数理解析研究所講究録
第652巻 1988年 150-158

Improved Monte Carlo Approach to Turbulence

岩手大工　細川　巌(Iwao Hosokawa)

1. Monte Carlo Approach の経緯

文献1で、乱流理論に対するモンテカルロ法の効用を解説し、そこで今後の2D，3D 乱流に対する適用の問題点を指摘し、文献2で Navier-Stokes（以下N-S）の力学で使われる Fourier modes を統計的に sampling して困難を回避する思想を述べた。Fourier modes をまびきする思想は、2D 乱流に対して Lorentz[3]も展開している。現在でも、Kraichnan[4]はこれに重大な関心を払い、DIA との関連を議論している。3D 等方性乱流に対して上の思想を適用した結果は、文献5に詳細に説明したので、興味ある人はそれを見てもらいたい。Fourier modes が大量にまびかれている以上、もはや基礎方程式はN-S方程式とはいえず、その「部分力学」又はモデルを体現しているにすぎないが、(この点では、定差方程式アプローチと同じ。)ある種の合理性を持ち合わせているときには、有効な近似として意味を持つことは期待してもよい。われわれの結果は、初期レイノルズ数 R=100～500 に対してエネルギー減衰の巾法則(巾指数:-1.3)や Kolmogorov のスペクトル法則(コルモゴルフ定数:1.4)を含めて、大体納得のできるものであった。

モンテカルロ法という言葉は文献1では Hopf 方程式の汎函数積分の評価に対する技法という意味で使われたが、文献5では、無限個の自由度の sampling をすることまで含めて使われていることに注意してほしい。

2．サンプルされた有限個自由度の力学

N-S方程式を速度場 Fourier modes に対して

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\nu k^2\right)U_\alpha(\mathbf{k},t) = \sum_{\mathbf{j}} M_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{k})U^*_\beta(\mathbf{j},t)U^*_\gamma(-\mathbf{k}-\mathbf{j},t) \tag{1}$$

と書く。t は時間、ν は動粘性係数、$\mathbf{k}$ は波数ベクトル、U_α は速度場の Fourier 成分、U^*_α は共範複素数、Greek suffix は summation convention に従う。$M_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{k})$ は非線形相互作用の結合係数を示す。ここで共範複素数表現を用いた理由は U^*_γ の変数を k-j でなくて -k-j としたいからである。離散モードを使わない時は、Σは積分に変わる。この積分をモンテカルロ法の importance sampling[1)] によって評価すると考えると、方程式は

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\nu k_a^2\right)U_\alpha(\mathbf{k}_a,t) = \frac{1}{M'}\sum_{b}\frac{M_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{k}_a)U^*_\beta(\mathbf{k}_b,t)U^*_\gamma(-\mathbf{k}_a-\mathbf{k}_b,t)}{C(\mathbf{k}_b)} \tag{2}$$

と書くことができる[5)]。ここで、$\mathbf{k}_a,\mathbf{k}_b$ はサンプルされた波数であり、M' は $\mathbf{k}_a,\mathbf{k}_b,-\mathbf{k}_a-\mathbf{k}_b$ が fundamental triad を構成できる場合の数を示す。一般に $\mathbf{k}_b$ は($\mathbf{k}_a$とおなじく)或る確率分布 $C(\mathbf{k}_b)$ でサンプルされるので、右辺の積分(の estimator)はそれで割っておかなければならない。どのようにして、fundamental triads を構成する波数をサンプルするかについては次の節を見られたい。

とにかく(2)はサンプルされた総数M個の波数モードに対して閉じた有限個の自由度の力学を作るのである。

しかし、右辺は、モンテカルロ法による積分の正当な評価になっているにも拘らずN-S方程式の不変性（energyとhelicity の$\nu=0$ における保存）に抵触するのである。$C(\mathbf{k}_b)$ の存在によって $M_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{k})$ のもっている本来の性質が乱されるのである。そこで、文献5では、右辺について若干の modification を行っている。即ち、

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\nu k_a^2\right)u_\alpha(\mathbf{k}_a,t)=\frac{C_0}{M}\sqrt{M}\sum_b M_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{k}_a)u^*_\beta(\mathbf{k}_b,t)u^*_\gamma(-\mathbf{k}_a-\mathbf{k}_b,t) \tag{3}$$

ここで、$u_\alpha(\mathbf{k}_a,t)=U_\alpha(\mathbf{k}_a,t)/[MC(\mathbf{k}_a)]^{1/2}$ を導入した。

