

小特集 長距離相関による自己組織化

6. 2次元点渦系での自己組織化

八柳 祐一

静岡大学教育学部

(原稿受付日: 2011年3月2日)

2次元点渦系では、Onsager が指摘したように負温度状態が現れる。一方、2次元乱流ではインバースカスケードをキーワードとする自己組織化現象が長年の話題となってきた。本章では、2次元点渦系で見られる自己組織化現象やインバースカスケードと負温度性の関係を明らかにすることを目標とした我々の研究成果について、報告を行う。

Keywords:

point-vortex system, negative absolute temperature, self-organization, GPU, MDGRAPE-3

6.1 はじめに

我々の研究の最終目標は、2次元点渦系で見られる自己組織化現象と負温度性の関係を明らかにすることである。

本研究の出発点は、京都大学際本研究室で行われていた非中性純電子プラズマを用いた渦実験である。円筒容器内に強磁場により閉じ込められた電子系の、磁場に垂直な断面内での2次元運動を記述する方程式は、非粘性非圧縮オイラー方程式に一致することが知られている[1]。すなわち、磁場と電場により流体内部の流れまで制御された渦実験が、非中性プラズマで可能である。図1に、当実験で発見された自己組織化現象の一つ、渦結晶を掲載する[2, 3]。

渦結晶は準安定な分布であり、時々刻々、定常分布である一山分布へと遷移し続ける。本来、反発しあはずの電子同士がなぜ塊を形成するのか、なぜ結晶配位が準安定的に存在できるのか、など疑問は尽きないが、これらの疑問に対する解答は、いまだ確立されていない。

一方、2次元渦に関連したキーワードとして、「インバースカスケード」という現象がある。インバースカスケードは短波長側から長波長側へエネルギーが輸送されることにより、大規模な構造が形成される現象を指す。例えば自然界では、鳴門のうず潮や木星の大赤斑、台風などが

該当するだろう。その解として Onsager は「負温度」という概念を導入し、有限領域に閉じ込められた点渦系に負温度状態が現れうることを初めて指摘した[4, 5]。ここでの負温度とは、統計力学的に定義される絶対温度が負となる状態であり、(熱)力学的に定義される絶対温度が負になるわけではない。

上記に述べた非中性プラズマを用いた渦実験、そして Onsager の予想が端緒となり、我々の点渦系シミュレーション研究が始まった。これまでの主立った研究結果については、web 上から入手しやすい文献[6]に記載があるので、本章では過去の文献を引用しながら、比較的新しい話題を提供したい。

6.2 点渦系のシミュレーション

対象とする系は、正の循環を持つ $N/2$ 個の点渦と、負の循環を持つ $N/2$ 個の点渦が、半径 R の円形境界内に閉じ込められている2次元系である。 i 番目の点渦 ($i = 1, 2, \dots, N$) の位置ベクトルを $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$ 、循環を Ω_i ($= \Omega_0, -\Omega_0$; Ω_0 は正定数) で表す。渦度は Dirac のデルタ関数の和で表現される。

$$\omega_z(\mathbf{r}, t) = \sum_i^N \Omega_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \quad (1)$$

各点渦の運動方程式は、保存量の一つである系のエネルギー

$$\begin{aligned} H = & -\frac{1}{4\pi} \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \Omega_i \Omega_j \ln |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \\ & + \frac{1}{4\pi} \sum_i^N \sum_j^N \Omega_i \Omega_j \ln |\mathbf{r}_i - \bar{\mathbf{r}}_j| \\ & - \frac{1}{4\pi} \sum_i^N \sum_j^N \Omega_i \Omega_j \ln \frac{R}{|\mathbf{r}_j|}, \end{aligned} \quad (2)$$

