



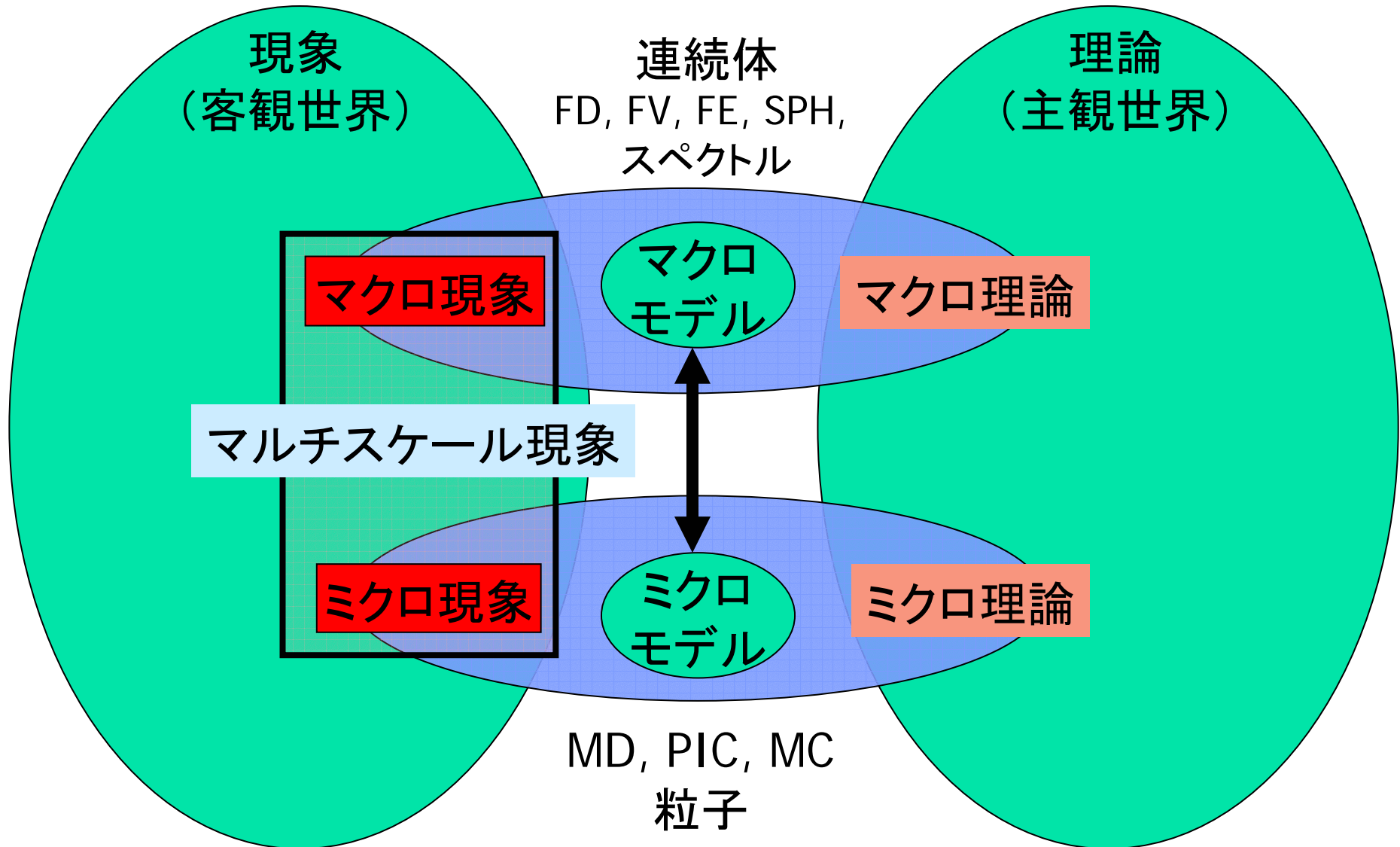
2005年度地球シミュレータ利用報告会

連結階層シミュレーション アルゴリズムの開発

草野完也、河野明男、島伸一郎、
杉山 徹、廣瀬重信、他

地球シミュレータセンター
連結階層シミュレーション研究開発プログラム
アルゴリズム研究グループ

連結階層シミュレーション



プロジェクトの目的

- ケーススタディ:
 - 様々なマルチスケール問題へ適用可能な連結階層シミュレーションアルゴリズムの研究開発

- 応用性の実証:
 - 現実の問題に対する応用性の実証

- 方法論としての一般化:
 - マルチスケールサイエンスにおける主たる方法論としての一般化

研究内容と計画(第2年次)

第1年次の成果を発展させると共に、4つのサブテーマに関する連結階層シミュレーションモデルの開発を開始する。

■ 大気

- 新しい雲微物理モデルの研究開発と、大気モデルと雲微物理モデルの連結手法の開発。

■ 燃焼流体

- 燃焼など化学反応を含む流体ダイナミクスを、正確に取り扱うことができる流体粒子連結モデルの手法開発。

■ プラズマ

- 磁気圏電離層結合系の連結階層シミュレーション研究。←(第1年次)
- フレア爆発、磁気圏サブストームなどプラズマ中の爆発現象を取り扱うことができる流体粒子連結モデルの研究開発。

■ 固体・材料

- 固体破壊など連続体力学と原子レベルのダイナミクスが相互作用する現象を取り扱うことができるアルゴリズムの研究開発。

テーマ1: 雲微物理と大気モデルの連結

- 信頼性の高い雲モデル

- 放射過程の精密な評価
- 正確な降雨予測

- 雲微物理モデル

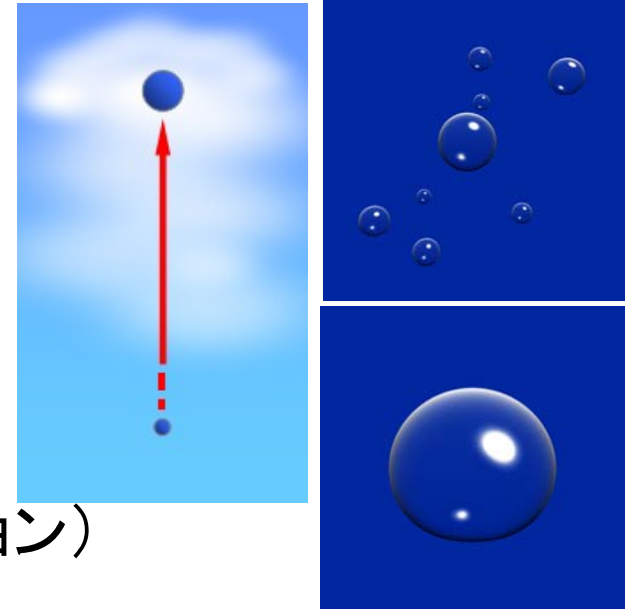
- バルク法 (雲水量パラメタリゼーション)
- ビン法 (雲粒径ビン毎の確率衝突方程式)

- 超水滴粒子法 **新モデル**



連結 (運動量、熱量、水量)

