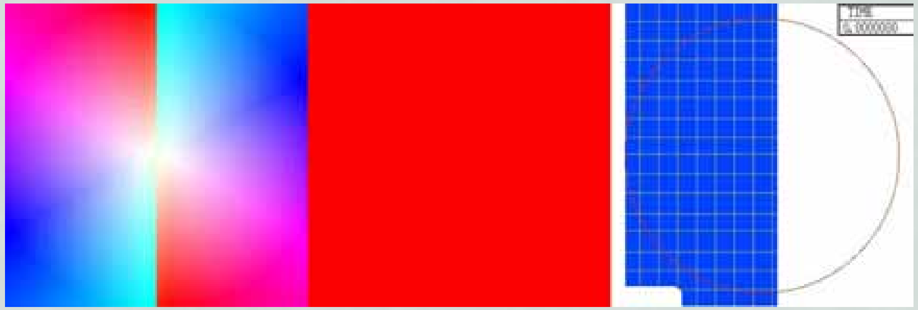
ε =0.05



位相特異点の相互作用(＋＋)



ε =0.05



Defect Turbulence

ε =0.15

4.5. まとめと今後の展開

CGL方程式と位相方程式の連結階層シミュレーションを行った

マクロの自発的な破綻を伴わない現象について, 誤差O(ε ^2)の連結方法を提案

系の振舞いを定性的に再現する事を確認

定量的な評価

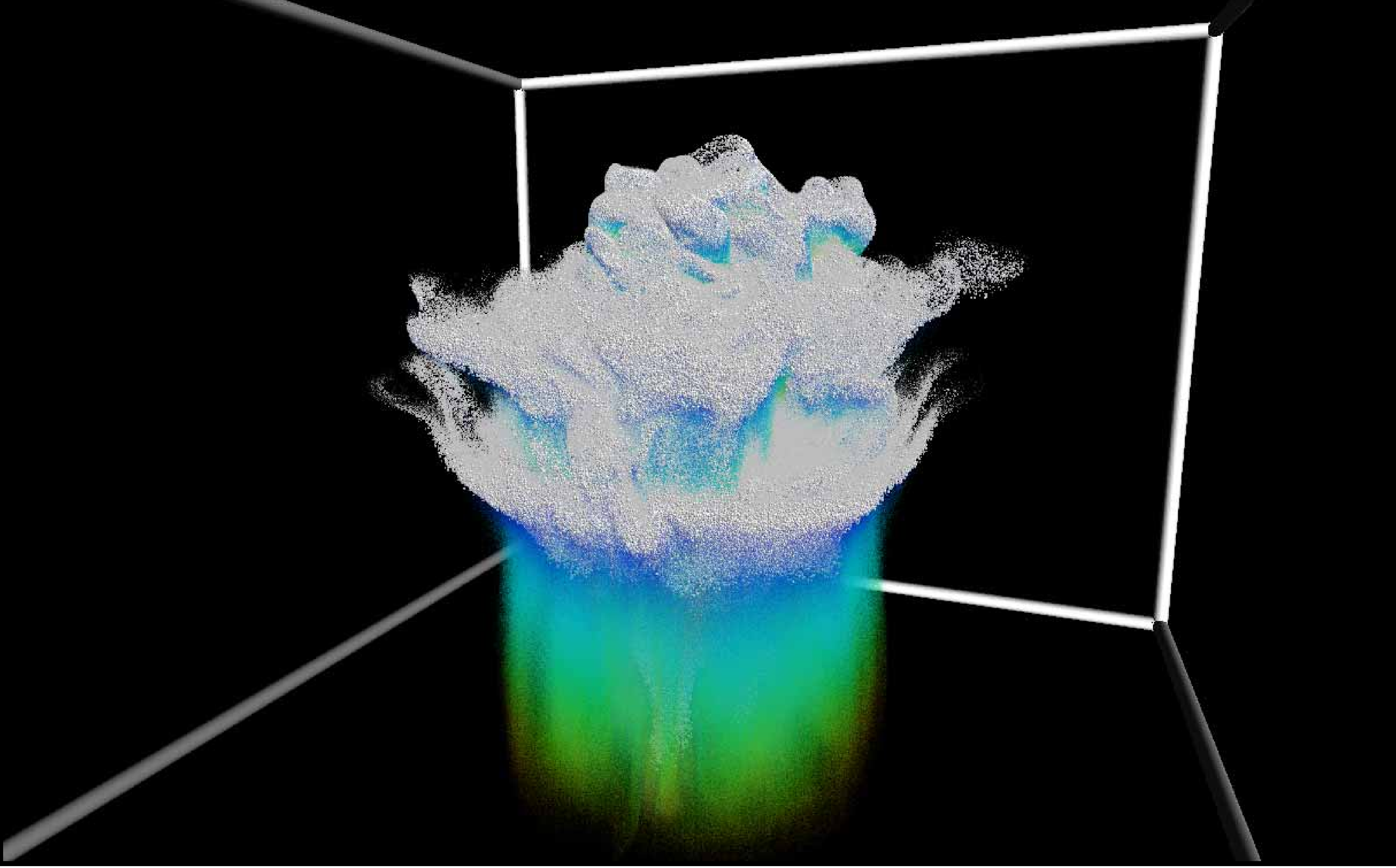
誤差はO(ε ^2) になっているか？

phase turbulenceからamplitude turbulenceへの遷移を連結階層シミュレーションする

マクロの自発的な破綻を伴う → activation/deactivationの扱いが理論的に難しい

高次の連結階層シミュレーション(位相縮約の2次が必要)