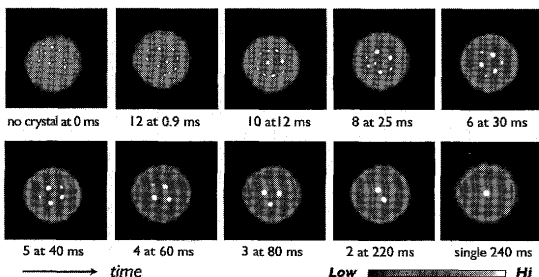


図1 渦結晶の様子。濃淡が電子分布に対応し、白色に近い方が電子濃度が高いことを表す。際本泰士氏の御厚意による。

6. Self-Organization in Two-Dimensional Point-Vortex System

YATSUYANAGI Yuichi

author's e-mail: eyyatsu@ipc.shizuoka.ac.jp

を用いて、正準方程式風に

$$\Omega_i \frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial y_i}, \quad (3)$$

$$\Omega_i \frac{dy_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} \quad (4)$$

または、上式を具体的に書き下したビオ・サヴァール積分を用いて

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = -\frac{1}{2\pi} \sum_{j \neq i}^N \Omega_j \frac{(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \times \hat{\mathbf{z}}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2} + \frac{1}{2\pi} \sum_j^N \Omega_j \frac{(\mathbf{r}_i - \bar{\mathbf{r}}_j) \times \hat{\mathbf{z}}}{|\mathbf{r}_i - \bar{\mathbf{r}}_j|^2} \quad (5)$$

と表される。半径 R の円筒境界の効果は、

$$\bar{\mathbf{r}}_j = \frac{R^2}{|\mathbf{r}_j|^2} \mathbf{r}_j \quad (6)$$

に置かれた鏡像渦で表現している。点渦計算は、系の点渦数 N の 2 乗に計算時間が比例する、いわゆる重たい計算である。そこで、なんらかの高速な計算機を使う必要が出てくる。著者は、この加速目的で分子動力学専用計算機 MDGRAPE-3 を使ってきたが、昨年、入手不可能になったので、新しい計算プラットフォームとして GPU (Graphics Processing Unit) がどの程度使えるのか検討した結果を、読者への情報提供の目的で掲載する。

GPU で計算を行うためには、例えば NVIDIA 社の GPU であれば CUDA C と呼ばれるプログラム言語でプログラミングを行う必要があるが、まだ発展途上であり仕様が頻繁に変更されるため、常に最新の API (Application Programming Interface) を追い続けるのは大変である。そこで、今回は、株式会社 K&F Computing から提供されている "Goose" とよばれるコンパイラを使用した [7]。Goose は、C 言語で書かれたソースプログラムのうち、2 重ループなど GPU で計算すると高速化が期待できる部分に指示子 (#pragma) を記述しておく、その部分を CUDA C に変換し、残りの部分は CPU で処理するようなバイナリを生成する。すなわち、既存のソースプログラムへの変更は最小限にとどめられるのが特徴である。このような製品は一般的に速度が出ないことも多いので、実際にどの程度高速化されるのか、点渦系シミュレーションで用いるビオ・サヴァール積分を用いて比較した。結果を図 2 に示す。約 6×10^4 粒子の場合の計算時間を MDGRAPE-3 を 1 とした比で表すと、表 1 のとおりとなる。ほぼ完全に専用設計されている MDGRAPE-3 がまだ強いが、Goose を使い指示子を書き加えただけのシミュレーションでも、ますますの計算速度が実現できつつあることが確認できた。

次に代表的なシミュレーション結果について、温度をパラメタにした 2 次元点渦系の平衡分布を、時間漸近的に求めた。結果そのものについては文献 [6, 8, 9] を見ていただくことにして、ここでは、エネルギーとともに平衡分布が

