

乱流におけるエネルギーカスケードの統計

名古屋工業大学大学院機能工学専攻 戸田 卓也 (Takuya Toda)

後藤 俊幸 (Toshiyuki Gotoh)

Department of Engineering Physics,

Nagoya Institute of Technology

概要

ベクトル並列計算機の処理能力を最大限に引き出し、メモリを最大限に有効活用する並列アルゴリズムを開発して、大規模直接数値シミュレーション (DNS) を行った。現時点では、DNS を大規模 (格子点数 2048^3) に実行できる段階にあるが、プロセス間におけるデータ通信に多大な時間を費してしまう結果となった。乱流中の運動エネルギー及びスカラー分散は、波数空間において3つの波数成分の相互作用により、低波数側から高波数側へ輸送される。異なるスケール間におけるこの輸送の局所性と非局所性を DNS を用いて解析を行った。両者は、同程度のスケール間で輸送される局所的な輸送が支配的であることがわかった。特に、この輸送過程では非局所的相互作用が相対的に重要な役割を果たすことが示された。また、両者を比較した場合、スカラー分散の輸送流束における非局所性はエネルギーのそれと比べて相対的に強いことが示された。

1 はじめに

乱流は、無限大自由度、強い非線形性、散逸・開放系の現象であり、微小攪乱に対して鋭敏である。そのため、十分に発達した乱流の統計法則を基礎方程式から解析的に導くことは困難である。近年、計算機能力のめざましい発展により、熱・物質の移動を伴う乱流輸送の研究において、計算科学的手法が有力な手段となっている。ここでは、便宜的な仮説に基づく乱流モデルを一切用いず、非圧縮性流体の Navier-Stokes (以下 NS) 方程式を数値的に解く直接数値シミュレーション (Direct Numerical Simulation; 以下 DNS) を行った。

我々はこれまで格子点数が 1024^3 の DNS を行い、乱流理論でよく知られた慣性小領域をごくわずかではあるが、有限な幅で得ることができた。しかし、それは乱流理論を構築し、乱流の基本的理解を得るほど十分な幅の慣性小領域を実現したものとは言い難い。そこで、より幅広い慣性小領域を得るべく、この DNS をさらに大規模に実行するため、並列計算機に適合したコードの開発を行った。計算機性能が著しく進歩する現在、常に活用する計算機の性能を最大限に引き出す計算技術・アルゴリズムを開発することは至上命題である。本研究における NS 乱流の DNS において、高速フーリエ変換 (Fast Fourier Transform; 以下 FFT) の計算がその演算の大部分を費やすため、この部分をいかに高速に計算させるかが焦点となる。そこで、大規模並列 DNS コードを開発するにあたり、並列化・ベクトル化など高効率化を図るための技術を紹介する。

乱流の特徴は、外的エネルギー供給と関係する巨視的なスケールから、運動エネルギーの熱への散逸と関係する微視的スケールまでの大小様々な渦運動が互いに非線形干渉しながら連続的に存在していることである。この巨視的スケールから微視的スケールへエネルギーが流れていくことをエネルギーカスケードという。この過程は NS 方程式の非線形項により生じるが、波数空間においてこれは3つの波数ベクトルで表現され、それらの相互作用によりエネルギーが輸送される。スカラー分散においても同様な描像が当てはまる。Lagrange 的くりこみ近似 (LRA) による理論解析では、異なるスケール間の相互作用によるエネルギー及びスカラー分散の輸送は、主としてスケールの近い (比が2倍程度の) 渦同士間で行われ、両者を比較すると、スカラー場の方が相対的に非局所的であるという結果が導かれる。しかし、実際にはどのくらい異なるスケール間で輸送されるのか、エネルギーとスカラー分散とではどのように異なるのかについて、大規模 DNS を用いて解析してみることは大変興味深い問題である。

2 基礎方程式

2.1 乱流場とスカラー場

速度場は非圧縮性 NS 方程式, パッシブスカラー場は移流拡散方程式で記述される.

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} - \mathbf{u} \times \boldsymbol{\omega} = -\nabla \left(\frac{p}{\rho} + \frac{\mathbf{u}^2}{2} \right) + \nu \Delta \mathbf{u} + \mathbf{f}, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \theta = \kappa \Delta \theta + g_\theta. \quad (2.2)$$

ここで, $\mathbf{u}, \boldsymbol{\omega} (= \nabla \times \mathbf{u}), p, \theta, \mathbf{f}$ と g_θ はそれぞれ時刻 t , 位置 \mathbf{x} での速度, 渦度, 圧力, パッシブスカラー, 外力, そして外部スカラー源を表し, ρ, ν, κ はそれぞれ流体の密度, 動粘性係数, 分子拡散係数である. ここでは, 簡単のために $\rho = 1, \{\nu, \kappa\} = \text{定数}$ とする. 本研究では, 3次元一様等方性乱流を考え, 外から人工的にエネルギーを注入する外力項 (\mathbf{f} と g_θ) を付加することで定常乱流を実現する. 境界条件は, 3次元立方領域 $K = \{(x, y, z) \mid 0 \leq x, y, z \leq 2\pi\}$ の周期境界条件を用いる. 数値計算は, 波数空間における NS 方程式に対して時間積分し, 時間発展には4次の Runge-Kutta-Gill 法を, 空間には擬スペクトル法を用いる.