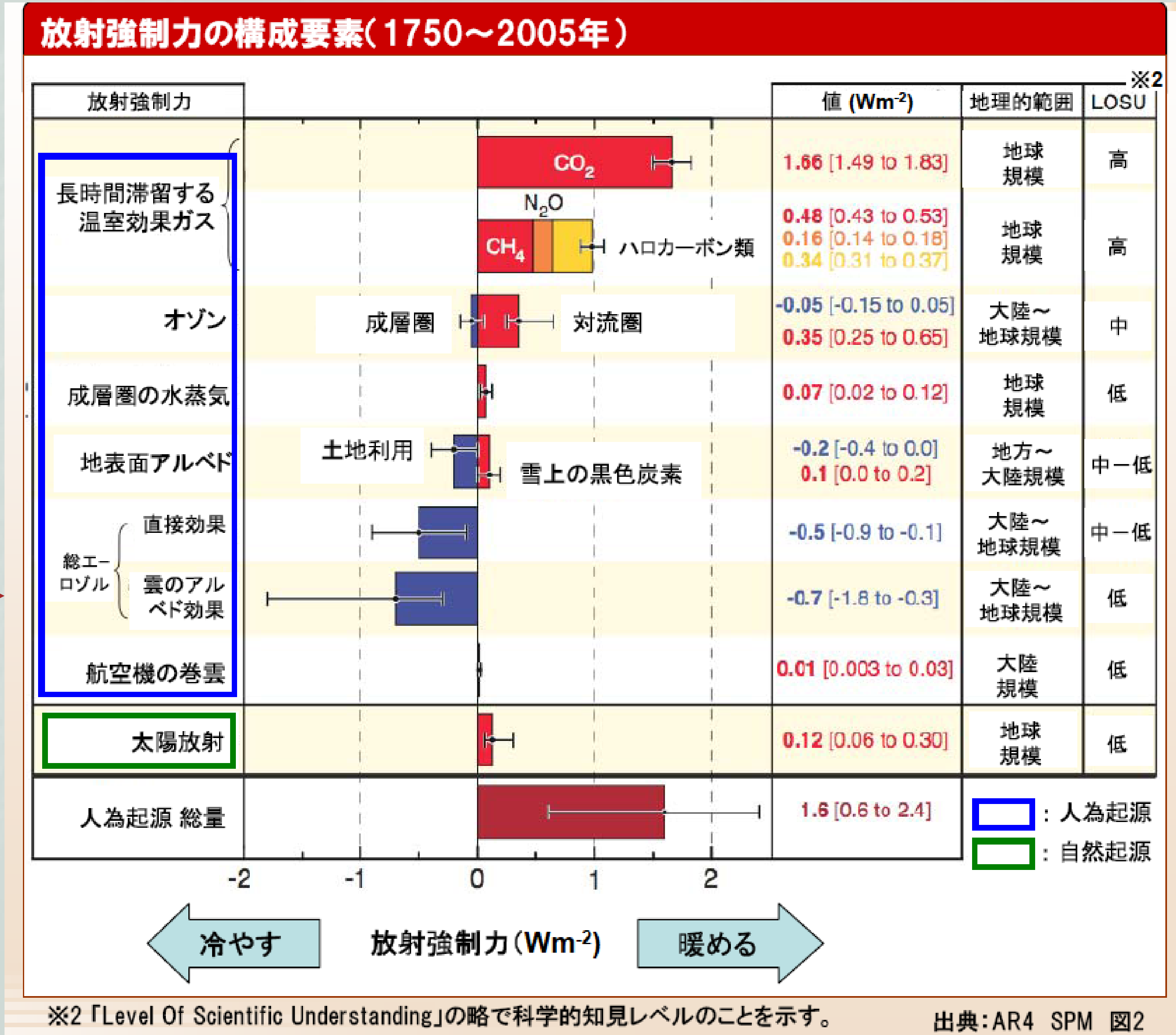
5. 例2) 雲微物理過程(や火山噴煙)への適用可能性



5.1 動機: 雲を正確にシミュレーションするのは難しい

Aerosol Indirect Effect (AIE) on radiative forcing, エアロゾル間接効果

AIE



5.2. 雲に関わる物理法則

大きく二つに分けられる

雲の力学過程

大気の流れなど, **流体力学的に扱う事ができる部分**

↓↑ **相互作用**

雲の微物理過程

雲や雨の構成要素である**水滴の振舞いに関わる部分**

- 水滴の衝突併合
- 核生成と凝結成長
- 風と重力による運動
- 様々な化学成分のエアロゾルとその混合や化学反応
  海塩(NaCl), 硫酸塩, 有機炭素, 黒色炭素, 硝酸塩, 等
- 氷晶(雪, ひょう, あられ)への相変化 , 帯電過程, 分裂過程, 等々

精密な数値シミュレーションが難しい (気象学･気候学の重要な課題の1つ)

- 膨大な量の水滴(10^9個/m^3)
- 本質的に非定常現象

火山噴煙と類似の系！

5.3. 雲形成のミクロモデル

雲力学過程のモデル(湿潤大気の流体力学方程式)

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho\nabla\cdot\vec{\mathbf{v}},$$

$$\frac{Dq_v}{Dt} = S_v,$$

$$\rho\frac{D\vec{\mathbf{v}}}{Dt} = -\nabla P - \rho\,\vec{\mathbf{g}},$$

$$\frac{D\theta}{Dt} = -\frac{L}{c_p\Pi}S_v,$$

$$P = \rho R_d T.$$

$$\rho(\mathbf{r},t)S_v(\mathbf{r},t) = \sum_i\left(-\frac{dm_i}{dt}\right)\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i(t))$$

$\rho = \rho_d + \rho_v$: 湿潤大気密度

ρ_w : 水蒸気でない水の密度

$q_v = \rho_v / \rho$: 水蒸気の混合比

$q_w = \rho_w / \rho$: 水蒸気でない水の混合比

雲微物理過程のモデル

実水滴(エアロゾル/雲粒/降水粒子の総称)のダイナクミクス

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{v}_i,\quad \frac{d\mathbf{a}_i}{dt} = \boldsymbol{f}(\mathbf{a}_i),\quad P_{jk}$$ = 実水滴 j と k の衝突併合確率

.. 続き

ミクロモデルの数値計算手法

我々は超水滴法という新しい, 粒子による, 確率的な, 雲微物理過程の計算スキームを開発した

これを使う事で, ミクロモデルを効率よく正確に計算できる様になると期待される

しかし, それでも計算は非常に重い!

EARTH SIMULATOR

warm bubble case (3D, Δz= 8 m)

grid: 624x1024x1024, 粒子: 約10^10個, ES 256ノード

T = 60 [sec]