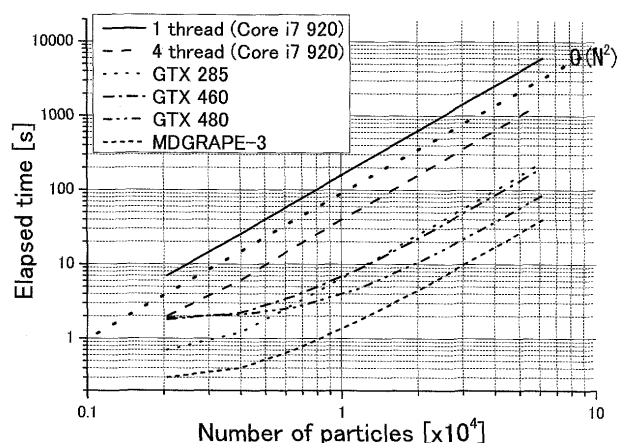


図 2 CPU, GPU, MDGRAPE-3 のベンチマーク結果。横軸は粒子数、縦軸はループ 1 回あたりの計算時間 (秒) である。なお、GPU での計算は、すべて倍精度で行った。

表 1 MDGRAPE-3 の計算時間を 1 とした場合の計算時間の比率。

環境	比率
CPU 1 コア 1 スレッド	151
CPU 4 コア 4 スレッド	38
GTX285	5.9
GTX460	5.0
GTX480	2.2
MDGRAPE-3	1.0

どのように変化するのか、模式図を用いて説明をする。直接のシミュレーション結果ではなく模式図を用いる理由は、正温度側での二つの平衡分布が区別しやすいからである。

図 3 に、保存量の一つである慣性モーメント $I = \sum_i^N \Omega_i |\mathbf{r}_i|^2$ がゼロの場合の各温度ごとの代表的分布を示す。

エネルギーが低い状態は、正と負の点渦が凝集した「凍結状態」(a) を形成する。エネルギーが上昇すると温度も上がり、正と負で凝集していた点渦は最終的に「完全分離状態」(b) となる。ここで、正と負の点渦同士はほぼ等しい間隔で境界内に散らばり、一様分布を形成する。さらにエネルギーが上がり $E > E_0$ となると、温度は負となり、(c) に示すように先ほどまで一様だった分布の中に、同符号同士の点渦で小さく凝集した領域ができ始める。そして、最終的には (d) に示すように、正は正、負は負の点渦のみから構成された渦塊ができあがる。さらにエネルギーを上げると渦塊の凝集度合いは高まり、その大きさは小さくなっていく。これが $I = 0$ の場合の正負点渦系の「相図」である。

6.3 粒子性に由来する粘性

6.3.1 背景

従来、点渦系のシミュレーションでは、Leonard が点渦系のシミュレーションに関する review において指摘した通り²、粒子数を上げると結果が思わしくなくなることが経験的に知られていた [10]。

1 ここでの GPU はすべての計算を倍精度で行っているのに対して、MDGRAPE-3 は乗算、除算 (粒子間の距離計算) をほぼ単精度、加算、減算 (粒子間相互作用の重ね合わせ) を倍精度で行っているため、MDGRAPE-3 にそもそも有利である。MDGRAPE-3 と同様の計算精度で計測を行うと、さらに GPU は善戦する可能性が高い。

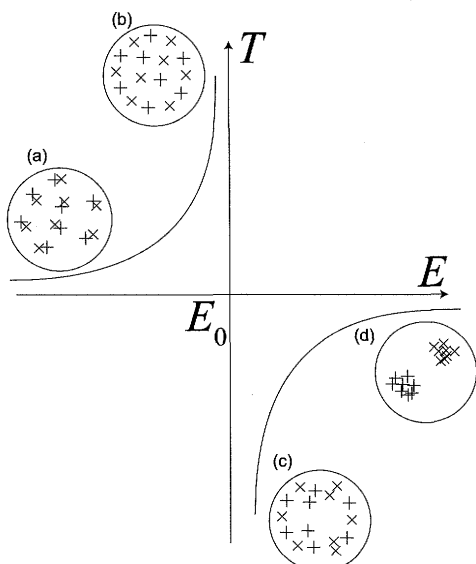


図3 エネルギー（温度）をパラメータとした平衡分布の相図。+は循環が負の点渦，×は正の点渦を表す。

一方，Matthaeusらは，減衰性2次元ナビエ・ストークス系の平衡解と2次元点渦系の平衡解が類似していることを指摘している[11]．彼らは，ランダムな渦度分布から減衰性2次元ナビエ・ストークス方程式の時間発展を追跡すると，正の渦と負の渦が1個ずつできあがる様子を示した．この2極構造の分布は，負温度点渦系の平衡解を与えるsinh-Poisson方程式[12]によりうまく表現できることが報告された．