- 非静力大気モデル

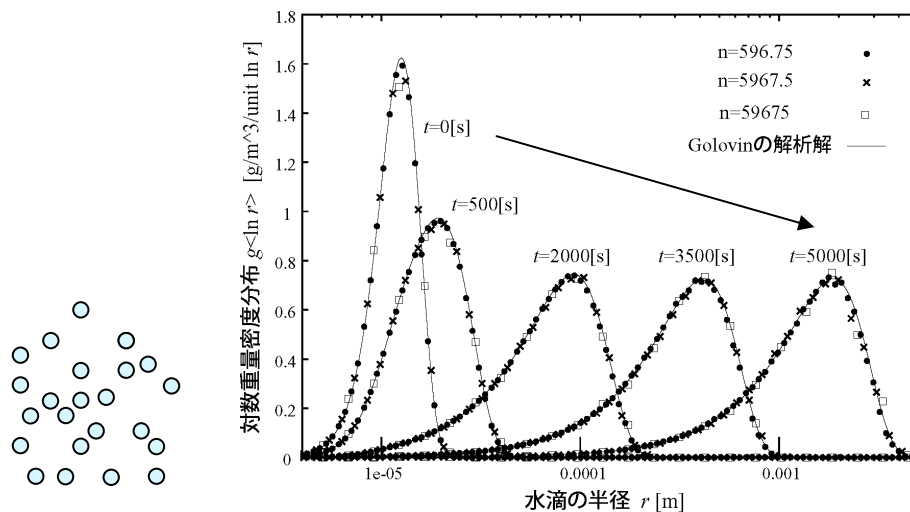


新しい雲微物理モデルの開発と雲形成の連結階層シミュレーションに成功

超水滴粒子法の⁽¹⁾精度評価

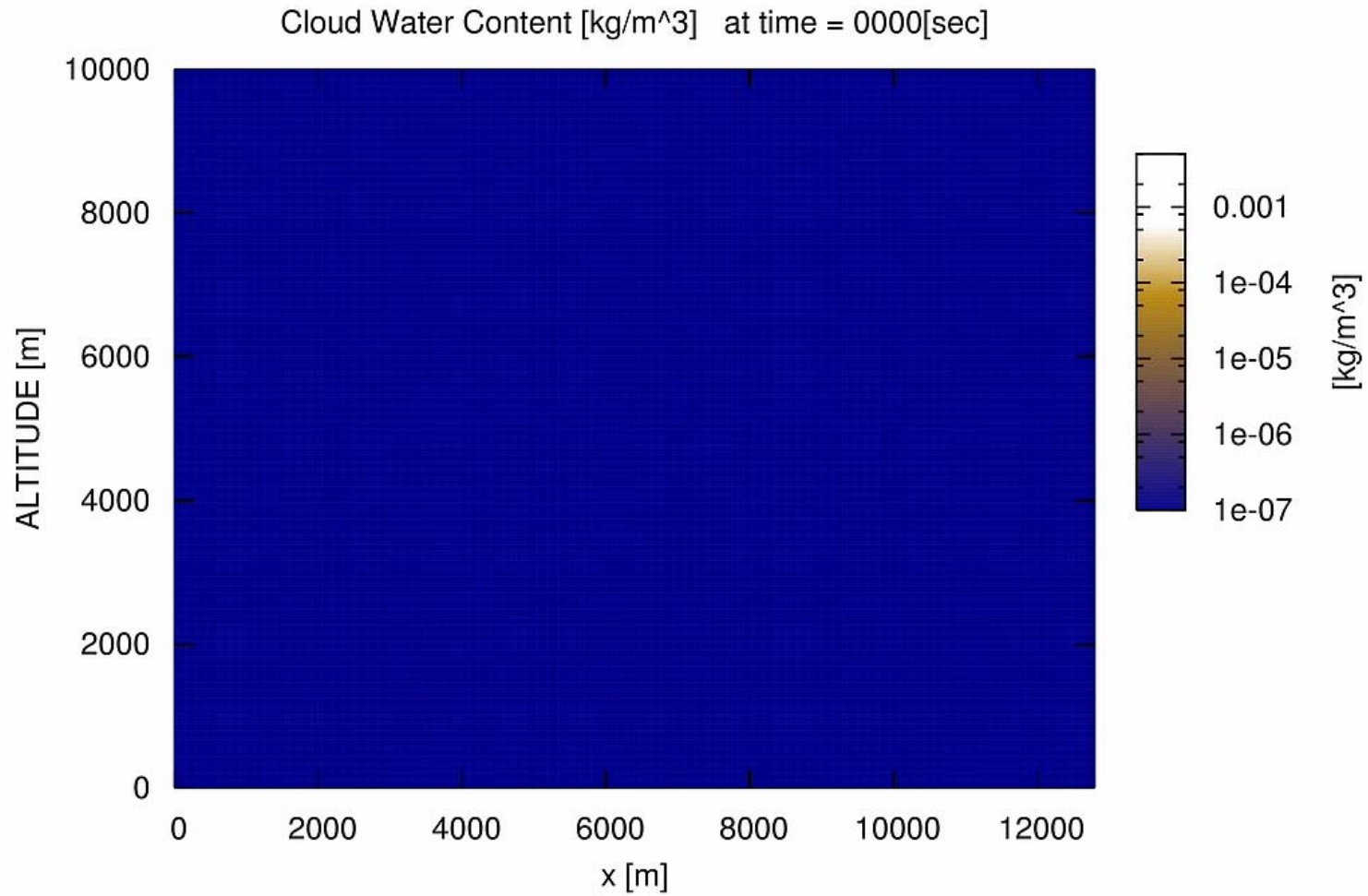
- 超水滴粒子法: 雲粒子毎の凝結成長、衝突融合、運動、降雨を粒子として統一的に計算
 - 凝縮成長: Köhler理論
 - 衝突融合: Monte-Carlo 法
- Stochastic Collection eq.の厳密界との比較

$$\frac{df(x,t)}{dt} = \int_0^{x/2} f(x-x',t)K(x-x',x')f(x',t)dx' - f(x,t) \int_0^\infty K(x,x')f(x',t)dx'$$