2.2 エネルギースペクトル方程式

エネルギースペクトル方程式は

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + 2\nu k^2 \right) E(k, t) = T(k, t) + F(k, t) \quad (2.3)$$

と記述される. ここで, エネルギースペクトル関数 E , エネルギー輸送関数 T 及び外力項から生じる関数 F は次のとおりである. $*$ は複素共役, $Real$ は実数部, δ_{ij} は Kronecker のデルタを意味する.

$$E(k, t) \equiv 4\pi k^2 \left\langle \frac{1}{2} |u(\mathbf{k}, t)|^2 \right\rangle = 4\pi k^2 \left\langle \frac{1}{2} u_i(\mathbf{k}, t) u_i^*(\mathbf{k}, t) \right\rangle, \quad (2.4)$$

$$T(k, t) \equiv 4\pi k^2 \iint_{\mathbf{k}+\mathbf{p}+\mathbf{q}=0} S(\mathbf{k}|\mathbf{p}, \mathbf{q}) d\mathbf{p}d\mathbf{q}, \quad (2.5)$$

$$S(\mathbf{k}|\mathbf{p}, \mathbf{q}) \equiv P_{ij} Real \left\{ \left\langle u_i(\mathbf{k}) [u(\mathbf{p}) \times \boldsymbol{\omega}(\mathbf{q})]_j \right\rangle \right\}, \quad P_{ij}(\mathbf{k}) \equiv \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}, \quad (2.6)$$

$$F(k, t) \equiv 4\pi k^2 Real \left[\left\langle u_i^*(\mathbf{k}) f_i(\mathbf{k}) \right\rangle \right]. \quad (2.7)$$

$T(k, t)$ は, すべての3成分相互作用による波数 k の成分におけるエネルギーの増加を表す関数である. これに関連して, 波数間のエネルギー輸送に関するエネルギー流束関数 Π を

$$\Pi(k, t) \equiv \int_k^\infty T(k', t) dk' \quad (2.8)$$

と定義する. これは, 3成分相互作用によって波数 k を横切って, k より小さいフーリエ成分から大きいフーリエ成分へ輸送されるエネルギー流量を表す.

2.3 スカラー分散スペクトル方程式

スカラー分散スペクトルにおいても, エネルギースペクトルと同様な議論が成り立つ. 定義した諸々の関数の物理的意味はエネルギーの場合と同じである.

スカラー分散スペクトル方程式は

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + 2\kappa k^2 \right) E_\theta(k, t) = T_\theta(k, t) + G_\theta(k, t) \quad (2.9)$$

と記述される。ここで、スカラー分散スペクトル関数 E_θ 、スカラー分散輸送関数 T_θ 及び外力項から生じる関数 G_θ は次のとおりである。

$$E_\theta(k, t) \equiv 4\pi k^2 \left\langle \frac{1}{2} |\theta(\mathbf{k}, t)|^2 \right\rangle = 4\pi k^2 \left\langle \frac{1}{2} \theta(\mathbf{k}, t) \theta^*(\mathbf{k}, t) \right\rangle, \quad (2.10)$$

$$T_\theta(k, t) \equiv 4\pi k^2 \iint_{\mathbf{k}+\mathbf{p}+\mathbf{q}=0} S_\theta(\mathbf{k}|\mathbf{p}, \mathbf{q}) dpdq, \quad (2.11)$$

$$S_\theta(\mathbf{k}|\mathbf{p}, \mathbf{q}) \equiv \text{Real} \left[\langle i\theta(\mathbf{k}) \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{p}) \theta(\mathbf{q}) \rangle \right], \quad (2.12)$$

$$G_\theta(k, t) \equiv 4\pi k^2 \text{Real} \left[\langle \theta^*(\mathbf{k}) g_\theta(\mathbf{k}) \rangle \right]. \quad (2.13)$$

また、スカラー分散流束関数 Π_θ は

$$\Pi_\theta(k, t) \equiv \int_k^\infty T_\theta(k', t) dk' \quad (2.14)$$

と定義される。

3 大規模並列 DNS コードの開発

乱流の DNS では、どれだけ小さいスケールまで正しく解像し、どれくらい大きなレイノルズ数が実現できているかということが、そのデータの有用性をみる上で重要なものさしとなる。計算機コストは主にその解像度の要求で決まる。そこで、DNS を大規模にかつ高速度に実行できるように、計算機的能力を最大限に引き出し、計算機資源のすべてを解像度につぎ込む、並列 DNS コードの開発を行った。

3.1 NS 方程式の計算アルゴリズム

非線形項を 3 次元 FFT を用いたスペクトル法により計算した場合、計算時間の 90% 以上がこの FFT によって消費される。したがって、この部分をいかに高効率化させるかが大規模計算を行う上で重要となる。まず、この FFT をベクトル並列計算機的能力を最大限に引き出せるように、アルゴリズムの見直しを行った。

3.1.1 HPF から MPI へのコード変換

今まで、HPF (High Performance Fortran) 言語を用いて並列アルゴリズムを構築してきた。これは、逐次計算のプログラムに指示文を付加することで、分散メモリ並列システムで簡単に高い性能を得ることを目指した言語である。並列化の良し悪しは、いかにデータアクセスの局所性を高め、プロセス間通信を減らすかに大きく依存する。この局所性抽出のためのデータ分割をユーザが明示的に指示し、それ以外の仕事をコンパイラに任せる。このように比較的簡単な作業で並列化が可能であるが、各プロセスに対して詳細な指示ができないため、プロセス間で不要な通信が発生する可能性がある。本研究では、このプロセス間のデータ通信を明示的に指定できる MPI(Message-Passing Interface) 言語を用いて実装し、更なる高効率化を図った。