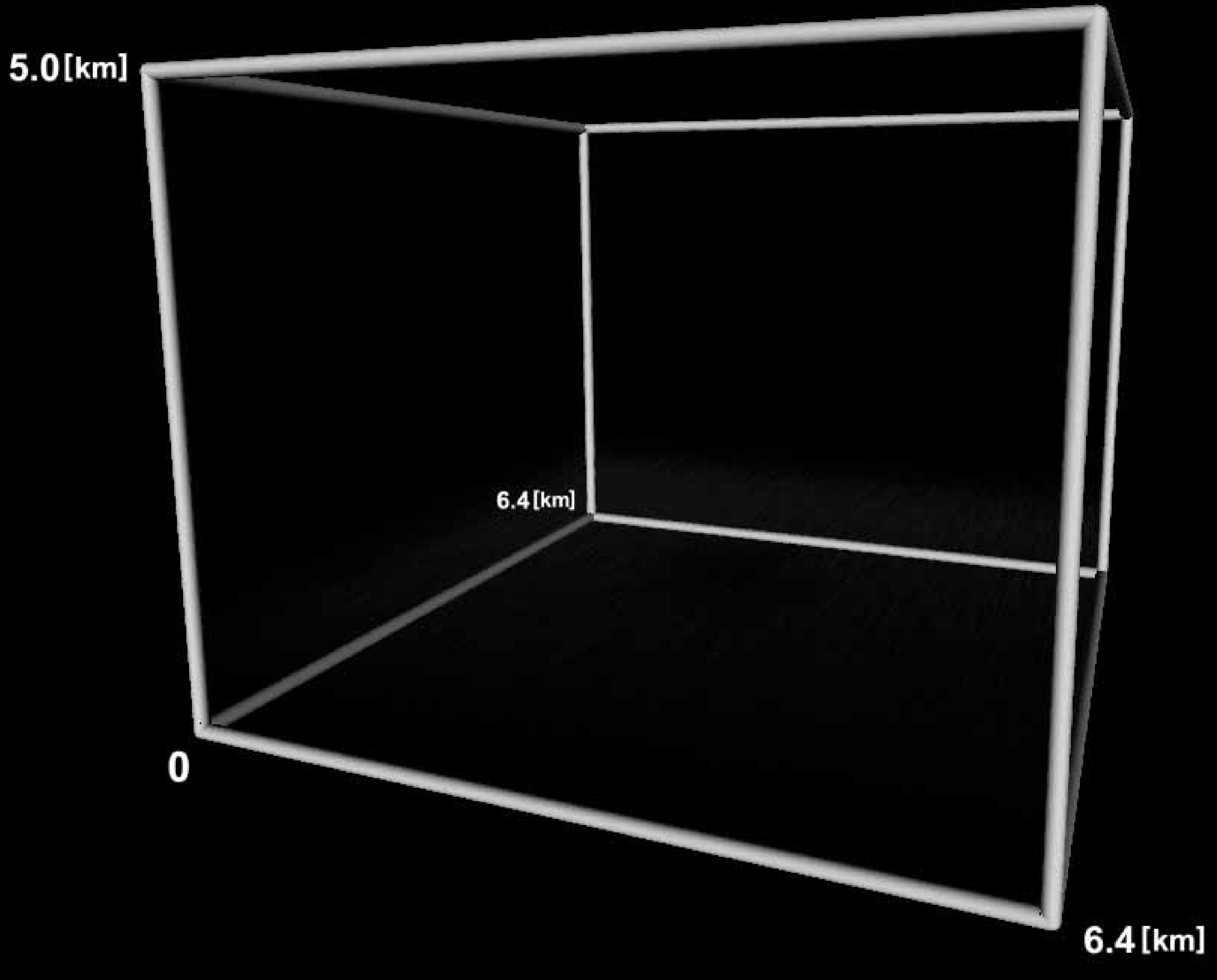
