

乱流と微小粒子群の相互作用に関するシミュレーション研究

名古屋工業大学大学院・創成シミュレーション工学専攻 渡邊 威

Takeshi WATANABE

Department of Scientific and Engineering Simulation,
Nagoya Institute of Technology

1 はじめに

近年の HPC の飛躍的な発展は、乱流の基礎研究の裾野を大きく広げている。乱流場を高解像度で計算するのみならず、発達した乱流によって輸送される物質や温度、あるいは流れ場を浮遊する小さな粒子群の挙動を精度よく予測し、流れとの相互作用を取り扱った数値計算が現実的な状況下でも実行可能になりつつある。乱流は、幅広いスケールに渡る運動エネルギーの輸送と、その熱への散逸過程により非平衡な定常状態が実現された、複雑で不規則な運動状態として特徴づけられる。また乱流は秩序だった階層的渦構造を内包し、それらが乱流自身や物質輸送の動力学に重要な役割を果たしていることが認識されるようになった。これは並列化プログラミングの普及による高解像度計算の進展や、可視化ソフトウェアの進歩によるところが大きい。

気象分野や工学の諸分野で扱う流れの多くは乱流状態にある。これらの分野における乱流の重要な役割は、熱や物質の混合や拡散の促進であろう。乱流による熱や物質の輸送は、その変動を記述するスカラー場の移流拡散方程式

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \kappa \nabla^2 T \quad (1)$$

によって記述される。特にスカラー量 T の変動が流れ場の時間発展に影響を及ぼさないとき、 T はパッシブスカラーと呼ばれる。乱流によって輸送されるパッシブスカラー場は、乱流速度場とは異なる特異な空間構造と統計性質を示し、これに関する理論、実験、シミュレーション研究は膨大な数にのぼる [1, 2, 3]。

乱流による熱物質の混合や、サブコルモゴロフスケールの小物体の乱流輸送を精度よく解析するためには、散逸スケールの小渦まで十分解像した直接数値計算 (DNS) を行う必要がある。十分な解像度条件を満たさない DNS は、場の強い揺らぎを過少評価することが知られており [4, 5]、間欠性が重要となる速度勾配や加速度の統計性に及ぼす影響は大きい。発達した乱流による熱物質の輸送問題の解析には、十分な慣性領域の広さを確保しつつ、散逸スケールまで十分解像した計算を行う必要があるため、その計算コストは非常に莫大なものになる [6]。

乱流による微小粒子群の拡散とその相互作用を扱った最も簡単な問題は、ストークス抵抗を受けながら乱流中を運動する慣性粒子の研究であろう。ここでは粒子の直径 $d = 2a$ (a は粒子半径) は、乱流の最も小さな代表長さ l_η よりも小さい、微小な粒子を考える。質量 m のある慣性粒子が従う運動方程式は

$$\frac{d\mathbf{X}_p(t)}{dt} = \mathbf{V}_p(t), \quad m \frac{d\mathbf{V}_p(t)}{dt} = \zeta(\mathbf{u}(\mathbf{X}_p(t), t) - \mathbf{V}_p(t)) + \mathbf{F}, \quad (2)$$

で与えられる。 $\mathbf{X}_p, \mathbf{V}_p$ はそれぞれ粒子の位置及び速度ベクトルを表し、式 (2) の右辺第 1 項はストークス抵抗により流体から受ける力 ($\zeta = 6\pi\mu a$; μ は流体の粘度) を表す。右辺第 2 項の \mathbf{F} は、重力や粒子間相互作用といった、流体以外から粒子に働く力を表している。流れへの粒

子の追従性を表す特性時間 $\tau_p = m/\zeta$ と、乱流の小スケールでの代表時間（コルモゴロフ時間） τ_η を用いて、ストークス数 S_t

$$S_t \equiv \frac{\tau_p}{\tau_\eta} \quad (3)$$

が定義される。 $S_t = 1$ 程度の時、粒子群は乱流中において局在した分布をとることが知られており、例えば乱流中の粒子間衝突頻度の解析を行うときには重要なパラメータとなる [7, 8]。 N_p 個からなる微小粒子集団による流れ場への反作用力は、個々の粒子によるポイント力の総和として扱われ、これは

$$\mathbf{f}_p = -\frac{1}{\rho} \sum_{n=1}^{N_p} \zeta (\mathbf{u}(\mathbf{X}_p^{(n)}(t), t) - \mathbf{V}_p^{(n)}(t)) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{X}_p^{(n)}(t)) \quad (4)$$

と表される。 $\delta(\mathbf{x})$ は Dirac のデルタ関数である。流体力学の基礎方程式に式 (4) を付加した計算を行うことによって、微小粒子集団による乱流変調 [9] や、粒子沈降速度への影響 [10] が調べられている。

乱流によるスカラー場の輸送 (式 (1)) と、粒子系のラグランジュ的な時間発展 (式 (2)) を同時に取り扱う重要な問題の一つは、雲マイクロ物理過程の丸ごとシミュレーションである [11]。これは乱流による温度場と水蒸気場の二つのスカラー量の発展方程式を時間積分すると同時に、雲中を漂う粒径が $30\mu\text{m}$ 程度の液滴（雲粒子）の時間発展をラグランジュ的に追跡する必要がある。雲粒子の凝結による成長や雲粒子同士の衝突併合による成長には、乱流による混合過程や entrainment が重要なことが示唆されているが [12]、これらのメカニズムを第一原理的な計算によって明らかにする試みが始まっている。