雲粒子粒径分布の時間変化

雲成長過程の連結シミュレーション



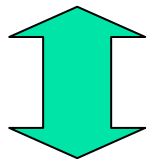
テーマ2: 燃焼流体

■ 燃焼流体シミュレーション

- 従来のモデル: アレニウス式による反応速度定数の評価 ← 熱平衡過程を仮定

デトネーション(爆轟)、高速反応、希薄流体では破綻

- 粒子モデル(DSMC:モンテカルロ直接シミュレーション)による反応の正確なシミュレーション

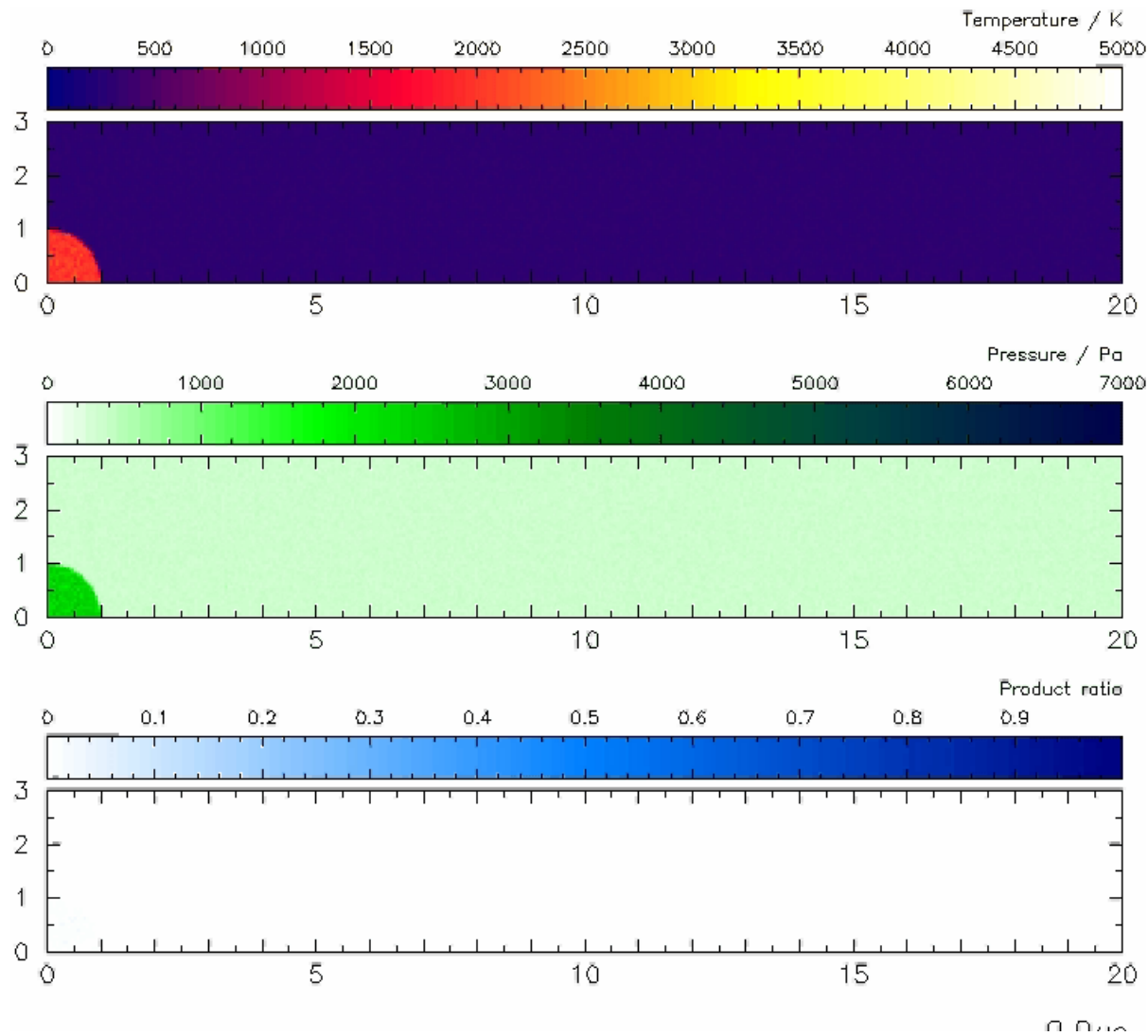


連結(流体密度、運動量、温度)

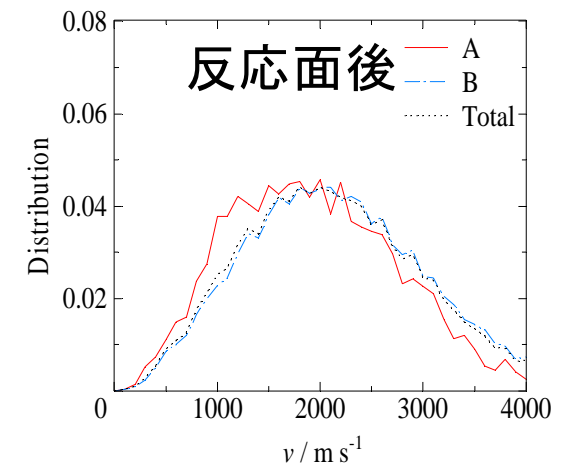
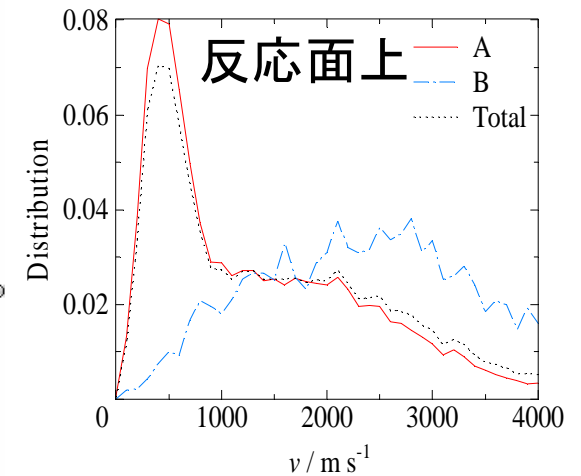
各階層モデル開発
連結手法の研究

- 流体モデル(有限体積HLLC法)