以上，Leonardの指摘とMatthaeusらの報告から，我々は，点渦系というのは非粘性2次元オイラー方程式の解になっているが，実はこの「点」渦という粒子性に起因する拡散項が点渦系には実質的に導入されているのではないか，という予想を行った．この予想に基づく解析を行った結果を次に示す．

6.3.2 ミクロ系とマクロ系

2次元オイラー方程式

$$\frac{\partial \omega_z(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \omega_z(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (7)$$

は，点渦解(1)を持つ．これを，「ミクロな粒子解」と呼ぶことにする．我々は，点渦解をみたすオイラー方程式は，実はミクロな粒子方程式であり，それがたまたまマクロな流体方程式と同じ形をしているだけなのではないかと考えた．この点渦解を有するミクロな粒子方程式に対し，何らかの平均操作を施すことにより得られるマクロな流体方程式には，実は，点渦というミクロな粒子同士の衝突に類する効果に由来する粘性が現れるだろうと予想した．

$$\frac{\partial \langle \omega_z \rangle}{\partial t} + \langle \mathbf{u} \cdot \nabla \omega_z \rangle = \langle \text{viscous term} \rangle \quad (8)$$

ここで， $\langle \cdot \rangle$ は平均操作を表す演算子である．

これ以後，ミクロな物理量とマクロな物理量を区別するため，ミクロな物理量には $\hat{\cdot}$ を付す．すなわち，ミクロな渦度は $\hat{\omega}_z(\mathbf{r}, t)$ と表される．マクロな渦度は，ミクロな渦度の平均

$$\omega_z(\mathbf{r}, t) \equiv \langle \hat{\omega}_z(\mathbf{r}, t) \rangle_{SE} \quad (9)$$

と定義される．ここで，平均操作を表す演算子の添字S, Eは，それぞれ空間平均，アンサンブル平均を表し，空間平均は，微小面積要素 Λ に対して，

$$\langle \hat{\omega}_z(\mathbf{r}, t) \rangle_S = \frac{1}{|\Lambda|} \int_{\Lambda(\mathbf{r})} d\mathbf{r}' \hat{\omega}_z(\mathbf{r}', t) \quad (10)$$

と定義される．一方，ミクロな渦度は，マクロな渦度+揺らぎ

$$\begin{aligned} \hat{\omega}_z(\mathbf{r}, t) &= \sum_i \Omega_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \\ &= \omega_z(\mathbf{r}, t) + \delta \omega_z(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (11)$$

と定義される．ミクロな渦度に併せて，ミクロな流れ関数，速度場も次のように表され，それぞれ，マクロな平均部分と揺らぎから成る．

$$\hat{\phi}(\mathbf{r}, t) = \sum_i \Omega_i G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \quad (12)$$

$$\hat{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t) = -\hat{\mathbf{z}} \times \nabla \hat{\phi}(\mathbf{r}, t) \quad (13)$$

6.3.3 拡散係数の導出

出発点は，点渦解を厳密解として持つミクロな渦度方程式である．

$$\frac{\partial \hat{\omega}_z}{\partial t} + \hat{\mathbf{u}} \cdot \nabla \hat{\omega}_z = 0 \quad (14)$$

この式に，(11)式で定義される揺らぎを含んだミクロな渦度を代入し，平均操作を行う．すると，

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \omega_z(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot [\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \omega_z(\mathbf{r}, t)] = \\ - \nabla \cdot \langle \delta \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \delta \omega_z(\mathbf{r}, t) \rangle_{SE} \end{aligned} \quad (15)$$