3.1.2 高速フーリエ変換 (FFT) の基底変換

我々は今まで、2 のべき乗の格子点数に対して基数 2 の FFT を用いてきた。つまり、2 要素間のバタフライ演算を採用してきた。一般的に Cooley-Tukey 型 FFT の演算量を削減するための基本的な方法は、多要素間のバタフライ演算を構成し、基数を大きくすることである。アルゴリズムの複雑さが増すという煩わしさが生じるが、より高速なフーリエ変換を行いたいという考えから基数 4 と基数 8 の場合のアルゴリズムを構築した。

ここで、注意すべきことは、大きな基数の FFT の設計では実行できる格子点数が飛び飛びとなり大きな制約を受けることである。基数 4 の場合、格子点数は 4 のべき乗に限定されるため、混合基数 (4 + 2) を採用した。こうすることで、2 のべき乗の格子点数に対しても 4 基底 FFT を扱えるようになり、まず基数 4 を優先的に利用し、

基数 2 は最大 1 回の使用となるように構成することで、高速化を図った。同様にして、基数 8 の場合においても、混合基数 (8 + 4 + 2) を採用し、まず基数 8 を優先的に利用し、基数 4 と基数 2 は最大 1 回の使用となるように構成することで、高速化を図った。

3.2 並列化・ベクトル化技法

ベクトル並列計算機では、ノード間 (分散メモリ) 並列化、ノード内 (共有メモリ) 並列化、プロセス内並列化・ベクトル化の 3 階層の並列化が必要である。この並列化・ベクトル化をどのようにして促進させたかを以下に述べる。

3.2.1 プロセス間の並列化

3 次元 FFT では、 z 軸方向のバタフライ演算を行う場合、毎回ノード間をまたがる計算を行うことになり、通信時間が膨大にかかってしまい都合が悪い。これを避けるため、 z 軸方向に 1 次元 FFT を適用する部分と y 軸方向に 1 次元 FFT を適用する部分の間でデータ転置を行う。本研究では、MPI ライブラリ `MPLALLTOALLV` を用いてデータ転置を行った。このライブラリは、送信するプロセスと受信するプロセスの対ごとに、送信するデータ量と、そのデータのバッファ中の位置を個別に指定して、全ての MPI プロセス間同士でデータを交換する。このプロセス間同士のグローバル転置が完了したあと、プロセス内でローカル転置を行うことで全データの転置を完了する。

データ転置では、MPI の集合通信ライブラリ `MPLALLTOALLV` を用いて実装していたが、プロセスごとに指定する 1 対 1 通信を用いて実装した方が速くなるかもしれない。しかし、これは計算機依存性が非常に高いため、実際に実装してやってみないことにはわからないことである。

3.2.2 プロセス内の並列化・ベクトル化

プロセス内の並列化とは、1 つの仕事をいくつかの小さな仕事に分割し、それを複数のマイクロタスクで並列に実行することを意味する。3 次元 FFT では、常に最外側のループに対して並列化 (z 軸方向を並列化軸) を行った。しかし、コンパイラはそのループが並列化可能であることを認識できなかったため、強制的に並列化を行わせる指示行 (`!dir parallel do`) を付加した。この場合、コンパイラはデータの依存関係などのチェックを行わずに並列化をするので、並列化したときの動作の妥当性については常に気を配る必要がある。

ベクトル化とは、規則的に並んだ複数個の配列データを一度に演算する高速なベクトル命令を使って処理を行うことである。3 次元 FFT では、常に最内側のループに対してベクトル化 (x 軸方向をベクトル化軸) を行った。

3.3 バンクコンフリクト時間の削減

SX-7/160M5 (NEC 製) では、一つの配列を 16384 (2 の 14 乗の倍数) 要素飛びにアクセスすると、バンクコンフリクトが最大に発生する。一般的にこれを防ぐためには、配列宣言の 1 次元目の大きさが奇数となるように変更するか、ループを入れ替えて配列のアクセスが連続するように変更することで回避できる。この方法を用いてバンクコンフリクト時間の削減を試みたが、劇的な成果が得られなかった。

そこで、以下の 2 つの方法をとることで、この無駄なバンクコンフリクト時間を削減した。

1. 複素数配列を実部と虚部に分けて、2 つの実数配列に置換

今までアルゴリズムの理解のしやすさから速度場やスカラー場に対して複素数配列を採用してきた。ここでは、プログラムが煩雑になるが、実部と虚部を別々の実数配列を用いて置き換えた。複素数配列を用いるとバンクコンフリクトが頻繁に発生するという現象は、計算機依存性が高く構造上の問題であると考えられる。

2. 配列宣言の全次元の大きさが奇数となるように変更

配列宣言の 1 次元目の大きさを奇数とする場合に比べて、このバンクコンフリクト時間を約 8 割削減することができた。しかし、この場合メモリを余分に確保するので注意が必要である。