デトネーション(爆轟)形成シミュレーション



速度分布関数

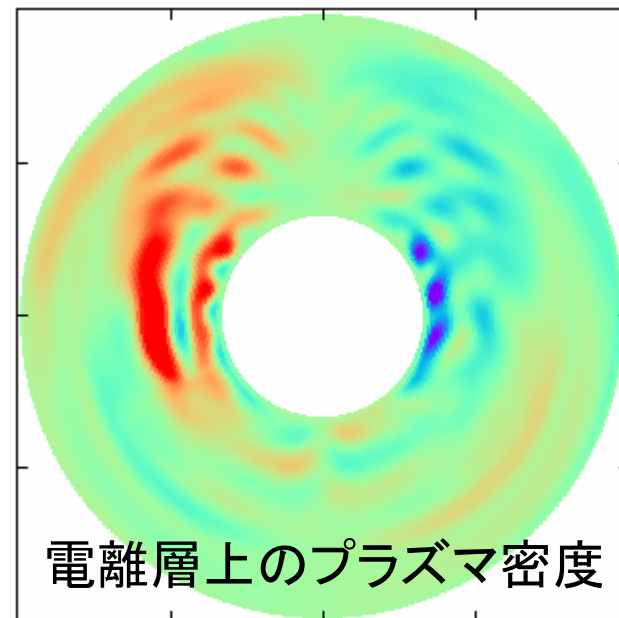
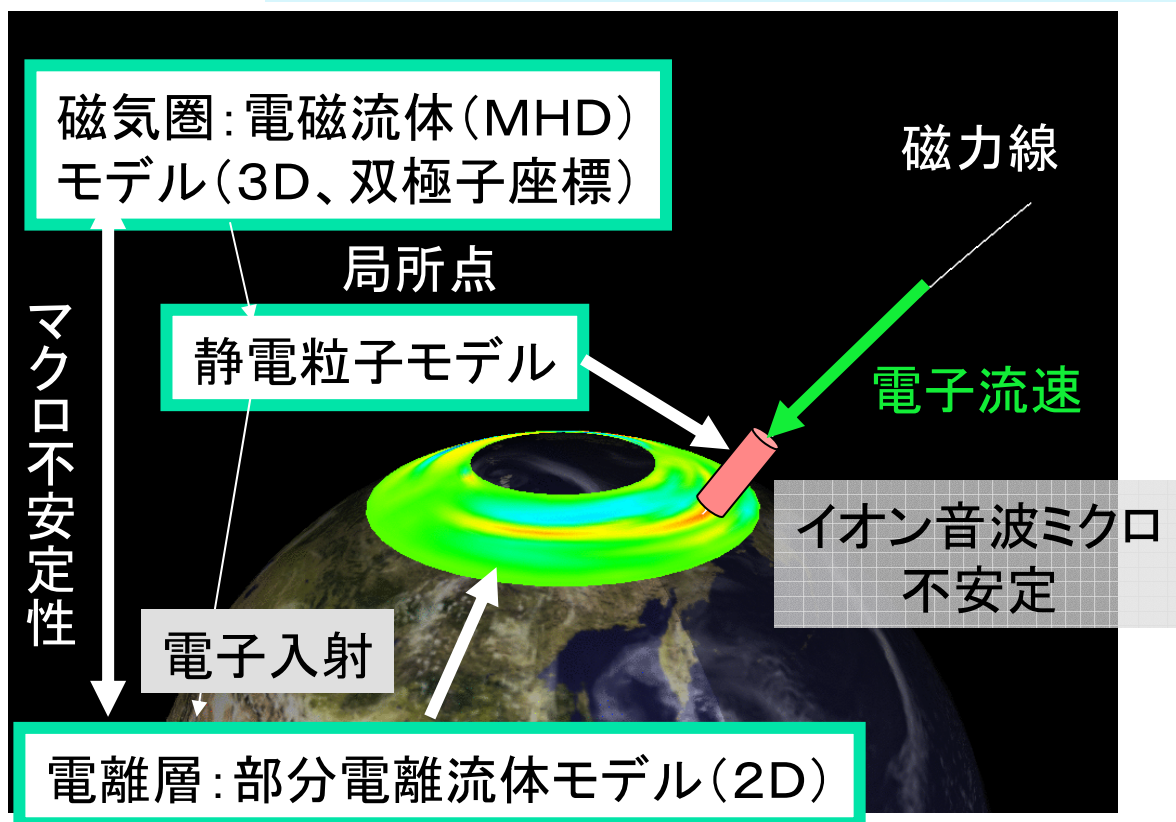


テーマ3: 宇宙プラズマ

■ 磁気圏電離層結合モデル

■ 第1年次の発展 (ESでの並列化)

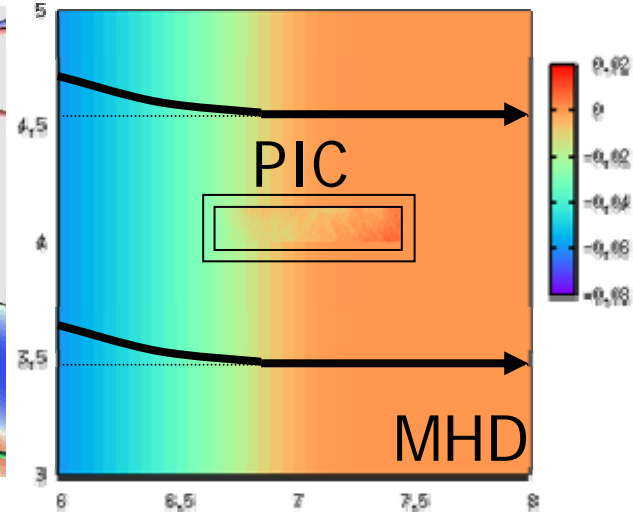
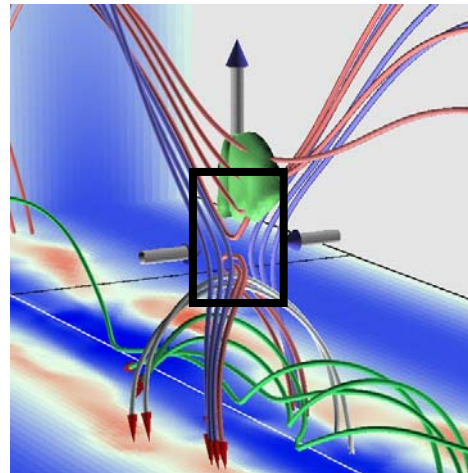
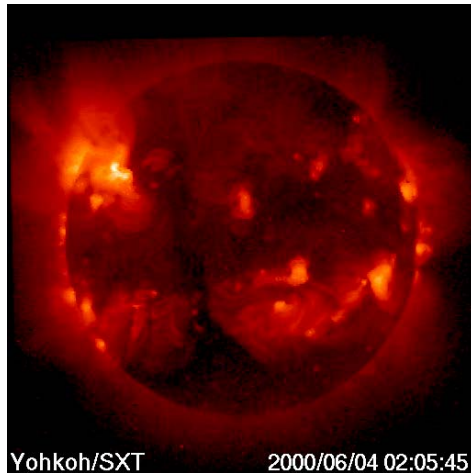
オーロラの微細構造の再現に成功



プラズマ流体 & 粒子連結シミュレーション

■ 太陽フレア・磁気圏サブストームの発生

磁気リコネクションによる突発的エネルギー解放



■ 電磁流体力学 (MHD) シミュレーション



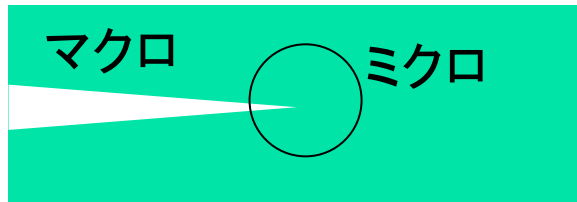
連結 (電磁場、プラズマ流速、密度)