C_0 を $[C(-\mathbf{k}_a-\mathbf{k}_b)]^{1/2}/[C(\mathbf{k}_a)C(\mathbf{k}_b)]^{1/2}$ と書いてΣの中にそれを入れると、(3)は(2)と等価である。しかし、C_0 をその何らかの意味での平均量として定数化した時、始めて(3)はN-S方程式と同じ不変性をもつ。それは(3)の形から明らかであろう。文献5では、$C_0=0.3K^{3/2}$（K：truncation wavenumber）とした。この値はエネルギー減衰が R=50 での直接数値シミュレーションのものと合うようにして決まったものである。この値は、一つの統計平均値 $C_S=\int\int[C(-\mathbf{k}_a-\mathbf{k}_a)C(\mathbf{k}_a)C(\mathbf{k}_b)]^{1/2}d\mathbf{k}_a d\mathbf{k}_b$ に近いが、0.3 がどれほどの普遍性をもつかは不明である。明らかに $C(\mathbf{k})$ の形に依存する。そこで、C_0 を導入しないですむような基礎方程式は作れないものかどうか以下で検討したい。

3. Sampled modes の再考察

[0,K]の中で、或る確率密度 $H_1(x_\alpha)(\alpha=1,2,3)$ で x_α を取り出し、２個の x_α の差でもって波数ベクトルの成分 k_α を決める。即ち、

$$U_\alpha(K)=U_\alpha(\mathbf{x}-\mathbf{x}')=U_\alpha^*(\mathbf{x}'-\mathbf{x}) \tag{4}$$

この時、立方体$[0,K]^3$の中にn個の点を作れば、${}_nP_2$個の波数ベクトルが生じ、その１個のベクトルに対し、常にn-2個の Fundamental triads が存在することになる。これが、Sampled modes の基礎的な関係である。　従って、k_α が選ばれる確率密度は、$k_\alpha=x_\alpha-x_\alpha'$, $s_\alpha=x_\alpha+x_\alpha'$ として、

$$C_1(k_\alpha)=\int_{|k_\alpha|}^{2K-|k_\alpha|} H_1\left(\frac{s_\alpha+k_\alpha}{2}\right) H_1\left(\frac{s_\alpha-k_\alpha}{2}\right) ds_\alpha/2 \tag{5}$$

と計算される。これを使って、モンテカルロ法による $\int F(k_\alpha)\,dk_\alpha$ の評価は

$$\int_{-K}^{K} P(k_\alpha)dk_\alpha = \frac{1}{{}_nP_2}\sum_{i=1}^{{}_nP_2} P(K_{\alpha i})/C_1(K_{\alpha i}) \tag{6}$$

と書けるが、$H_1(x_\alpha)$ の役割を強調するために次のような導出も可能であることに注意する。(5)の関係を利用して、

$$\int_{-K}^{K} P(k_\alpha)dk_\alpha = \int_{-K}^{K}\left\{\int_{|K_\alpha|}^{2K-|K_\alpha|} H_1(x_\alpha)H_1(x_\alpha')/[2C_1(k_\alpha)]ds_\alpha\right\}F(k_\alpha)dk_\alpha$$

（ここで、２重積分 $\int_{-K}^{K}\int_{|K_\alpha|}^{2K-|K_\alpha|} ds_\alpha dk_\alpha/2 \rightarrow \int_0^K\int_0^K dx\,dx'$

を考慮して）

$$=\int_0^K\int_0^K [F(k_\alpha)/C_1(k_\alpha)]H_1(x_\alpha)H_1(x_\alpha')dx_\alpha dx_\alpha' \tag{7}$$

これが(6)の右辺と同じであるためには、この2重積分をモンテカルロのsampling で示す時に、$x_\alpha = x'_\alpha$ の場合を避けておかなければならない。これは、x_α と x'_α が独立に選ばれるべきであることから当然であろう。(仮に、この場合を入れたとしても、その場合の数は n であるから、相対誤差は〜1/n となり、モンテカルロ法の標準誤差(〜$1/n^{1/2}$)より小さい。3次元積分 $\int d\mathbf{k}$ を考えるときには、

$$C(\mathbf{k}) = \prod_{\alpha=1}^{3} C_1(k_\alpha), \quad H(\mathbf{x}) = \prod_{\alpha=1}^{3} H_1(x_\alpha)$$