4 エネルギー及びスカラー分散の輸送流束

4.1 局所・非局所的輸送

エネルギー及びスカラー分散輸送はスカラー乱流場の発展における主な物理過程である。この輸送過程は、NS方程式 (2.1) 及び移流拡散方程式 (2.2) の非線形項から生じる3つの波数成分間の相互作用として記述される。この輸送過程における局所的輸送と非局所的輸送の概念はあまり正確ではない。一般的には、おおよそスケール比が2倍以内の線形サイズをもったスケール間の輸送を局所的輸送、2倍以上大きさが異なるスケール間の輸送を非局所的輸送という。

4.2 計算方法

エネルギー及びスカラー分散の輸送における局所・非局所性について調べるための具体的な手続きを述べていく。両者の手続きはそれほど大差がないので、以下ではエネルギー輸送に着目して述べる。

エネルギー輸送関数 T は式 (2.5) で与えられ、3つの波数ベクトル \mathbf{k} , \mathbf{p} , \mathbf{q} による相互作用で表現されることがわかる。これをある波数 k が与えられたとき、3つの波数が成す $\mathbf{k} + \mathbf{p} + \mathbf{q} = 0$ の三角形について、その各辺を $k = |\mathbf{k}|$, $p = |\mathbf{p}|$, $q = |\mathbf{q}|$ として、三角形の成立条件を満たす領域 Δ_k にわたって積分を施すと

$$\begin{aligned} T(k, t) &= \iint_{\Delta_k} 8\pi^2 k p q S(k|p, q) dp dq \\ &\equiv \iint_{\Delta_k} T(k|p, q) dp dq \end{aligned} \quad (4.15)$$

となる。ここで、どのような波数の組み合わせが流束関数 Π への寄与が大きいかを調べるために、3つの波数 (k, p, q) のうち、最も短いものに対する最も長いものの比

$$\alpha \equiv \frac{\text{Max}(k, p, q)}{\text{Min}(k, p, q)} \quad (4.16)$$

を導入する。 α が1に近いときはほぼ同じスケールの局所的相互作用を、1より十分大きいときは大きなスケールと小さなスケールの非局所的相互作用を表す。この α を用いて、エネルギー輸送流束の式 (2.8) を次のように書き換える。

$$\begin{aligned} \Pi(k, t) &= \int_k^\infty dk' \iint_{\Delta_{k'}} T(k'|p, q) dp dq \\ &= \int_1^\infty \frac{d\alpha}{\alpha} \int_k^\infty dk' \int_0^\infty dp \int_{|p-k'|}^{p+k'} dq T(k'|p, q, \alpha) \\ &= \int_1^\infty W(k, \alpha) \frac{d\alpha}{\alpha}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

$$W(k, \alpha) = \int_k^\infty dk' \int_0^\infty dp \int_{|p-k'|}^{p+k'} dq T(k'|p, q, \alpha). \quad (4.18)$$

この $W(k, \alpha)$ の関数は、波数 k を横切って輸送される全エネルギーのうち、パラメータ α が区間 $[\alpha, \alpha + d\alpha]$ を満たす相互作用からの寄与を表す。したがって、この関数 $W(k, \alpha)$ がどの α に対してピークをもつかをみることで、エネルギー輸送の局所性と非局所性を判断することができる。

これらの量を解析するために、本研究で用いた計算方法を述べる。ここで対象とする主な量は、ある与えられたモード k と、それを一つの脚として三角形を形成するすべてのモードのペア \mathbf{p} と $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{p}$ との間のエネルギー交換である。モード \mathbf{p} と \mathbf{q} をそれぞれ波数バンド n で区分し、例えば、波数 $p = |\mathbf{p}|$ に対して次のように定める。

$$\left[\sqrt{s_{n-1}s_n} \right] + \frac{1}{2}\Delta k \leq p \leq \left[\sqrt{s_n s_{n+1}} \right] + \frac{1}{2}\Delta k. \quad (4.19)$$

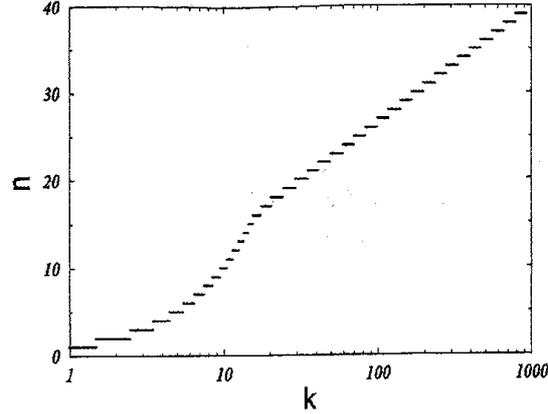


図 1: 波数バンド

x 軸は波数 k , y 軸は波数バンドの番号 i である. 赤の線が示す領域が各 i に対する波数バンドである.

ここで, $\Delta k = 1$, $[x]$ はガウス記号で x の整数部分を表す. 低波数側を線形的に, 高波数側を指数的に区切るようにし, その境目 ($n = 16$) が滑らかな曲線につながるように補正した.

$$s_n = n \cdot w(16 - n) + 2^{n/4} \cdot w(n - 16),$$

$$w(x) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \frac{x}{2} \right).$$

この波数バンドを図 1 に示す. p と q をそれぞれの波数バンドに区切ることは, 式 (4.15) の波数 k でのエネルギー輸送に寄与するすべての三角形から, ある範囲にある特定の三角形を選び出すことと等価である.