を得る．左辺はすべてマクロな量である．一方，右辺には揺らぎの積の平均が残る．この項が，粒子性(ミクロ性)に由来する拡散項である．

$\delta \omega_z(\mathbf{r}, t)$ の具体的表式を得るため，(14)式に(11)式で定義される揺らぎを含んだミクロな渦度を代入し，揺らぎに関して1次の項を集めた線形化方程式を導入する．

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta \omega_z(\mathbf{r}, t) + \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla \delta \omega_z(\mathbf{r}, t) = \\ - \delta \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla \omega_z(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (16)$$

この式の左辺第2項に現れる $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ ，および右辺に現れる $\omega_z(\mathbf{r}, t)$ は，マクロな量であることに注意する．マクロな

2 Leonardの指摘は以下のとおり：“It now appears that using an increased number of point vortices of decreased strength will not yield a converged solution. ... Ironically, best results with the point vortex method often are achieved by using only a few vortices with a diffusive time integration scheme.”

量は、マイクロなスケールでは変化しない定数と見なすことができる考えると、(16)式は積分可能で、

$$\delta\omega_z(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t d\tau \delta\mathbf{u}(\mathbf{r} - (t-\tau)\mathbf{u}, \tau) \cdot \nabla\omega_z(\mathbf{r}, t) \quad (17)$$

を得る。ここで、 $\delta\omega_z(\mathbf{r}, t = -\infty) = 0$ を仮定した。この結果を(15)式右辺に代入すると、

$$-\nabla \cdot \langle \delta\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \delta\omega_z(\mathbf{r}, t) \rangle_{SE} = -\nabla \cdot (\vec{\eta} \cdot \nabla\omega_z)$$

$$\vec{\eta} = \int_{-\infty}^t d\tau \langle \delta\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \delta\mathbf{u}(\mathbf{r} - (t-\tau)\mathbf{u}, \tau) \rangle_{SE} \quad (18)$$

となり、拡散係数に対応するテンソルの具体的表式が得られる。これが粒子性に由来する拡散項の表式である。(18)式に含まれる \mathbf{u} をゼロとすると、Green-久保公式としてよく知られた時間相関の結果が再現する。すなわち、我々の結果は、流れに伴う位置のずれを考慮した相関が含まれている、Green-久保公式の拡張であると考えられる。

6.4 考察&まとめ

2次元点渦系について、温度によってその動力学的特性を特徴付けることを目標とした研究である。この系は、点渦相互の作用がいわゆる長距離相互作用であるため、今回紹介したことの他にも、いろいろ不思議なことが起こる。たとえば、円形境界内の左側半分に正温度の系、右側半分に負温度の系を配置し接触させた状態を考えてみよう。この系では、左側半分の初期エネルギーを H_1 、右側半分の初期エネルギーを H_2 とすると、混合した系のエネルギー H_{mix} は、 $H_1 + H_2$ とはならない。これは、渦同士の相互作用が、本質的に長距離的であることに由来する。数値的に時間発展を追跡してみると、初期の H_1, H_2 の大小に応じて、一様分布になる場合と、クランプが残った負温度的分布になる場合が現れる(図4)。渦結晶などの現象も、おそらくこの長距離相互作用により生み出されていると我々は考えている。

今回紹介した解析的な結果では、粒子性に起因する粘性が表れることをプラズマの世界でよく知られる Klimontovich formula に従い導出している。2次元点渦解

$$\hat{\omega}_z(\mathbf{r}, t) = \sum_i \Omega_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \quad (19)$$

は、マイクロな渦度方程式

$$\frac{\partial \hat{\omega}_z(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \hat{\mathbf{u}} \cdot \nabla \hat{\omega}_z(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (20)$$

の厳密解である。このマイクロな渦度方程式を演算子 $(\cdot)_{SE}$ により粗視化すると、対応するマクロな(流体)渦度方程式が得られるが、この時、系に含まれる点渦数 N の大小により、マクロな渦度方程式の形が変化する。もし、 $N = O(1)$ であれば、マクロな渦度方程式は非粘性の渦度方程式