■ 電磁粒子 (PIC) シミュレーション

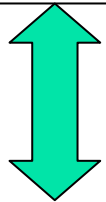
2次元連結
モデルの開発

テーマ4: 固体破壊

- 固体破壊問題:
 - 地震発生メカニズム解明
 - 材料の強度評価と設計

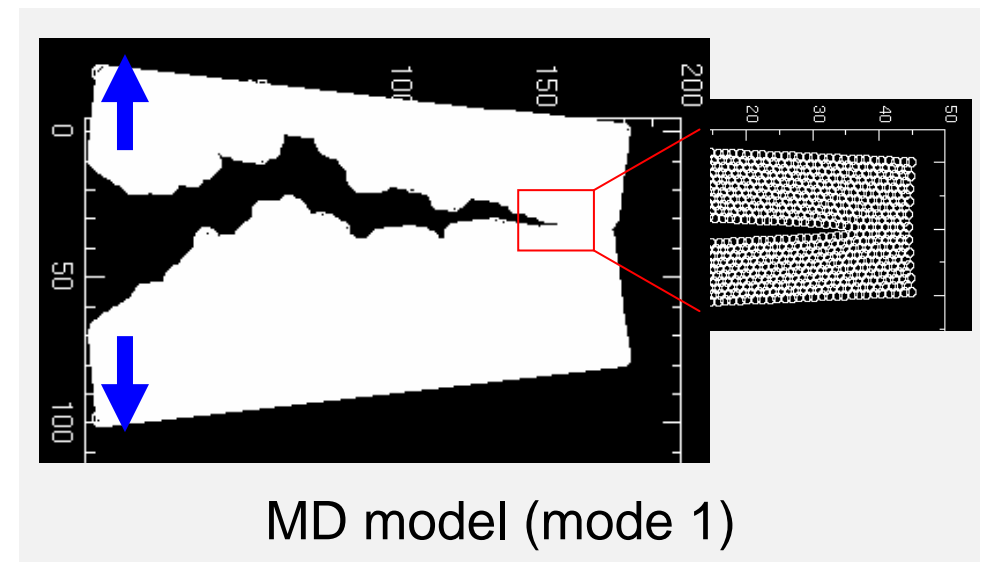
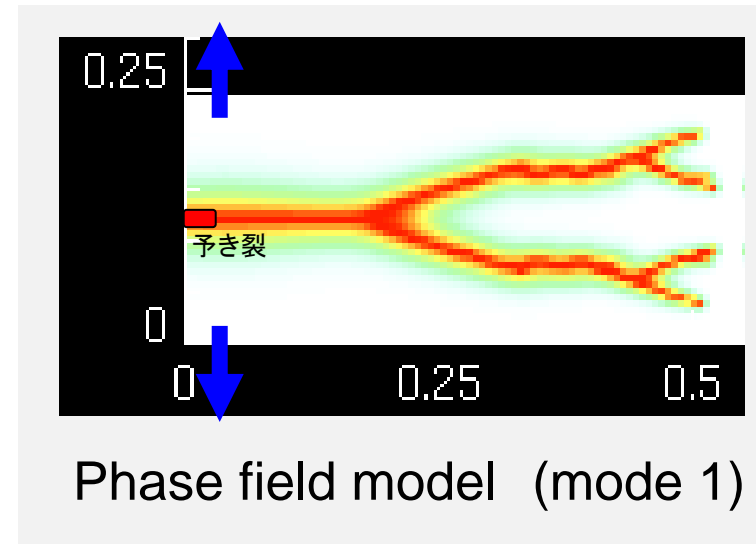