波数 p に対して, その波数バンド n の速度場を抽出したい場合, 次のようにフィルターをかけることで得られる. $\hat{p}_n = [\sqrt{s_{n-1}s_n}] + \frac{1}{2}\Delta k$ とおけば,

$$\mathbf{u}^{p_n}(\mathbf{p}, t) \equiv \mathbf{u}(\mathbf{p}, t) H(p - \hat{p}_n) H(\hat{p}_{n+1} - p). \quad (4.20)$$

ここで, 関数 H はヘビサイト関数である. したがって, 式 (4.15) の関数 $T(k|p, q)$ は, 乱流場では式 (4.21), スカラー場では式 (4.22) と表現できる. m, n は波数バンドの番号を意味する.

$$T(k|p_m, q_n) = 4\pi k^2 P_{ij} \text{Real} \left\{ \left\langle u_i(\mathbf{k}) [\mathbf{u}^{p_m}(\mathbf{p}) \times \boldsymbol{\omega}^{q_n}(\mathbf{q})]_j \right\rangle \right\}, \quad (4.21)$$

$$T_\theta(k|p_m, q_n) = 4\pi k^2 \text{Real} \left[\left\langle i\theta(\mathbf{k}) \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}^{p_m}(\mathbf{p}) \theta^{q_n}(\mathbf{q}) \right\rangle \right]. \quad (4.22)$$

局所・非局所性を表すパラメータ α は, 3つの波数 k, p, q がそれぞれある波数バンドに属していると考えれば

$$\hat{\alpha} = \frac{\text{Max}(k_l, p_m, q_n)}{\text{Min}(k_l, p_m, q_n)} \quad (4.23)$$

と表現できる. この $\hat{\alpha}$ を $\hat{\alpha} = 2^{L/\Delta}$ と置き換えることで, $\hat{\alpha}$ に適当な幅 $L (= [\Delta \log_2 \hat{\alpha}]; []$: ガウス記号) をもたせ, その幅で以って各波数バンド k_l に対して関数 W の値を求める. 式 (4.18) は, 離散化された関数 $T(k_l|p_m, q_n)$ を用いて, 次のように計算することができる.

$$W(k_l, \hat{\alpha}) = \frac{\Delta}{\log 2} \sum_{k'=k_l}^{\infty} \sum_{p_m, q_n} T(k'|p_m, q_n, \hat{\alpha}). \quad (4.24)$$

4.3 計算結果

本研究では, 格子点数 1024^3 で, 低波数側にランダムな外力を励起させることで定常状態を実現したスカラー乱流場の DNS データを用いた. この DNS の詳細は文献 [1] を参照されたい. ここでは, その DNS データを初期

値として読み込んで時間発展を行い、異なる2時刻でのDNSデータを用いて解析を行った。その計算パラメータを表1に、2時刻での各種統計量の平均値を表2に示す。ここで、 $Sc = 1$ としたのは、分子粘性性と分子拡散からのエネルギー及びスカラー分散の乱流輸送への寄与を同等に扱うことで、輸送過程においてその両者がどのように違うのかを明らかにするためである。

表 1: 計算パラメータ

N	k_{max}	ν	Sc	c_f	Forcing range	Δt
1024 ³	482	2.4×10^{-4}	1.0	0.50	$1 \leq k \leq 2$	5.0×10^{-4}

表 2: スカラー乱流場の統計量

velocity	R_λ	E	ε	η	$k_{max}\eta$
	410	1.77	0.52	2.27×10^{-3}	1.09
scalar	Pe_λ	E_θ	χ	η_B	$k_{max}\eta_B$
	410	0.76	0.49	2.27×10^{-3}	1.09

4.3.1 スペクトルと輸送流束

まず、Kolmogorov-Obukhov-Corrsin 変数で規格化されたエネルギー及びスカラー分散スペクトル、 $k^{5/3}\bar{\varepsilon}^{-2/3}E(k)$ と $k^{5/3}\bar{\varepsilon}^{1/3}\bar{\chi}^{-1}E_\theta(k)$ を図2に示す。 $E(k), E_\theta(k)$ は、ともに $k\eta \geq 1$ の領域で増えているが、これは波数領域の有限性からくるもので、それらのスケールでの解像度はあまりよくない。しかしながら、 $k\eta \leq 1$ の領域におけるそれらの統計量は数値誤差を含まない精度の高いものである。図2から、 $0.008 \leq k\eta \leq 0.030$ の範囲で水平な部分を確認することができた。この領域はいわゆる慣性移流領域であると考えられ、その領域での Kolmogorov 定数及び Obukhov-Corrsin 定数を調べてみると、 $C_K \approx 1.61, C_{OC} \approx 0.68$ であった。これは、実験でよく知られた値と非常によく一致している。また、それぞれの散逸率 $\bar{\varepsilon}, \bar{\chi}$ で規格化された輸送流束を図3に示す。理論上、定常状態の慣性移流領域では、 $\Pi(k) = \bar{\varepsilon}, \Pi_\theta = \bar{\chi}$ が成り立つ。実際に図3から、領域 $0.008 \leq k\eta \leq 0.030$ において1に非常に近い値をとっている。このように、ある波数に対して一定となる部分が存在するという事は、乱流場、スカラー場ともに Kolmogorov の平衡状態にあることを意味している。以下では、とりわけこの慣性移流領域 ($0.008 \leq k\eta \leq 0.030$) に焦点を当てて議論していく。