乱流と微小粒子集団との相互作用が重要となる問題の一つに、鎖状高分子による乱流の摩擦抵抗低減が挙げられる [13, 14, 15]。鎖状高分子の特徴的な長さスケールはその末端間距離であり、最大 $200\mu\text{m}$ 程度である。これは乱流の最小長さスケール（散逸長さ l_η ）と同程度か、あるいはそれより小さい。一方で高分子鎖が鎖状からコイル状に変形するのに要する緩和時間 τ のオーダーは 40ms 程度であり、乱流の最も小さな時間スケール τ_η より十分長くなりえる。これは、乱流中の鎖状高分子を内部自由度を有する微小な超粒子として扱うことが可能であることを意味し、乱流と超粒子群の相互作用として乱流摩擦抵抗低減の素過程をとらえることが可能になる。

乱流中の高分子鎖の挙動は、乱流の小スケールにおける特性時間 τ_η と、高分子鎖の緩和時間 τ との大小関係によって大きく異なる。 τ と τ_η の比で定義される無次元量 W_i

$$W_i \equiv \frac{\tau}{\tau_\eta} \quad (5)$$

は Weissenberg 数と呼ばれ、流れの中の高分子ダイナミクスを特徴づける重要なパラメータである。 $W_i < 1$ の時、速度勾配による伸長よりも弾性力が打ち勝つために高分子鎖はコイル状の構造にとどまる傾向にある。逆に $W_i > 1$ の場合には、流れ場による伸長作用が優位になり、高分子は紐状の構造をとるようになる。これはコイル-ストレッチ (CS) 転移と呼ばれる [16]。単純せん断流れやランダム速度場における単一高分子の挙動は理論的な取り扱いの容易さから、それが示す CS 転移の性質が詳細に調べられている [17, 18, 19]。一方で、等方乱流中における高分子鎖の CS 転移の性質は、近年数値計算により明らかにされている [20, 21]。

乱流摩擦抵抗低減に関する数値的研究は、高分子鎖の配位のアンサンブル平均として決定されるストレス場の時間発展式（構成方程式）と、流体力学の基礎方程式を連結した数値計算が数多く行われている [22]。構成方程式のミクロな起源は粒子描像による高分子鎖の運動方程式であるので [23]、高分子を相互作用する粒子系（バネ-ビーズモデル [24]）として取

り扱い、流れ場は流体方程式を用いて解析するオイラー・ラグランジュ計算による研究が近年行われている [25, 26, 27, 28, 29, 30]. 最も単純な高分子鎖の粒子モデルは、質量 m の 2 個の質点をバネで連結したダンベルモデルであり、その時間発展方程式は次式で与えられる.

$$m \frac{d\mathbf{v}_1^{(n)}}{dt} = -\zeta \left(\mathbf{v}_1^{(n)} - \mathbf{u}(\mathbf{x}_1^{(n)}, t) \right) - kf \left(|\mathbf{x}_1^{(n)} - \mathbf{x}_2^{(n)}| \right) \left(\mathbf{x}_1^{(n)} - \mathbf{x}_2^{(n)} \right) + \tilde{W}_1^{(n)}, \quad (6)$$

$$m \frac{d\mathbf{v}_2^{(n)}}{dt} = -\zeta \left(\mathbf{v}_2^{(n)} - \mathbf{u}(\mathbf{x}_2^{(n)}, t) \right) - kf \left(|\mathbf{x}_2^{(n)} - \mathbf{x}_1^{(n)}| \right) \left(\mathbf{x}_2^{(n)} - \mathbf{x}_1^{(n)} \right) + \tilde{W}_2^{(n)}. \quad (7)$$

ここで右辺第 1 項はストークス抵抗による力、第 2 項は非線形バネによる弾性力、第 3 項はブラウン運動による熱揺動力を示し、

$$\langle \tilde{W}_{j,\alpha}^{(n)}(t) \rangle = 0, \quad \langle \tilde{W}_{j,\alpha}^{(n)}(t) \tilde{W}_{k,\beta}^{(m)}(s) \rangle = 2\pi k_B T \zeta \delta_{jk} \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta} \delta(t-s) \quad (8)$$

の統計に従う. ここで k_B と T はそれぞれボルツマン定数と温度を表す. 式 (6) と式 (7) の右辺第 2 項に含まれるバネ定数 k 及び関数 $f(z)$ は、弾性力を特徴づけるパラメータとある関数である. 流体力学の基礎式の数値積分にはスペクトル法を用い、それに式 (6), (7) のブラウン動力学計算を連結するオイラー・ラグランジュ計算を実施した先駆的研究として、文献 [26] が挙げられる.

上記で紹介した例以外にも、乱流中のマイクロバブルやプランクトンの挙動、プラズマ粒子シミュレーションといった、場と粒子の相互作用を伴う問題は数多く存在し、関連する研究は多岐にかつ分野横断的に存在する. 個々の研究分野には特有の問題も存在するが、上述した系で扱われる方程式の数理構造やその解析手法には共通する部分が多い. よって、ある一つの分野で培われた計算手法・計算効率化法を、他分野のシミュレーション研究へ応用することは比較的容易であると考えられる.