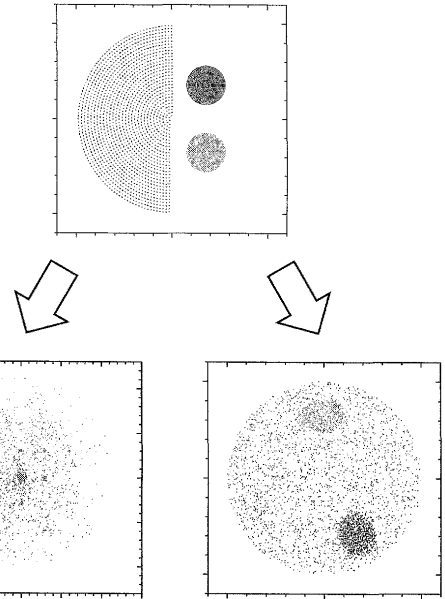


図4 正温度系と負温度系の接触。温度が低い方から高い方へエネルギーが流れる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega_z(\mathbf{r}, t) + \mathbf{u} \cdot \nabla \omega_z(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (21)$$

となる。一方、 $N \gg 1$ の場合には、粒子間の衝突に由来する粘性項が残り、

$$\frac{\partial}{\partial t} \omega_z(\mathbf{r}, t) + \mathbf{u} \cdot \nabla \omega_z(\mathbf{r}, t) = -\nabla \cdot \langle \delta\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \delta\omega_z(\mathbf{r}, t) \rangle_{SE}$$

が得られる。今回の我々の結果は、Leonard が述べた経験則が実は正しく、粒子数に依存した粘性が点渦シミュレーションには実効的に導入されていることを表している。また、連続系を点渦のような離散的モデルで離散化する場合には、注意が必要であるということを示唆しているとも言えるだろう。

なお、粒子性に由来する粘性については、シミュレーションにより数値的に計測することも可能であり、現在、課題として取り組んでいる最中である。

謝辞

本小特集は、「自己組織化」をライフワークとして研究に取り組んで来られた羽鳥尹承先生が神奈川大学を定年退職されるのを記念して企画しました。羽鳥先生には、学部4年の時から約20年間お世話になり、シミュレーション物理の楽しさ、数理物理の難しさを教えていただきました。ありがとうございました。際本泰士氏(京都大学名誉教授)には、実験結果の原図を提供していただきました。今回報告を行った研究成果は、上記の先生方との共同研究の成果を含みます。並列化・最適化について、川井敦氏(株式会社 K & F Computing Research)、堀越将司氏(インテル株式会社)から、貴重な助言をいただきました。みなさまに感謝いたします。なお、本研究は科研費(22740254)の助成を受けて実施されました。

参考文献

- [1] 際本泰士：プラズマ・核融合学会誌 77, 329 (2001).
- [2] K. Kiwamoto, N. Hashizume, Y. Soga, J. Aoki and Y. Kawai, Phys. Rev. Lett. 99, 115002 (2007).
- [3] Y. Kiwamoto, Y. Kawai, Y. Soga and J. Aoki, Plasma Fusion Res. 5, S2002 (2010).
- [4] L. Onsager, Nuovo Cimento Suppl. 6, 279 (1949).
- [5] G.L. Eyink and K.R. Sreenivasan: Rev. Mod. Phys. 78, 87 (2006).
- [6] 八柳祐一：ながれ 27, 23 (2008).
- [7] <http://www.kfcr.jp/>.
- [8] Y. Yatsuyanagi, Y. Kiwamoto, H. Tomita, M.N. Sano, T. Yoshida and T. Ebisuzaki, Phys. Rev. Lett. 94, 054502 (2005).
- [9] 八柳祐一, 佐野光貞, 戎崎俊一：京都大学数理解析研講究録 1608, 67 (2008).
- [10] A. Leonard, J. Comput. Phys. 37, 289 (1980).
- [11] W.H. Matthaeus, W.T. Stribling, D. Martinez, S. Oughton and D. Montgomery, Physica D 51, 531 (1991).
- [12] D. Montgomery and G. Joyce, Phys. Fluids 17, 1139 (1974).