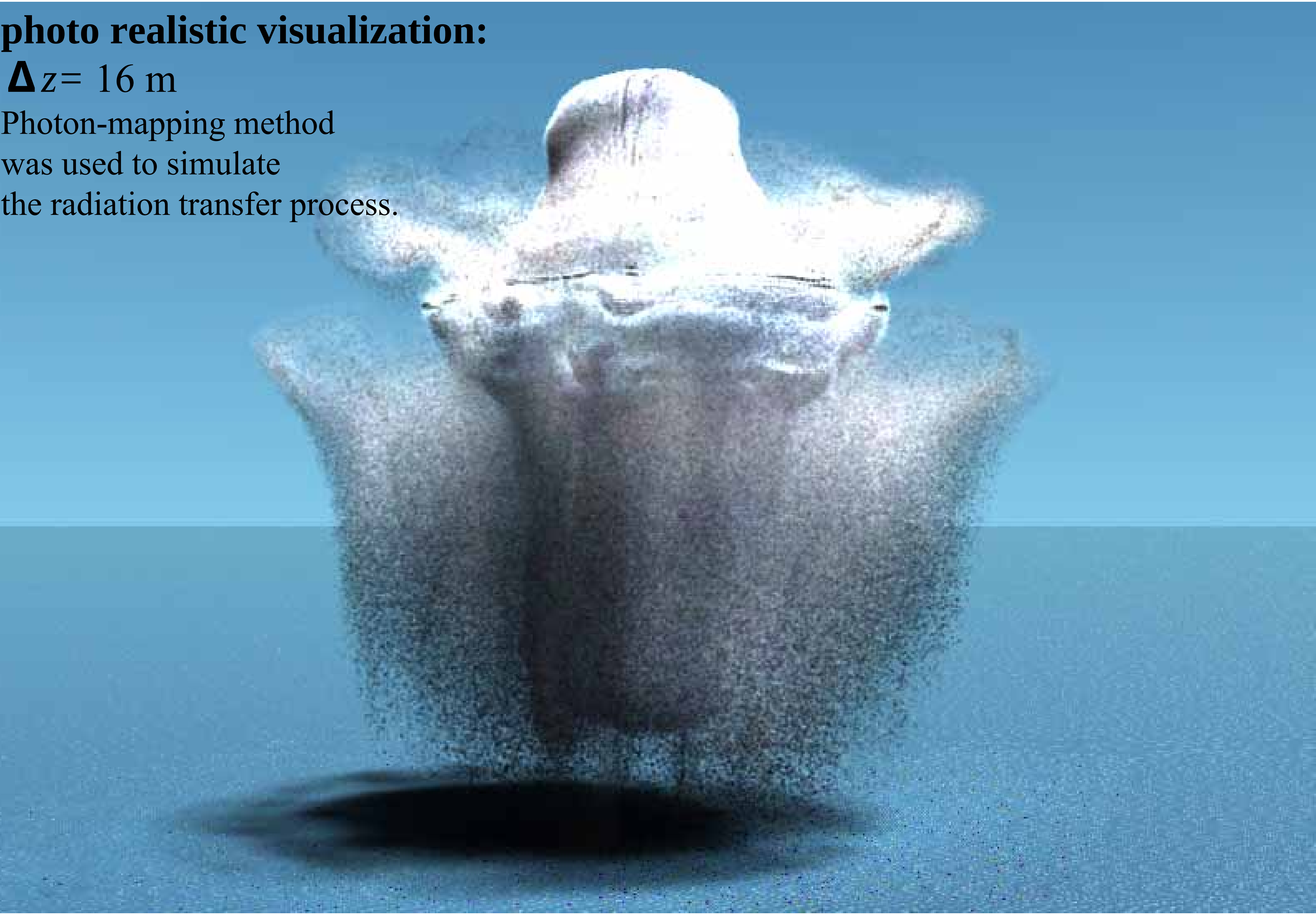