本研究の目的は、乱流と微小粒子集団の相互作用を扱ったシミュレーション研究で問題となる計算手法や効率化法、高精度解法を探求することにある. 例えば乱流と微小粒子群の相互作用 (2way カップリング計算) を実現するには、ポイント力の近似計算を効率よく実施し、かつ保存則などをなるべく精度良く満足するように適切な取扱いが必要になる. また場と点との情報の受け渡しに伴う計算コストにも気を配らなければならない. 本稿では著者がこれまで行ってきた乱流と高分子鎖の相互作用計算を例に挙げて、数値計算上のいくつかの工夫とその有効性について議論する. また、高分子鎖による減衰性乱流への影響を議論した先行研究 [27, 28, 30] に加えて、今回新たに解析した計算結果についても簡単に紹介する.

2 乱流と高分子鎖の相互作用に関するオイラー・ラグランジュシミュレーション

2.1 基礎方程式

希薄な高分子溶液の流れを考える. 高分子鎖は式 (6),(7) で表されるダンベルモデルを用いてモデル化し、溶媒の運動は Navier-Stokes(NS) 方程式に従う. 希薄系を扱うので、異なるダンベルモデル間の相互作用は無視する. 高分子鎖の慣性は十分小さいので、式 (6),(7) の慣性を無視した方程式は以下のように与えられる.

$$\frac{d\mathbf{R}^{(n)}}{dt} = \mathbf{u}_1^{(n)} - \mathbf{u}_2^{(n)} - \frac{1}{2\tau} f \left(\frac{|\mathbf{R}^{(n)}|}{L_{max}} \right) \mathbf{R}^{(n)} + \frac{r_{eq}}{\sqrt{2}\tau} \left(\mathbf{W}_1^{(n)} - \mathbf{W}_2^{(n)} \right), \quad (9)$$

$$\frac{d\mathbf{r}_g^{(n)}}{dt} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{u}_1^{(n)} + \mathbf{u}_2^{(n)} \right) + \frac{r_{eq}}{\sqrt{8\tau}} \left(\mathbf{W}_1^{(n)} + \mathbf{W}_2^{(n)} \right), \quad \mathbf{u}_\alpha^{(n)} \equiv \mathbf{u}(\mathbf{x}_\alpha^{(n)}(t), t). \quad (10)$$

ここで $\mathbf{R}^{(n)}(t)$ はダンベルの末端間ベクトル, $\mathbf{r}_g^{(n)}(t)$ は重心ベクトルをそれぞれ表す. 溶媒の速度場は $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ である. 非線形バネとして, 本研究では finitely extensible nonlinear elastic (FENE) モデル $f(z) = 1/(1-z^2)$ を用いる [23, 24]. 式 (9) において, L_{max} はダンベルの最大伸び切り長を表す. また $\mathbf{W}_{1,2}^{(n)}(t)$ は溶媒中の粒子のブラウン運動によるランダム力を表し,

$$\langle W_{\alpha,i}^{(n)}(t) \rangle = 0, \quad \langle W_{\alpha,i}^{(n)}(t) W_{\beta,j}^{(m)}(s) \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \delta_{nm} \delta(t-s), \quad (11)$$

のガウス統計に従う. ここで $\langle \dots \rangle$ はアンサンブル平均を表す. 下付き文字 $\alpha, \beta, i, j, n, m$ はそれぞれ $(\alpha, \beta) = 1$ or 2 , $(i, j) = 1, 2, 3$, $(n, m) = 1, 2, \dots, N_t$ の値をとる. δ_{ij} は Kronecker のデルタである. 定数 τ, r_{eq} はそれぞれ

$$\tau \equiv \frac{\zeta}{4k}, \quad r_{eq} \equiv \sqrt{\frac{k_B T}{k}}, \quad (12)$$

で定義され, 溶媒中のダンベルの緩和時間と平衡長を表す. ここで k はバネ定数, $\zeta \equiv 6\pi\nu_s\rho_s a$ はストークスの抵抗係数 (ρ_s は溶媒の密度, a は粒子半径) である.

溶媒は非圧縮流体とすると, 溶媒の運動は連続の式と NS 方程式に従う.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \nu_s \nabla^2 \mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{T}^p. \quad (13)$$

ここで $p(\mathbf{x}, t)$ は圧力場であり, 溶媒の密度 ρ_s は小球の密度 ρ_d に等しく $\rho_s = \rho_d = 1$ に設定している. 高分子によるストレス場 $\mathbf{T}^p(\mathbf{x}, t)$ は次式で表される [27].

$$\mathbf{T}_{ij}^p(\mathbf{x}, t) = \frac{\nu_p}{\tau} \left(\frac{L_{box}^3}{N_t} \right) \sum_{n=1}^{N_t} t_{ij}^{(n)} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_g^{(n)}), \quad (14)$$

$$t_{ij}^{(n)} \equiv \frac{R_i^{(n)} R_j^{(n)}}{r_{eq}^2} f \left(\frac{|\mathbf{R}^{(n)}|}{L_{max}} \right) - \delta_{ij}. \quad (15)$$

ここで $\nu_p \equiv \nu_s \eta$ は高分子による粘度であり, 定数 $\eta \equiv (3r_{eq}/4a)^2 \Phi_V$ はゼロ剪断粘度比を表す. $\Phi_V \equiv (8\pi N_t/3)(a/L_{box})^3$ はダンベル集団の体積分率である.