4.3.2 関数 $T(k|p, q), T_\theta(k|p, q)$ の解析

まず、三角形を形成する3つの波数間の相互作用を記述する3成分相互作用関数 $T(k_l|p_m, q_n), T_\theta(k_l|p_m, q_n)$ の解析を行った。慣性移流領域の中央付近 $k\eta \approx 0.018$ に相当する波数バンド k_8 ($7.5 \leq k \leq 8.5$) について計算を行い、 $T(k_8|p_m, q_n), T_\theta(k_8|p_m, q_n)$ の等高線を図4に示す。赤の等高線は正の値、青の等高線は負の値を意味する。ここで、波数 k, p, q には三角形の成立条件を満たす必要があるが、それにもかかわらずその条件の境界を超えて表示されているのは、波数バンド幅を指数的に選んでいることが原因である。しかし、それは定性的結果に大きな影響をもたらすほどではない。図4の両者を比較して、お互いに目に見えて異なる性質は見当たらない。 $T(k_l|p_m, q_n), T_\theta(k_l|p_m, q_n)$ は、おおよそ $p \leq k$ かつ $q \leq k$ を満たすところでは正の値をとり、それ以外の領域では負の値をとった。つまり、1辺が波数 k で構成された正三角形を考え、その3辺に囲まれた領域内で三角形を成す p, q をもつ場合、波数 k において p, q からエネルギー（スカラー分散）をもらうことを意味する。また、その囲まれた領域を超えて三角形を成す p, q をもつ場合、波数 k において p, q にエネルギー（スカラー分散）を受け渡すことを意味する。したがって、小さい波数から大きい波数へのエネルギー（スカラー分散）輸送を表していることになる。特に、 $T(k_l|p_m, q_n), T_\theta(k_l|p_m, q_n)$ は $p \approx k, q \ll k$ と $q \approx k, p \ll k$ のところで正負のピークを持ち、非局所的相互作用が大きいことがわかった。これは、エネルギーやスカラー分散がエネルギー保有領域に

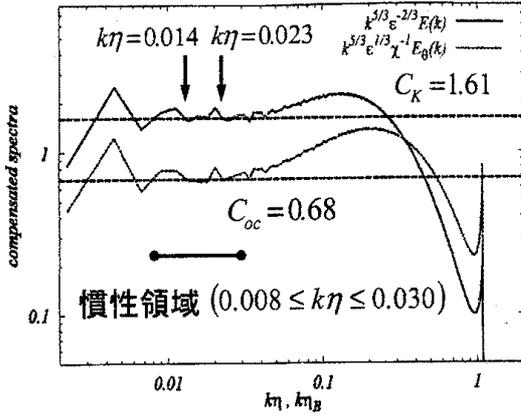


図 2: 規格化されたスペクトル

Kolmogorov-Obukhov-Corrsin 変数で規格化されたエネルギー及びスカラー分散スペクトル, $k^{5/3} \epsilon^{-2/3} E(k)$ と $k^{5/3} \epsilon^{1/3} \chi^{-1} E_\theta(k)$.

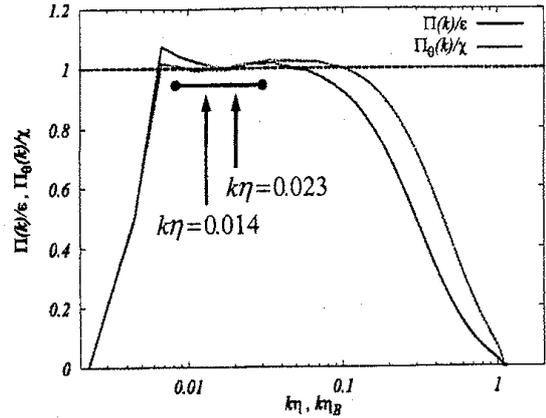


図 3: 規格化された輸送流束

エネルギー輸送流束 $\Pi(k)$ 及びスカラー分散輸送流束 $\Pi_\theta(k)$ をそれぞれ散逸率 $\bar{\epsilon}$ と $\bar{\chi}$ で規格化した輸送流束。

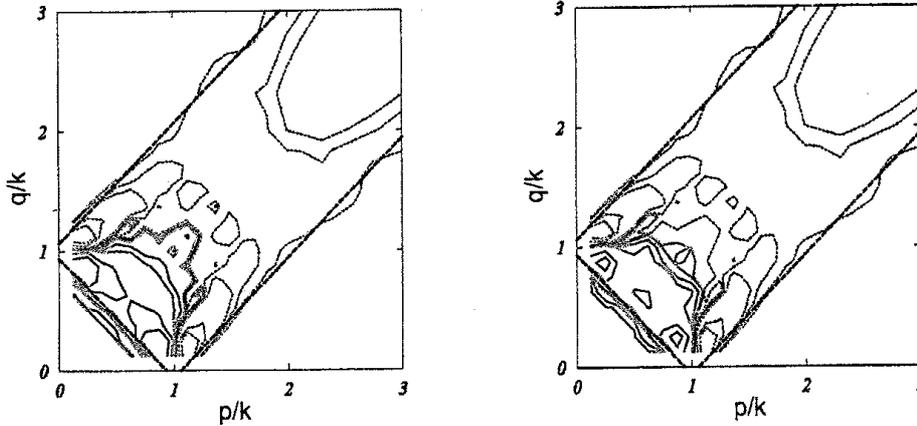


図 4: $T(k|p, q), T_\theta(k|p, q)$ の等高線

慣性移流領域の中央付近 $k\eta \approx 0.018$ に相当する波数バンド k_8 ($7.5 \leq k \leq 8.5$) における $T(k_8|p_m, q_n), T_\theta(k_8|p_m, q_n)$ の等高線。赤の線は正、青の線は負の値を表す。