を使って同様に表現すればよい。

4. N-S方程式の非線形項の取扱いと不変性

(7)の表現を使って、非線形項の積分を表してみよう、先ず $\mathbf{k} = \mathbf{x} - \mathbf{x}'$ は固定されているとし、$\mathbf{p} = \mathbf{x}' - \mathbf{x}''$, $\mathbf{q} = \mathbf{x}''' - \mathbf{x}$ として、非線形項は

$$\iint \widetilde{M}_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{k})\, U^*_\beta(\mathbf{p},t) U^*_\gamma(\mathbf{q},t)\, \delta(\mathbf{k}+\mathbf{p}+\mathbf{q})\, d\mathbf{p}\, d\mathbf{q}$$

$$= \int_0^{K^3} \cdots \int_0^{K^3} \widetilde{M}_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{k}) U^*_\beta(\mathbf{p},t) U^*_\gamma(\mathbf{q},t)\, \delta(\mathbf{x}''' - \mathbf{x}'')[C(\mathbf{p})C(\mathbf{q})]^{-1}$$

$$\times H(\mathbf{x}') H(\mathbf{x}'') H(\mathbf{x}''') H(\mathbf{x})\, d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}'\, d\mathbf{x}''\, d\mathbf{x}'''$$

$$= \int_0^{K^3} \int_0^{K^3} \int_0^{K^3} \widetilde{M}_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{k}) U^*_\beta(\mathbf{p},t) U^*_\gamma(\mathbf{q},t)[C(\mathbf{p})C(\mathbf{q})]^{-1}$$

$$\times H(\mathbf{x}) H(\mathbf{x}') H(\mathbf{x}'')^2\, d\mathbf{x}\, d\mathbf{x}'\, d\mathbf{x}''$$

(これに対して、前節で述べた sampling によってモンテカルロ法の評価をする

とすれば、 $\mathbf{x}$ と $\mathbf{x}'$ は固定されねばならないから、 $\int d\mathbf{x}$ と $\int d\mathbf{x}'$ は $\mathbf{x}=\mathbf{x}$, $\mathbf{x}'=\mathbf{x}'$ の one sample に帰着し、又 $\int d\mathbf{x}'$ は、(n -2)個の確率密度 $H(\mathbf{x}'')$ による samples の平均値におきかえることができるから、)

$$= \frac{1}{n-2}\sum_{j=1}^{n-2} M_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{k})U^*_\beta(\mathbf{p}_j,t)U^*_\gamma(\mathbf{q}_j,t)\left[\frac{K^6 H(\mathbf{x})H(\mathbf{x}')H(\mathbf{x}_j)}{C(\mathbf{p}_j)C(\mathbf{q}_j)}\right] \qquad (8)$$

と表現してもよい。

この表現は、N-S方程式の不変性を保存するのである。実際、(6)を使って全エネルギーの時間的変化を表し、N-S方程式の非線形項に(8)を入れてみよう。即ち、

$$\frac{1}{{}_nP_2}\sum_{i=1}^{{}_nP_2}\frac{U^*_\alpha(\mathbf{k}_i,t)\,\partial U_\alpha(\mathbf{k}_i,t)}{C(\mathbf{k}_i)\,\partial t} = \frac{1}{{}_nP_2(n-2)}\sum_{i=1}^{{}_nP_2}\sum_{j=1}^{n-2}\widetilde{M}_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{k}_i)$$

$$\times U^*_\alpha(\mathbf{k}_i,t)U^*_\beta(\mathbf{p}_j,t)U^*_\gamma(\mathbf{q}_j,t)\,\frac{K^6 H(\mathbf{x}_i)H(\mathbf{x}_i')H(\mathbf{x}_j)}{C(\mathbf{k}_i)C(\mathbf{p}_j)C(\mathbf{q}_j)} \qquad (9)$$

右辺は $[0,K]^3$ 内の n 点で構成できるあらゆる Fundamental triads を含む。そこで、N-S方程式の不変性はすべての $(\mathbf{k}_i,\mathbf{p}_j,\mathbf{q}_j)$ の triad について、

$$\widetilde{M}_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{k}_i)+\widetilde{M}_{\beta\gamma\alpha}(\mathbf{p}_j)+\widetilde{M}_{\gamma\alpha\beta}(\mathbf{q}_j)=0 \qquad (10)$$

の性質によって(9)の右辺=0 になることによるのであるが、[ ]の因子があってもなくても、この事実は変わらないことは、[ ]が cyclic symmetry をもつことから明かである。これは helicity についてもいえる。

この結果、(2)の右辺を(8)($\mathbf{k}$ を $\mathbf{k}_a$ と書きかえる)でおきかえたものがより合理的な新しい基礎方程式となるだろう。