2.2 並列計算

式 (9)-(15) の数値計算を実行する上で問題となるのは, 計算で取り扱うダンベルの総数である. 現実的な粒子数としては, 例えば 5ppm の高分子溶液の場合, 散逸長 l_η の箱の中におよそ 3×10^6 個の高分子鎖が存在する見積もりになる [27]. 乱流の数値計算では計算格子間隔を l_η 程度にとる場合が多いので, 流れ場の格子点数を N^3 とすると, $N = 256$ では計算領域内に 5×10^{13} 個の高分子鎖を扱う必要がある. つまり扱う粒子数が膨大になるため, オイラー・ラグランジュ計算を実施する上でいくつかの注意が必要である. 流れ場の格子点数が比較的小さい (レイノルズ数が比較的小さい流れ) の場合, 単純な高速化法としては粒子系の計算をいくつかの計算ノードに分割して割り当て, 流体計算は他の 1 ノードで計算を実施する並列計算を行うことである. この模式図を Fig.1 に示す. この場合, 流体-粒子系のノード間で受け渡す情報は, 各格子点上における溶媒の速度とポリマーストレスの値を格納した 3 次元

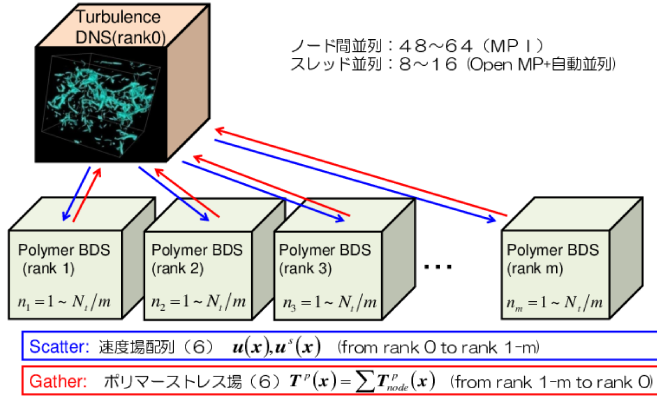


Figure 1: 並列計算の模式図。ダンベルの総数を m グループに分割し, rank 1 – m に分割して計算を実施する。流れ場の計算は rank 0 で実施し, 流れ場とダンベルの相互作用は, rank 0 とその他の rank の間で速度場の scatter とストレス場の gather の MPI 通信を介して行う。

配列である。この計算方法の長所として、領域分割型の並列計算と比べてコード作成が比較的容易であること、流れ場の時間発展にかかる計算は粒子系の時間発展の背後に隠蔽されるため、この計算時間はほとんど無視できること、粒子数の増加に伴って計算ノードを同様に増やしても、計算効率はそれほど落ちないことが挙げられる。以下に示す並列計算を実施したコードは、ノード間通信は MPI を用いて、またノード内のスレッド並列は Open MP を用いて実装した。

2.3 2way カップリング計算の精度向上

流れ場と粒子群の 2way カップリング計算を行うためには、ある時間におけるダンベル集団の配位からストレス場を求めて、それを流体の運動方程式に取り込む必要がある。具体的には式 (14), (15) の計算を行うことが問題になる。まずデルタ関数は数値計算では取り扱えないので、近似関数

$$\delta_{\Delta}(x) = d_{\Delta}(x_1)d_{\Delta}(x_2)d_{\Delta}(x_3), \quad (16)$$

$$d_{\Delta}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta} \left(1 - \frac{|x|}{\Delta}\right) & (|x| \leq \Delta) \\ 0 & (|x| > \Delta) \end{cases} \quad (17)$$

を用いた。ここで、 Δ は格子間隔 Δx に選ぶ。これは、粒子の位置座標 x に働く力を、それを取り囲む 8 個の格子点に線形補間の重み関数を用いて分配することを意味している [31]。これは巨大粒子数を扱う本研究の場合は、計算精度とコストのバランスの観点から、最良の方法であると著者は感じている。さらにフーリエスペクトル法によって流体計算を行う場合は、以下に示す方法がストレス場の計算精度向上に有効であることがわかった [30]。

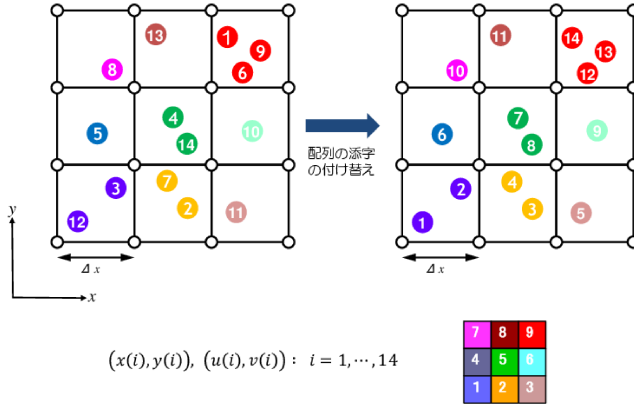


Figure 2: 粒子番号のソーティングに関する模式図. 簡単のために, 2次元の場合を例に示す. 計算単位格子内に属する粒子について同じラベル番号を設定し, ラベル番号順になるようにソーティングを行う. ただし同一ラベル番号の粒子はソーティングの際には区別しない.

ステップ 1) $t_{ij}^{(n)}$ (式 (15)) をダンベルの重心点を取り囲む 8 格子点に分配し, すべてのダンベルについてこの和をとることで $T_r^p(\mathbf{x}, t)$ を求める. これは通常の格子点上でのストレス場の計算を意味する.