ある小さい波数を持った非局所的相互作用の運動によって、同スケールの渦同士間で (k と p あるいは k と q の間で) 局所的に輸送されることを示唆している。

4.4 関数 $W(k, \alpha), W_\theta(k, \alpha)$ の解析

次に、慣性移流領域にある 2 点 $k\eta = 0.014$ ($k_6 : 5.5 \leq k \leq 6.5$) と $k\eta = 0.023$ ($k_{10} : 9.5 \leq k \leq 10.5$) において $W(k_l, \alpha), W_\theta(k_l, \alpha)$ を計算した。それぞれの計算結果を図 5, 6 に示す。図 5 (左図) において、 $\alpha = 2$ の近傍でピークを持ち、 α が大きくなるにつれて減衰していることがわかる。しかし、図 6 (左図) では際立ったピークは見られないが、 α が小さいところでは大きな値を示し、 α が大きくなるにつれて減衰しているという性質は変わらない。また、両者とも α が小さいところでは、 $W(\alpha)$ の方が $W_\theta(\alpha)$ より大きい値を示していることがわかる。 α が大きいところではどうであるかを調べるために、同じグラフを対数でプロットしたものをそれぞれ図 5, 6 の右図に示す。両者とも α が大きいところでは、 $W(\alpha)$ の方が $W_\theta(\alpha)$ より減衰率が大きいことがわかる。

以上の結果から、エネルギー及びスカラー分散の輸送は局所的であるが、両者を比較した場合、スカラー分散の輸送の方が相対的に非局所性が強いことがわかる。また、 α が 1 桁上がると $W(\alpha), W_\theta(\alpha)$ は非常に小さい。つまり、1 桁大きさが異なるスケール間の輸送は小さいことがわかる。

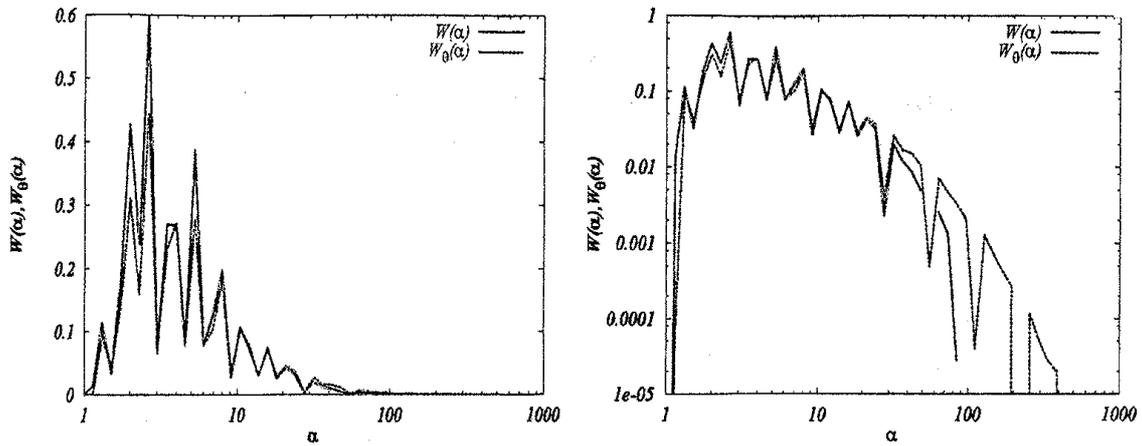


図 5: $W(k_6, \hat{\alpha}), W_\theta(k_6, \hat{\alpha})$

$k\eta = 0.014$ ($k_6 : 5.5 \leq k \leq 6.5$) における $W(k_6, \hat{\alpha}), W_\theta(k_6, \hat{\alpha})$ の片対数プロット (左図) 及び両対数プロット (右図).