- マクロモデル(連続体)
 - Phase Field モデル



各階層モデルの
開発を実施

- ミクロモデル(原子)
 - 分子動力学(MD)モデル



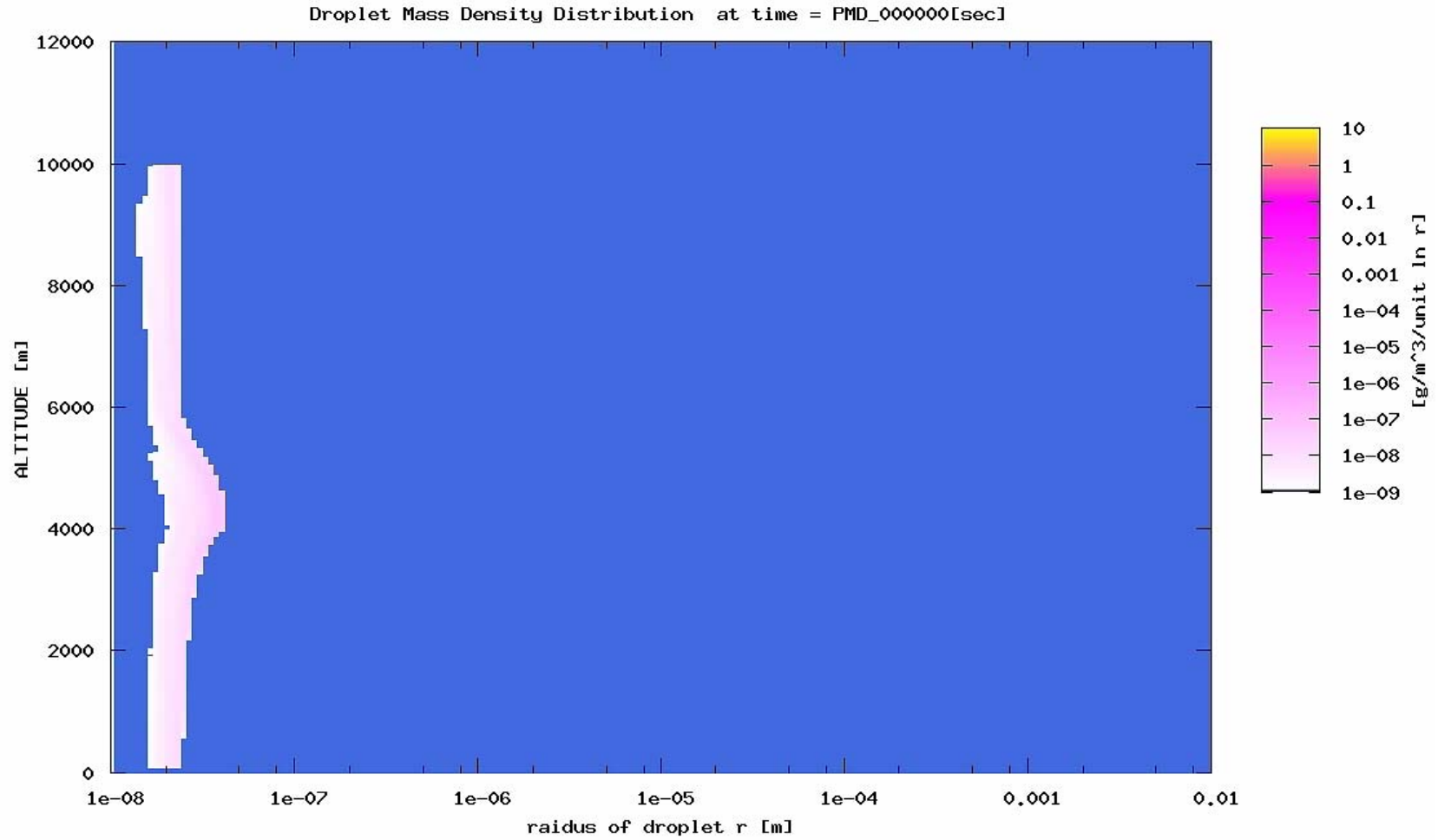
「まとめ」と「今後の計画」

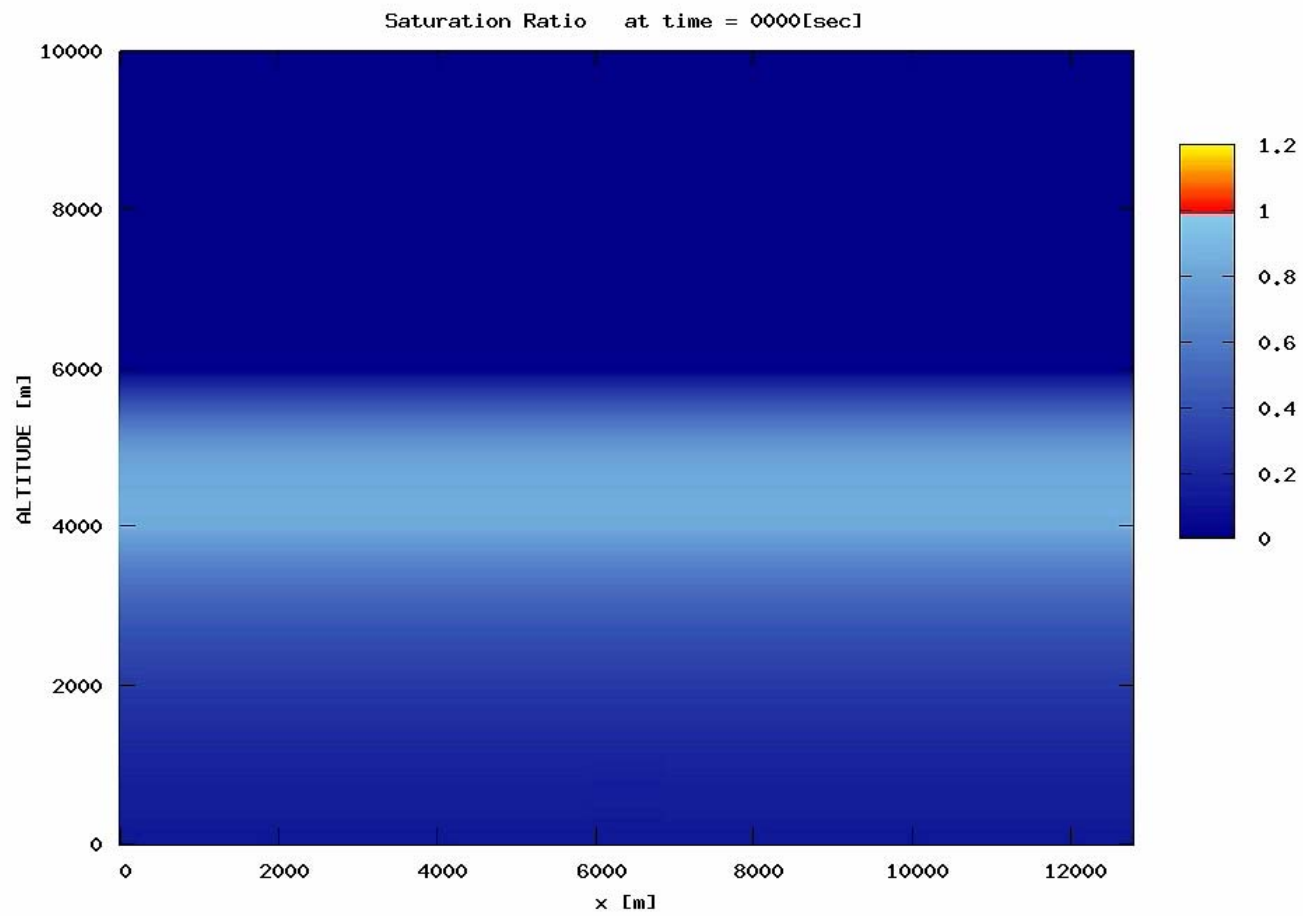
- 4つのサブテーマに関してそれぞれ各階層モデルの開発と連結手法の研究を進め、計画通りの成果を得た。
 - **大気**: 超水滴モデルによる雲形成シミュレーションに成功
 - 領域大気モデルへの拡張
 - **燃焼流体**: ミクロ及びマクロ層のモデル開発
デトネーションのシミュレーションに成功
 - パルスデトネーションエンジンなど産業への応用
 - **プラズマ**: オーロラ微細構造の再現
MHD-PIC結合モデルの基礎開発
 - 磁気リコネクションへの応用
 - **固体破壊問題**: ミクロ及びマクロ層のモデル開発
 - 連結手法の研究開発
- ケーススタディを深化させ、応用性の実証を目指す。
- 各専門分野における共同研究の拡大。