photo realistic visualization:

Δz= 16 m

Photon-mapping method
was used to simulate
the radiation transfer process.



5.4. 雲微物理過程のマクロモデル

導出のためには..

- 不変集合の探索から始めなければいけない
  - 例えば, 雨粒の分布はしばしば指数分布に従うと言う観測結果がある (Marshall and Palmer, 1948)
  - これは適切な不変集合かもしれない
  - 今, 雲粒と雨粒がそれぞれ指数分布になると言う, 不変集合が存在するとしよう
  - すると, 雲粒と雨粒の数密度と質量密度をマクロ変数と取れる (平均粒径を決めると指数分布の形は定まる)
- 導かれるモデルは次の様になるであろう

$$\frac{DN_r}{Dt} = f_r(N_r, N_c, q_c, q_r), \quad \frac{DN_c}{Dt} = f_c(N_r, N_c, q_c, q_r),$$

$$\frac{Dq_r}{Dt} = g_r(N_r, N_c, q_c, q_r), \quad \frac{Dq_c}{Dt} = g_c(N_r, N_c, q_c, q_r).$$

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho\nabla\cdot\vec{\boldsymbol{v}},$$

$$\frac{Dq_v}{Dt} = S_v,$$

$$\rho\frac{D\vec{\boldsymbol{v}}}{Dt} = -\nabla P - \rho\,\vec{\boldsymbol{g}},$$

$$\frac{D\theta}{Dt} = -\frac{L}{c_p\Pi}S_v,$$

$$P = \rho R_d T.$$

- これは雲微物理過程の2-momentバルク法の表式
  - ただし, 現行のモデルはfやgが経験的であり, 精度が不十分, また, いつ成り立つか分からない, つまり連結もできない

6. まとめ

不変集合の概念に依拠した連結階層シミュレーションの定式化に挑戦

振動性反応拡散系への適用

- うまく動いている風である
- マクロの自発的破綻が扱えるかどうか？

雲微物理過程(や火山噴煙)への適用可能性を検討

- まずは不変集合の探索から始めなくてはいけない

任意の系に適用できる様にするには, より精密化が必要

- どうやって不変集合をみつけるか
- マクロ変数はどうやって定義するか
- どうやってマクロモデルを導出するか
- どうやってミクロとマクロを連結するか