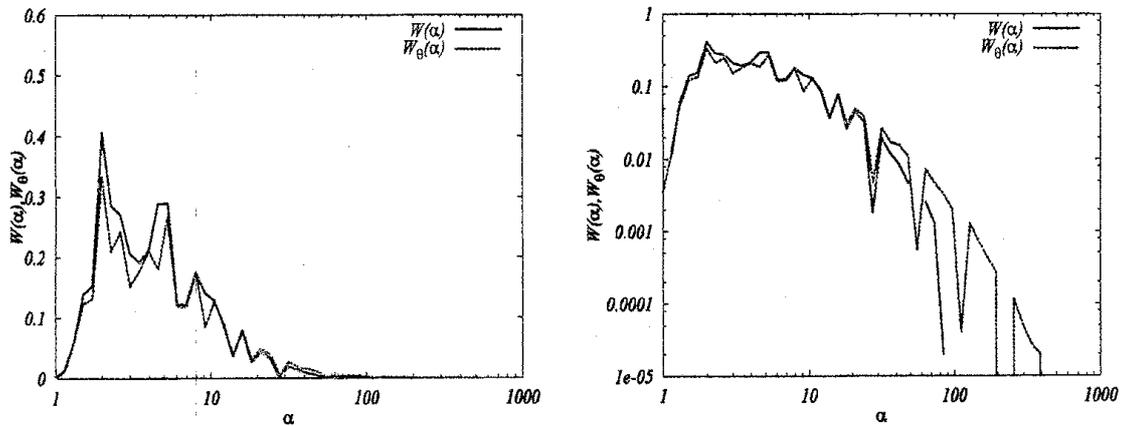


図 6: $W(k_{10}, \hat{\alpha}), W_\theta(k_{10}, \hat{\alpha})$ の片対数プロット

$k\eta = 0.023$ ($k_{10} : 9.5 \leq k \leq 10.5$) における $W(k_{10}, \hat{\alpha}), W_\theta(k_{10}, \hat{\alpha})$ の片対数プロット (左図) 及び両対数プロット (右図).

5 まとめ

本研究は、大きく 2 つの目的に分けることができる。以下に、それぞれどのような結論を得たかをまとめる。

目的 1 : 計算機のもちうる能力と資源を最大限に生かした並列コードを開発し、大規模 DNS を実行すること

- 基数 4, 8 の FFT を採用することで、バタフライ演算の高速化が可能である。
- プロセス間・内の並列化は z 軸方向を並列化軸に、プロセス内のベクトル化は x 軸方向をベクトル化軸にすることが賢明である。
- データ通信の高速化は、計算機のアーキテクチャに依存するところが多く、実際に実装して確認するしか方法はなく、試行錯誤的な面が強い。
- 集合通信ライブラリを用いる場合、プロセス数とマイクロタスク数の設定をうまく制御すれば通信時間を大幅に削減できる。

MPI 通信の部分を除けば、個々の計算プロセスの実行演算においてよい性能 (並列化・ベクトル化の高効率) を引き出すことができた。しかし、3次元 FFT のデータ転置においては抜本的な改善が必要である。

目的 2 : エネルギー及びスカラー分散の輸送流束における局所性と非局所性を DNS を用いて解析すること

- エネルギー及びスカラー分散の輸送流束はともに局所的である。

- 関数 $T(k|p, q)$, $T_\theta(k|p, q)$ の解析から, 1つの小さい波数 (エネルギー保有領域に存在) とそれよりずっと大きい2つの波数から成り立つ3波相互作用, 即ち非局所的相互作用が大きな振幅を持つ.
- スカラー分散の輸送流束は, エネルギーのそれと比較して相対的に非局所性が強い.
- 速度場とスカラー場の違いは圧力項の有無であり, その違いが狭い意味での局所性と非局所性という形で差異が出た.

パッシブスカラー場の方程式には, 圧力に相当する項がなく, しかもパッシブスカラーは速度場の変形を受けるため, 過去の履歴を長く保持してしまう. このことから, もとのスケールより小さなスケールとの間に相関性を持ち, 非局所性という結果が得られたと考えられる.

本研究を行うにあたり, 地球シミュレータセンター及び核融合科学研究所の大型シミュレーション研究より多大なご支援をいただきました. ここに記して厚く御礼申し上げます.

参考文献

- [1] T.Watanabe and T.Gotoh, "Statistics of Passive Scalar in Homogenous Turbulence," *New J. Phys. Fluids*. <http://www.iop.org/EJ/abstract/1367-2630/6/1/E03/> (2004).
- [2] S.B.Pope, "Turbulent Flows", Cambridge University Press, Cambridge (2000).
- [3] J.A.Domaradzki and R.S.Rogallo, "Local energy transfer and nonlocal interactions in homogeneous, isotropic turbulence," *Phys. Fluids A2* 413 (1990).
- [4] F.Waleffe, "The nature of triad interactions in homogenous turbulence," *Phys. Fluids A4* 350 (1992).
- [5] T.Gotoh, D.Fukayama and T.Nakano, "Velocity field statistics in homogeneous steady turbulence obtained using a high-resolution direct numerical simulation," *Phys. Fluids* 14, 3 (2001).
- [6] Y.Kaneda and T.Ishihara, "Energy dissipation rate and energy spectrum in high resolution direct numerical simulations of turbulence in a periodic box," *Phys. Fluids*. 15, 2 (2003).
- [7] 後藤俊幸, "エネルギーとスカラー分散の流束関数の統計性について," (2004).
- [8] "パリティ", vol.17, 丸善 (2002).
- [9] "パリティ", vol.18, 丸善 (2003).
- [10] 後藤俊幸, "乱流理論の基礎," 朝倉書店 (1998).
- [11] 藤原仁志/荒川忠一, "乱流入門," 東海大学出版社 (1998).
- [12] 木田重雄/柳瀬眞一郎, "乱流力学," 朝倉書店 (1999).
- [13] 中林功一/鬼頭修己, "大学院のための流体力学," コロナ社 (2002).
- [14] P. パチェコ/秋葉博, "MPI 並列プログラミング," 培風館 (2001).
- [15] 湯浅 太一/中田 登志之/安村 通晃, "はじめての並列プログラミング," 共立出版 (1999).