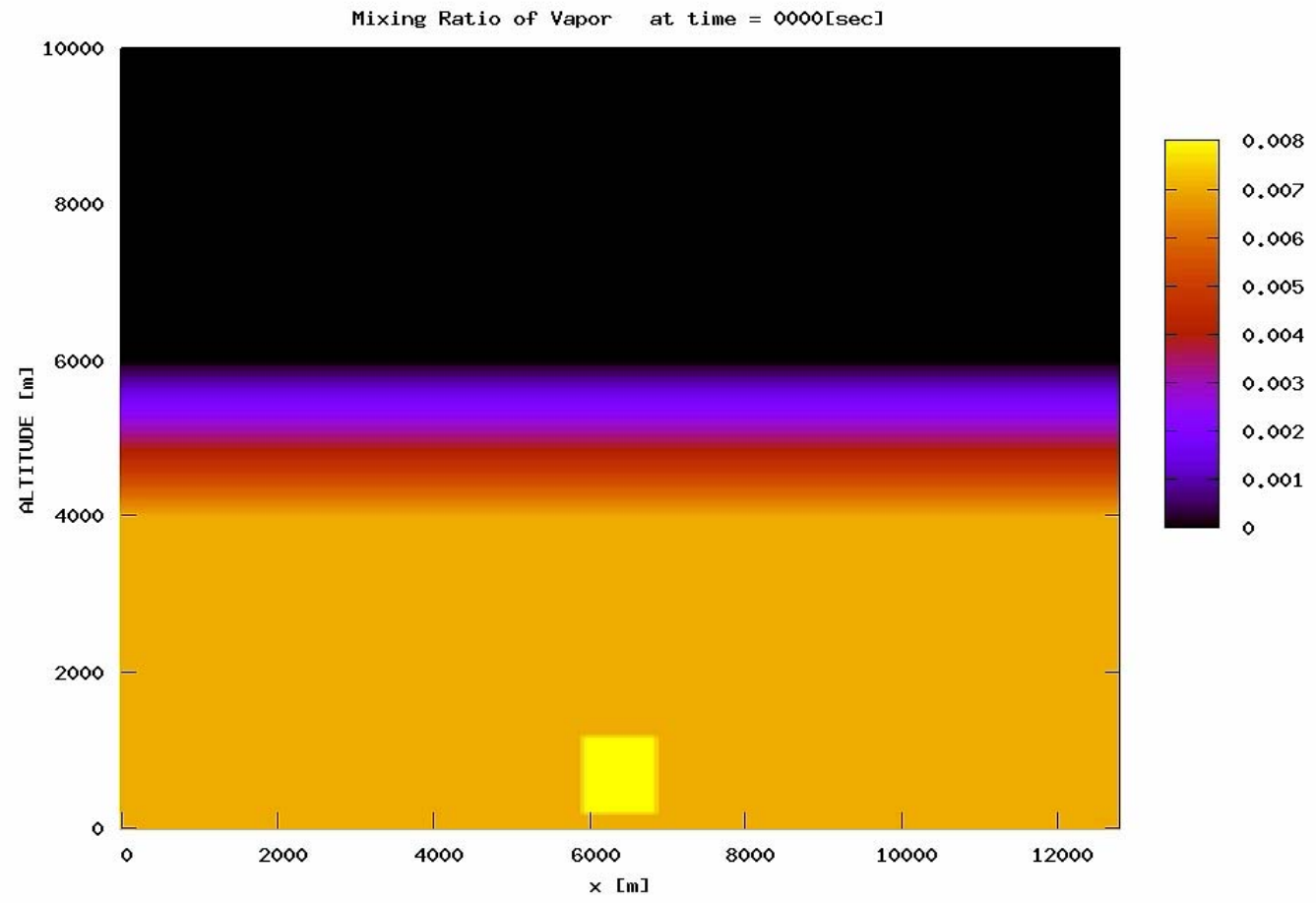
-
- 連結階層シミュレーション
アルゴリズムの開発



雲粒径の高度分布







大気モデルと超水滴モデルとの連結

$$\rho \frac{D\mathbf{v}^{\overline{\omega}}}{Dt} = -\nabla P - (\rho + \rho_w) \mathbf{g}^{\overline{\omega}} + \lambda \rho \nabla^2 \mathbf{v}^{\overline{\omega}},$$

$$P = \rho R_d T,$$

$$\frac{D\theta}{Dt} = -\frac{L}{c_p \Pi} S_v + \kappa \nabla^2 \theta,$$

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v}^{\overline{\omega}},$$

$$\frac{Dq_v}{Dt} = \underline{S_v}.$$

超水滴微物理モデル

$\rho = \rho_d + \rho_v$: 湿潤大気密度

$q_v = \rho_v / \rho$: 水蒸気の混合比

$\mathbf{v}^{\overline{\omega}}$: 風速

T : 温度

θ : 温位

$\Pi = (p / p_0)^{R_d / c_p}$

ρ_w : 水滴の密度

S_v : 水蒸気と水の相変化はるソース項

$\mathbf{g}^{\overline{\omega}}$: 重力定数

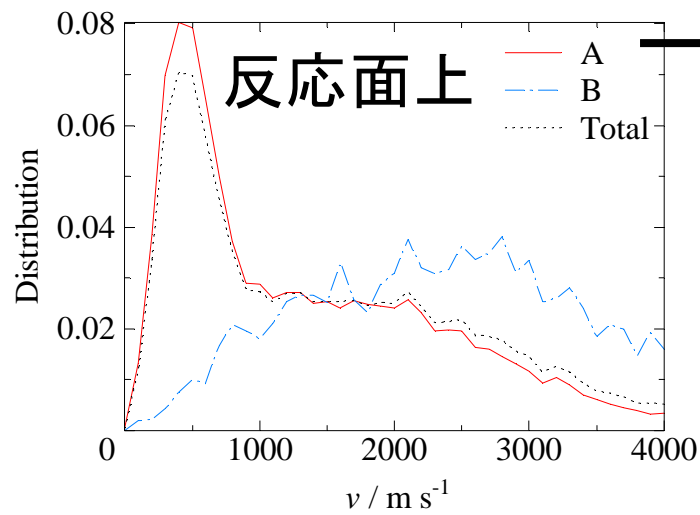
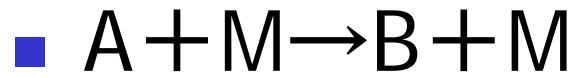
λ, κ : 乱流拡散係数

R_d : 乾燥空気の気体定数

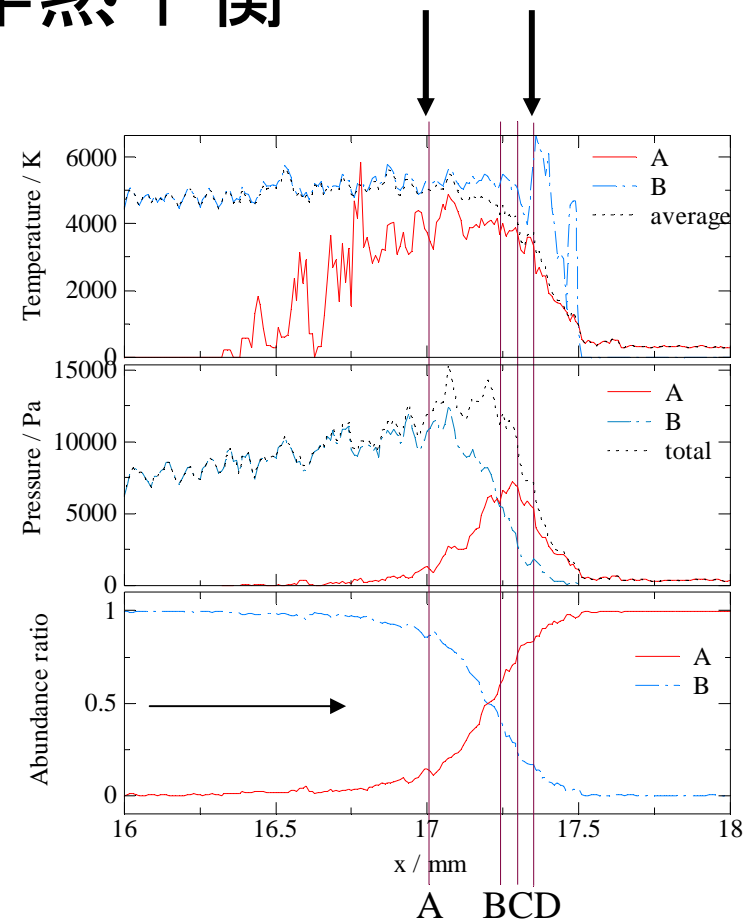
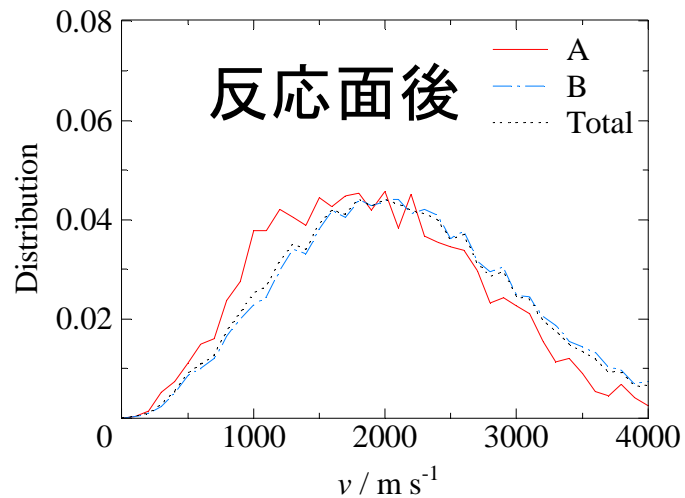
c_p : 定圧比熱