ステップ 2) $t_{ij}^{(n)}$ をダンベルの重心点を取り囲む, $(\Delta x/2, \Delta y/2, \Delta z/2)$ だけずれたスタガード格子の 8 点に分配し, ステップ 1) と同様にして $T_s^p(\mathbf{x} - \Delta \mathbf{x}/2, t)$ を得る.

ステップ 3) 高速フーリエ変換 (FFT) ($\hat{A} \equiv \mathcal{F}[A]$) を用いて, 波数空間におけるポリマーストレス場を以下の式で評価する.

$$\hat{T}^p(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{2} (\mathcal{F}[T_r^p(\mathbf{x}, t)] + e^{i\mathbf{k} \cdot \Delta \mathbf{x}/2} \mathcal{F}[T_s^p(\mathbf{x} - \Delta \mathbf{x}/2, t)]). \quad (18)$$

この方法は, Δ を実質的に $\Delta x/2$ にしていることを意味する. 新しく付け加わったステップ 2), 3) を用いたストレス場の計算は, ステップ 1) のみで評価する場合に比べて, 計算コストはおよそ倍になるが, エネルギースペクトルの切断波数近傍での人工的な跳ね上がりを抑制したり, ポリマーストレス場の急激な空間変動を緩和する効果があることが確認された [30].

2.4 速度補間, ストレス場計算の高速化

オイラー・ラグランジュ計算において問題になるのは, 粒子系と場の間での情報の受け渡しに要する計算コストである. 例えばストークス抵抗力を評価するためには, 粒子の位置座標における流速の値を評価しなければならない. ところが一般的に粒子は格子点上に存在しないので, なんらかの補間法を用いて近似的に評価しなければならない. 補間にはさまざまな方法が存在し, 乱流の DNS 研究が盛んになった 1980 年代からその精度と計算コストについて調べられてきた [32]. 最も汎用的なスキームは, 3 方向線形補間であろう. これは粒子点近傍の 8 格

	ソーティングあり	ソーティングなし
polymer_stress	124.7s (29.0%)	37.6s (12.7%)
ts13_interporation	63.0s (14.6%)	42.2s (14.3%)
全体	430.6s (100%)	295.7s (100%)

Table 1: 粒子点における速度補間およびポリマーストレス計算にかかる計算時間の比較を示す。計算条件の詳細は本文を参照のこと。

子点を用いて流速を近似評価する。一般に精度が高い補間方法は、粒子点近傍のより多くの格子点を用いて補間式を構成する。ここで問題となるのは、例えば速度場の各点の値は3次元配列 $u(ix, iy, iz)$ に格納されているため、補間計算では各粒子ごとに配列に格納されているデータを参照しなければならないことである。乱流中の粒子の位置座標の情報を格納した配列を $x(i)$ とすると、位置座標は一般的にその配列の添字 $i = 1, 2, \dots, N_p$ の順とは無関係に計算領域内に分布することになる。これは添字 i の順に補間計算を行うと、計算機のメモリ上では場の配列データを参照するたびにメモリのランダムアクセスが生じることを意味する。これによるキャッシュミス率の増加は、計算に要する時間の増加を意味し、特に粒子数密度が大きな状況では致命的な計算コストの増大につながる。このコストは流れ場への反作用力を計算する際にも同様に生じるため、2way カップリング計算ではこれらの計算にかかるコストをいかに抑えるかが問題となる。

上述したキャッシュミス率をできるだけ減らす試みとして、ある計算単位格子（セル）内に存在するすべての粒子に同じラベル数字を付け、他セル内の同一ラベル数字を有する粒子群と区別し、各セルに対応したラベル数字の順と粒子番号を示す配列の添字 i の順が一致するように添字を並べ替える方法を検討した。2次元系 (4×4 格子内の14粒子) における具体的な方法について Fig.2 に模式図を示す。Figure 2 では、計算単位格子ごとに9種類のラベル番号を順に用意し、各セルに属する粒子はそれぞれ同一のラベル番号（左下のセルから若い順に1-9を割り振る）を有する。次に粒子の位置、速度を表す配列の添字 $i (i = 1, \dots, 14)$ が、ラベル番号の若い順になるように配列の添字の付け替え（ソーティング）を行う。これにより、配列の添字順に計算ループを回したとき、場の配列を参照する際に、キャッシュ上に必要な場のデータが残っている可能性が高まるため、キャッシュミス率の低減が期待できる。

実際に Fig.2 の方法でどの程度計算コストが削減できるか検証を行った。計算に用いる格子点数及びダンベル総数（粒子数）はそれぞれ $N = 128^3, N_p = 2.2 \times 10^7$ （10.5個/計算セル）とした。計算は名大のFX10を用いて、コードは前節で示した並列化法によりハイブリッド並列（MPI + Open MP）で実装している。初期に各粒子は一様乱数を用いて領域全体に一様に分布させ、そこから100ステップの計算に要する時間をプロファイラーを用いて計測した。結果は初期時間における粒子番号のソーティングを行った場合と行わない場合で比較した。結果をまとめたものを Table 1 に示す。表中の polymer_stress はポリマーストレス場を計算するためのサブルーチン名、ts13_interporation は ts13 スキーム [32] による速度補間を行うサブルーチン名を示している。この結果より、ソーティングを行った方が、行わない場合に比べて、計算スピードは polymer_stress で約3.3倍、ts13_interporation で約1.5倍になっていることがわかる。2way カップリング計算が全体に占める割合はソーティングを行わない場合は44%であったのに対し、ソーティングを行えば27%まで抑えられることが分かった。