5. エネルギーの等分配について

Hopf の証明によるまでもなく、閉じたN-S方程式($\nu=0$)に保存量があれば、これに関するカノニカル分布が確率密度の定常状態として存在する。今の場合、エネルギーのカノニカル分布は、

$$\sim \exp\left(-\frac{\beta}{{}_nP_2}\sum_{i=1}^{{}_nP_2}[U_\alpha^*(\mathbf{k}_i,t)U_\alpha(\mathbf{k}_i,t)/C(\mathbf{k}_i)]/2\right) \qquad (11)$$

である。βは統計力学の 1/kT に対応する。これで分かる通り、各自由度のエネルギーはC($\mathbf{k}_i$)に比例して分布する。従って、われわれの有限個の sampled modes の力学は、文献5のものでも、現在のものでも、必ずしもエネルギー等分配は導けないのである。C($\mathbf{k}$)=const の時のみ、例外的に成立する。

しかし、C($\mathbf{k}$)=const でない場合には、力学は不適格かというと、必ずしもそうではない。文献5がそのいい例である。$\nu\neq0$ の時は、エネルギー等分配は勿論実現しないのであって、C($\mathbf{k}$)の選択はかなり自由であると思われる。importance sampling の standard error を小さくするという数学的観点からいうなら、(1)の右辺の summand(又はintegrand) に近い形が最もいいのである。(つまりその場合にはnが小さくて良い結果が得られるだろう。)いずれにしろC($\mathbf{k}$)の変化に対する結果の影響は、理論上はモンテカルロ法の誤差の範囲内にある。

Kを大きくとって、kの大きい所の sampling を粗くするにはC(k_α)~k_α^{-1} がよい。これは、log scale で一様に k_α 又は $|\mathbf{k}|$ を sample していることになる。cascade model の方程式の思想はこれである。

6.　$C_1(k)$ を与えて $H_1(x)$ を解くこと

(5)の非線型積分方程式を解けばよい。全く絶望的にみえるが、ラプラス変換で解ける。

$(s+k)/2=\sigma$ とおき、$k>0$ の場合を考える。$(C_1(k)=C_1(-k))$

$$C_1(k)=\int_k^K H_1(\sigma)H_1(\sigma-k)d\sigma$$

$$=-\int_{K-k}^0 H_1(K-u)H_1(K-u-k)du$$

更に変数変換して、

$$C_1(K-t)=\int_0^t H_1(K-u)H_1(t-u)du \tag{12}$$

これを、ラプラス変換すると、

$$\mathcal{L}C_1(K-t;p)=\mathcal{L}H_1(K-t;p)\mathcal{L}H_1(t;p) \tag{13}$$

一方、

$$\mathcal{L}H_1(t,p)\equiv\int_0^K H_1(t)e^{-pt}dt=-\int_K^0 H_1(K-t)e^{-p(K-t)}dt$$

$$=e^{-pK}\int_0^K H_1(K-t)e^{pt}dt=e^{-pK}\mathcal{L}H_1(K-t;-p) \tag{14}$$

$$\mathcal{L}C_1(K-t,p)=\int_0^{2K} C_1(K-t)e^{-pt}dt=\int_{-K}^K C_1(k)e^{-p(K-k)}dk$$

$$=\int_0^K C_1(k)e^{-p(K-k)}dk+\int_0^K C_1(-k)e^{-p(K+k)}dk$$

$(C_1(k)=C_1(-k)!)$

$$= e^{-pK}[\mathcal{L}C_1(t;-p)+\mathcal{L}C_1(t;p)] \tag{15}$$

(13)〜(15)より、

$$\mathcal{L}C_1(t,-p)+\mathcal{L}C_1(t,p)=\mathcal{L}H_1(t,-p)\mathcal{L}H_1(t,p) \tag{16}$$

を得る。$\mathcal{L}H_1$ の p についての対称性を仮定すれば、$H_1(x)$ は左辺の平方根の逆ラプラス変換によって表される。左辺の平方根は p について対称であるから、そのような解は存在し得る。

参考文献

1)細川巌：日本物理学会誌 第31巻第9号(1976), p. 721.

2)細川巌：「乱流現象の解明と制御」理論系4班合同研究会報告集(1982), p. 149.

3)E. N. Lorentz: J. Fluid Mech. 55(1972), p. 545.

4)R. H. Kraichnan: in Theoretical Approaches to Turbulence, D. L. Dwoyer, M. Y. Hussaini and R. G. Voigt, Eds. (Springer Verlag, New York, 1985), Chap. 5.

5)I. Hosokawa and K. Yamamoto: J. Phys. Soc. Jpn. 56(1987), no. 2, to appear.