L : 水蒸気の潜熱

速度分布関数

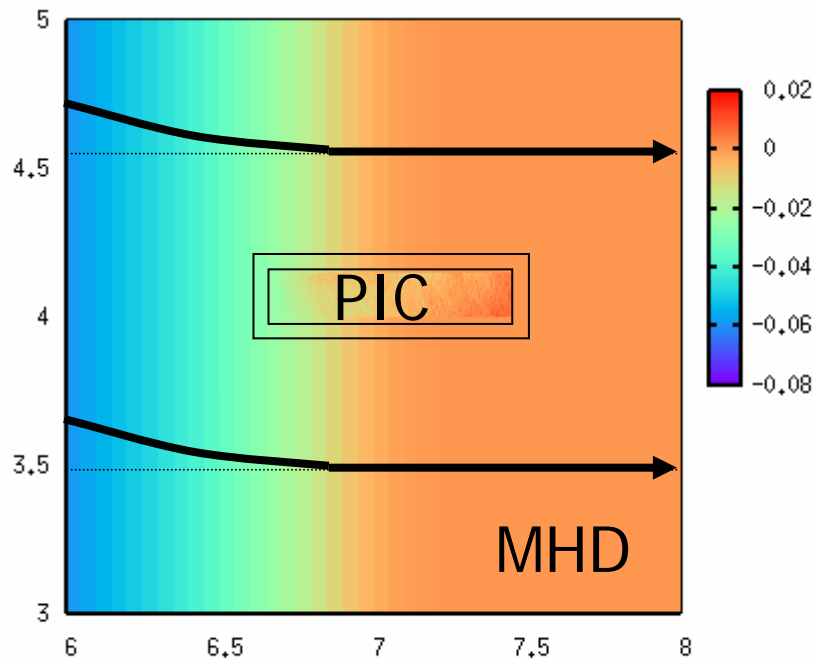


→ 非熱平衡



MHD-PIC連結モデルのテスト

■ アルフベン波の伝播



電磁流体モデル

一般化されたオームの法則

$$\mathbf{E} + \mathbf{U} \times \mathbf{B} = 0$$

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \nabla \times \mathbf{B} - \mu_0 \mathbf{J}$$

マックスウェル方程式

電磁粒子モデル

固体破壊の階層モデル

マクロモデル

・弾性体力学

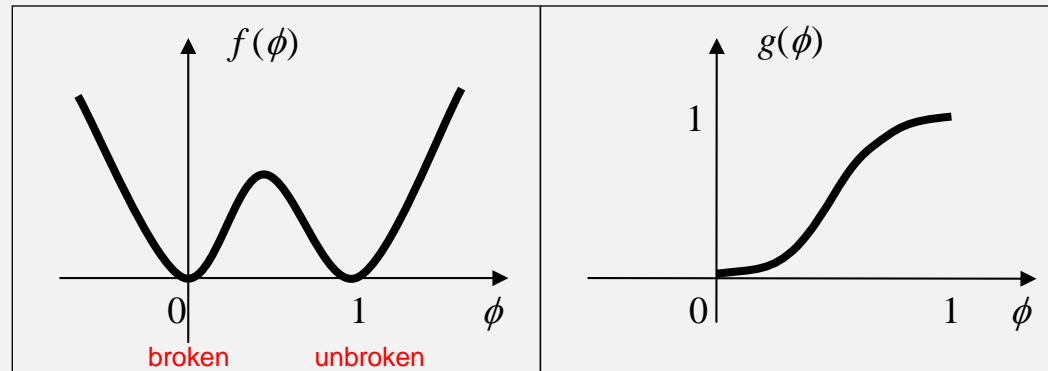
$$\frac{\partial v_i}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \frac{\delta F}{\delta u_i}$$

(連続体)破壊モデル

・Phase fieldモデル

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \phi}$$

$$F = \frac{w^2}{2} |\nabla \phi|^2 + f(\phi) + g(\phi) \left(\frac{\lambda}{2} (\epsilon_{ii})^2 + \mu \epsilon_{ij}^2 \right)$$



ミクロモデル

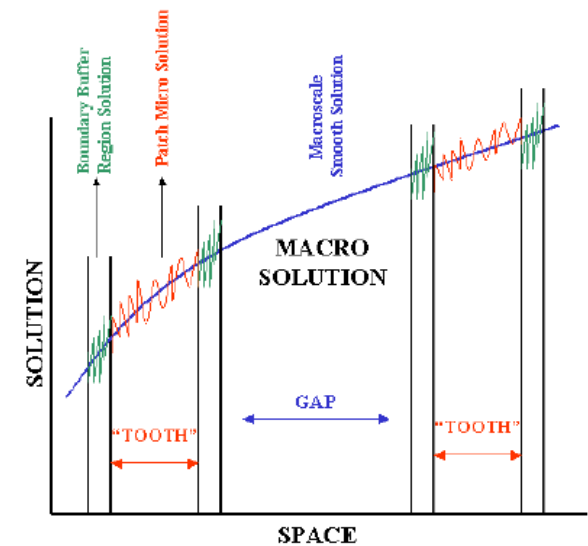
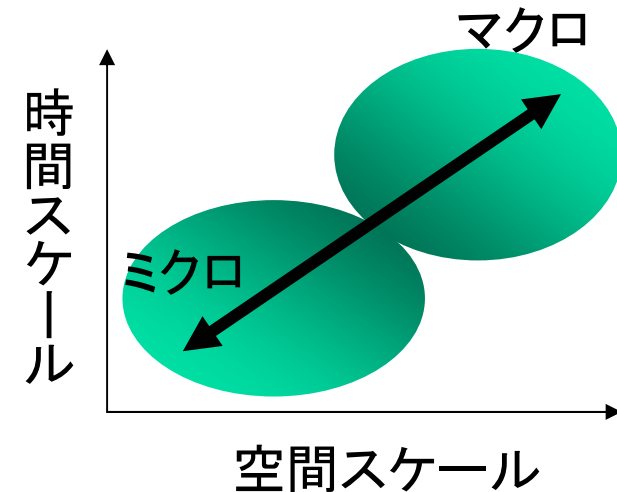
・分子動力学

$$m_a \frac{d^2 \mathbf{r}_a}{dt^2} = \sum_{b(\neq a)} (-\nabla U_{ab})$$

$$U_{ab}^{L-J} = 4 \left\{ \left(\frac{1}{r_{ab}} \right)^{12} - \left(\frac{1}{r_{ab}} \right)^6 \right\}$$

連結階層シミュレーションの課題

- 空間ギャップの克服
 - 連結手法の開発
 - handshaking algorithm
 - overlapping algorithm
 - 適合格子、非構造格子の応用
- 時間ギャップの克服
 - equation free method
 - data-driven method
- 連結手法の開発
 - “coupling channel” の選定



Kevrekidis, et al. 2003