この結果より、粒子数密度が大きな系の2way カップリング計算を行う場合、その部分の計算に要する時間は全体の計算時間の大きな部分を占めること、また計算コストはソーティングなどの粒子の並べ替えによって大きく削減できることがわかった。

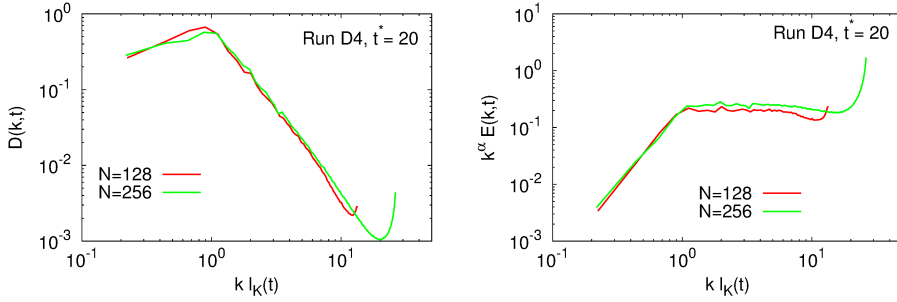


Figure 3: 減衰乱流の最終状態におけるエネルギースペクトルの振舞について、その計算解像度依存性を調べたもの。左図:散逸スペクトルの振舞の比較, 右図: $k^\alpha E(k)$ ($\alpha = 4.1$) としてプロットし、べき領域の存在範囲を調べたもの。

3 減衰乱流における高分子の影響

本節では、乱流の減衰過程に高分子が及ぼす影響について、乱流場(オイラー)とダンベル集団(ラグランジュ)の2wayカップリング計算を実施した結果について述べる。主要な結果については、すでに過去の著者の論文[27, 28, 30]において述べているので、ここではその後得られたいくつかの結果について述べる。

3.1 エネルギースペクトルのべき則の解像度依存性

これまでの研究で、減衰乱流の最終状態においてワイゼンベルグ数 W_i が十分高い場合には、エネルギースペクトルは高波数領域でべき則減衰 ($E(k) \sim k^{-\alpha}$) を示す事が明らかになった。指数 α の値は W_i 数の増大とともに減少するが、最も大きな W_i 数の場合、およそ4程度の値をとることが数値計算によって見出された[30]。

高波数領域のべき則がどのようなメカニズムで形成されるのか、また指数の値はどのように説明されるのか、現時点で明らかになっていないことが多い。またべき則が成り立つ波数領域の上限や下限は何が決められているのか定かではない。特にべき則領域の下限の波数はDNSの切断波数に近い場合、数値計算上の制約によって決まっているのか、或いは物理的に意味があるスケールなのかを明らかにする必要がある。

そこで、ここでは新たに物理的な条件は変えずに、空間解像度を上げたDNSを実行して、解像度の違いがエネルギースペクトルのべき則の存在領域やべき指数の値に及ぼす影響を吟味した。具体的な計算条件は、文献[30]に記載してある最も W_i 数が大きなrunであるRun D4の場合に、空間解像度を 256^3 、ダンベル総数を $N_p = 1.532 \times 10^9$ とした計算を実行した。結果をFig.3に示す。

Figure 3より、解像度が変化してもべき指数の値に大きな影響を及ぼさないこと、またべき則が成り立つ波数領域は、解像度が変わっても大きく変化していないことがわかる。即ち、観測されるべき則が数値計算上の問題に起因して出現しているものではなく、物理的なメカニズムによって形成されていることを示唆している。

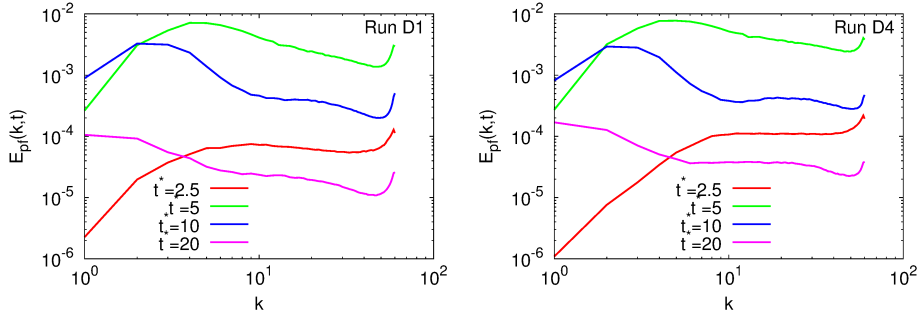


Figure 4: $\mathbf{f}_p = \nabla \cdot \mathbf{T}^p$ のスペクトルの時間変化の様子を示す. 左図:Run D1, 右図:Run D4 でそれぞれ得られたもの.

3.2 $\nabla \cdot \mathbf{T}^p$ のスペクトルの振る舞い

前節で述べたように, エネルギースペクトルのべき則が形成される物理的背景はよくわかっていない. 高分子による影響が非常に強いときにべき則減衰が観測されるので, 高分子による乱流への影響を検証するためには, ポリマーストレス場そのものの統計性質を直接調べることが重要である. ここでは高分子による乱流への反作用力 $\mathbf{f}_p = \nabla \cdot \mathbf{T}^p$ のスペクトルの振る舞いを検証した. 文献 [30] 中の Run D1 と Run D4 の場合に, それぞれ \mathbf{f}_p のスペクトル $E_{pf}(k, t)$ の時間発展の様子を示した結果を Fig.4 に示す.

この結果より, $E_{pf}(k)$ もエネルギースペクトルと同様の波数領域でべき則減衰を示すことがわかる. 特徴的な振る舞いは Run D4 の最終時刻のものにみられ, スペクトルは波数によらずほぼ一定となっていることがわかる. ところで $E_{pf}(k)$ の振る舞いは, エネルギースペクトルの振る舞いと密接に関係する. 減衰乱流の最終状態においては, NS 式の非線形項の寄与は十分小さく無視できると考えられる. この減衰過程での主要な項は散逸項と $\nabla \cdot \mathbf{T}^p$ であろう. 流れ場が準定常状態にあるとすると,

$$0 = -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}_p \quad (19)$$

が成り立つ. 式 (19) より

$$E(k) \sim \nu^{-2} k^{-4} E_{pf}(k) \quad (20)$$

というスペクトル間の関係式が評価される. 例えば $E_{pf}(k)$ が波数に依らずに一定となる場合, 式 (20) より $E(k) \sim k^{-4}$ が得られ, これは Run D4 の結果と矛盾しない. 問題は $E_{pf}(k)$ の振る舞いの起源であるが, これは次節で議論する.

3.3 ポリマーストレス場の構造

前節でポリマーストレス場の発散のスペクトルの振る舞いを調べたが, 特に Run D4 の場合に最終状態で波数に依存しない一定の領域が存在するを見出した. これは, 次元解析的な評価では, ポリマーストレス場 \mathbf{T}^p のスペクトルが k^{-2} のスペクトルを有することを意味する. k^{-2} のスペクトルの代表的なものの一つは, 場のショック構造に起因するスペクトルであろう [33]. 空間的に局在したショック構造と同様な構造がポリマーストレス場に見いだされ

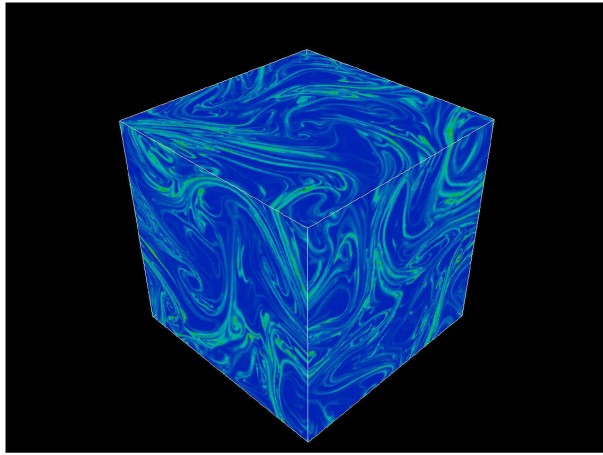


Figure 5: Run D4 における最終時刻のポリマーストレスのトレース場の可視化図. 計算領域の各面におけるコンター図を示しており, 明るい領域ほど大きな値を示す.

れば, 大変興味深い. ここでは, ポリマーストレスのトレース T_{ii}^p をとった場の構造を可視化して調べた. T_{ii}^p はダンベルの伸長の大きさと密接に関係し, 乱流速度場の局所構造に応じて, 大小さまざまな値と空間分布を示す.

Figure 5 に Run D4 の最終時刻における T_{ii}^p の可視化結果を示す. 可視化は計算領域の外壁面上に 2 次元コンター図を用いて表した. この時刻では乱流場は十分に減衰きった状態にあるが, ダンベルの緩和時間は十分長いため, ダンベルの伸長は維持されたままになっている. この可視化結果より, ポリマーストレス場は空間的に局在したシート状の構造を有することがわかる. またこのシート状の構造は W_i 数が高いほどより局在化が顕著になると期待される. なぜなら W_i が大きい時, ダンベルは緩和時間が十分長く構造は拡散しにくいいため, 局在構造が先鋭化するためである. これらの考察から, エネルギースペクトルの k^{-4} に近い振る舞いの起源は, ポリマーストレス場の局在構造にあることが推察される. より明確に両者を関連づけるためには, ストレス場の構造にさらに踏み込んだ解析が必要である.

4 まとめ

本研究では, 乱流と微小粒子群の相互作用に関するシミュレーション研究を実施する上で問題となる計算上の問題点を議論し, 著者が取り組んだいくつかの試みについて, 乱流とダンベル集団の相互作用による計算を例に挙げて紹介した. 粒子群と流れ場を独立した計算ノードで並列化して計算する方法を採用し, 粒子数が大きい系ではこれが有効な並列計算法になりうることを示した. また粒子群から流れ場への反作用力の評価に関して, フーリエスペクトル法を用いた乱流計算の場合に特に有効な計算手法を紹介した. また 2way カップリング計算を実施する際には, 場の配列参照に伴うメモリへのランダムアクセスによって生じるキャッシュミス率の増加が効率的な計算を実施する上での足枷になることを議論した. この問題の解決のために, 粒子位置を表す配列の添字を場の配列の構造に合わせてソーティングすることにより, 計算コストを大幅に削減できることを具体的に示した.

高分子が減衰乱流の統計性に及ぼす影響について, 過去の我々の研究結果 [30] から新たに得られたいくつかの結果と知見について議論した. 特に減衰過程の最終状態におけるエネ

ルギースペクトルのべき則減衰に関して、その計算解像度の影響について調べた。結果として、べき則減衰する領域やべき指数の値は、解像度の変化には大きな影響を受けないことがわかった。さらにべき指数の値の物理的起源を明らかにするために、ポリマーストレス場の構造とスペクトルの振る舞いを調べた。ダンベルの伸長度を表すポリマーストレスのトレース場はシート状の特徴的な空間局在構造を有し、またこのポリマーストレスの発散場のスペクトルは、最も W_i 数が大きいときに波数によらない一定の波数領域が存在することを見出した。これらの結果は、エネルギースペクトルのべき則減衰 k^{-4} がポリマーストレス場の特異構造に起因することを示唆するものであり、弾性乱流 [34, 35] のように高 W_i 数状態で流れ場と高分子鎖が相互作用する問題では、普遍的に観測されるスペクトルである可能性がある。

謝辞

本研究は科学研究費補助金（課題番号 26420106, 15H02218, 24360068）の援助を受けて行われた。また、理化学研究所 (HPCI: hp120147,140024), 核融合科学研究所 (NIFS14KNSS050, NIFS13KNXN274), 及び名古屋大学情報基盤センター (JHPCN: jh140025, H27年度HPC計算科学連携プロジェクト) に計算機資源を提供して頂いた。ここに記して感謝の意を表す。

References

- [1] Z. Warhaft, *Annu. Rev. Fluid Mech.* **32**, 203 (2000).
- [2] G. Falkovich, K. Gawedzki, and M. Vergassola, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 913 (2001).
- [3] T. Gotoh and P. K. Yeung, in *Ten Chapters in Turbulence*, edited by P. Davidson, Y. Kaneda, and K. R. Sreenivasan (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2013).
- [4] T. Watanabe and T. Gotoh, *J. Fluid Mech.* **590**, 117 (2007).
- [5] D. A. Donzis, P. K. Yeung and K. R. Sreenivasan, *Phys. Fluids* **20**, 045108 (2008).
- [6] T. Gotoh and T. Watanabe, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 114502 (2015).
- [7] S. Sundaram and L. R. Collins, *J. Fluid Mech.* **335**, 75 (1997).
- [8] Y. Zhou, A. S. Wexler, and L-P Wang, *Phys. Fluids* **10**, 1206 (1998).
- [9] S. Elghobashi and G. C. Truesdell, *Phys. Fluids A* **5**, 1790 (1993).
- [10] T. Bosse and L. Kleiser, *Phys. Fluids* **18**, 027102 (2006).
- [11] 後藤俊幸, ながれ 掲載予定.
- [12] R. A. Shaw, *Annu. Rev. Fluid Mech.* **35**, 183 (2003).
- [13] J. L. Lumley, *J. Polymer Sci.: Macromolecular Reviews* **7**, 263–290 (1973).
- [14] K. R. Sreenivasan and C. M. White, *J. Fluid Mech.* **409**, 149–164 (2000).
- [15] I. Proccaccia, V. S. L'vov, and R. Benzi, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 225 (2008).

- [16] P. G. De Gennes, *J. Chem. Phys.* **60**, 5030–5042 (1974).
- [17] E. Balkovsky, A. Fouxon, and V. Lebedev, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4765–4768 (2000).
- [18] M. Chertkov, I. Kolokolov, V. Lebedev, and K. Turitsyn, *J. Fluid Mech.* **531**, 251–260 (2005).
- [19] A. Celani, S. Musacchio and D. Vincenzi, *J. Statist. Phys.* **118**, 531–554 (2005).
- [20] S. Jin and L. R. Collins, *New J. Phys.* **9**, 360 (2007).
- [21] T. Watanabe and T. Gotoh, *Phys. Rev. E* **81**, 066301 (2010).
- [22] R. Sureshkumar, A. N. Beris, and R. A. Handler, *Phys. Fluids* **9**, 743 (1997).
- [23] R. B. Bird, C. F. Curtiss, R. C. Armstrong, and O. Hassager, *Dynamics of Polymeric Liquids, Vol.2 Kinetic Theory*, 2nd ed. (Wiley, New York, 1987).
- [24] M. Doi and S. F. Edwards, *The Theory of Polymer Dynamics*, (Oxford University Press, New York, 1986).
- [25] M. Laso and H. C. Ottinger, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **47**, 1–20 (1993).
- [26] T. Peters and J. Schumacher, *Phys. Fluids* **19**, 065109 (2007).
- [27] T. Watanabe and T. Gotoh, *J. Fluid Mech.* **717**, 535 (2013).
- [28] T. Watanabe and T. Gotoh, *J. Phys.: Conf. Ser.* **454**, 012007 (2013).
- [29] K. Horiuchi, K. Matsumoto, and K. Fujiwara, *Phys. Fluids* **25**, 015106 (2013).
- [30] T. Watanabe and T. Gotoh, *Phys. Fluids* **26**, 035110 (2014).
- [31] K. Squires, in *Computational Methods for Multiphase Flow*, (edited by A. Prosperetti and G. Tryggvason, Cambridge University Press, Cambridge, 2007).
- [32] P. K. Yeung and S. B. Pope, *J. Comp. Phys.* **79**, 373–416 (1988).
- [33] P. G. Saffman, *Stud. Appl. Math.* **50**, 377 (1971).
- [34] A. Groisman and V. Steinberg, *Nature* **405**, 53–55, (2000).
- [35] A. Groisman and V. Steinberg, *New J. Phys.*, **6**, 29 (2004).