

様式C-19

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年4月16日現在

機関番号：13903

研究種目：基盤研究（B）

研究期間：2009年～2011年

課題番号：21360082

研究課題名（和文）圧縮および非圧縮流体乱流における異常輸送の大規模数値計算による解明

研究課題名（英文）Analysis of anomalous transport in compressible and incompressible turbulence by large scale numerical simulation

研究代表者

後藤 俊幸 (TOSHIYUKI GOTOH)

名古屋工業大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：70162154

研究成果の概要（和文）：乱流とそれにより輸送されるスカラーの異常な揺らぎを解析するためには、スペクトル法と同等精度で計算効率のよいハイブリッド計算手法が新たに開発され解析に応用された。スカラー揺らぎの構造関数のスケーリング指数の非普遍性が新たに見出された。空間次元を3, 4, 5次元に拡張して乱流統計法則がどのように影響を受けるかを解析し、局所的な乱流運動は次元の増加とともに1方向への圧縮性運動が卓越することが見出された。

研究成果の概要（英文）：A new efficient and accurate numerical method for computation of passive scalar transport in turbulence was developed for the massive parallel machine and applied to the analysis of the anomalous fluctuations of the scalar. It is found that the scaling exponents of the scalar structure functions are not universal. Effects of the spatial dimension on turbulence was also studied. When the dimension is increased as 3, 4, and 5, the compressible motion in one direction becomes dominant over the motion in other directions.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合 計
2009年度	6,000,000	1,800,000	7,800,000
2010年度	3,900,000	1,170,000	5,070,000
2011年度	4,000,000	1,200,000	5,200,000
年度	0	0	0
年度	0	0	0
総 計	13,900,000	4,170,000	18,070,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・流体工学

キーワード：乱流，スカラー異常輸送，大規模数値計算

1. 研究開始当初の背景

乱流による（化学）物質、熱などのスカラ一場の輸送は、物質混合や化学反応の生起や継続、エネルギーの効率的輸送など工学上、環境問題などにおいて極めて重要である。通常、乱流中のスカラ一量はシャープな界面を隔てて分布していることが多く、混合や化学反応はスカラ一場の濃度勾配の大きな面（以下、界面と略記）を通して行われるが、界

面は乱流による移動、変形を受けて時々刻々変化する。界面が流れ場のどのような位置にどのくらいの頻度で生成されるか、さらに界面の近傍にどれほどの物質が存在するかによってその反応効率は影響を受ける。これまでの研究から、スカラ一散逸の大きさゆらぎをもつ領域はポテトチップスのように薄い形状しており、乱流によって輸送されるスカラ一場の勾配には強いゆらぎが存在し空間

的・時間的に局在する間欠性を示すことが知られている。この面の長軸方向には乱流場の巨視的な性質が、境界面に垂直な方向にはスカラー場の分子拡散が重要な役割を演じている。このことから、乱流スカラー輸送においては、巨視的スケールと微視的スケールが乱流という媒体を通して密接に関連していることが推察される。同時に、このことは動力学にスケールの分離がないことを意味し、大きなスケールにのみ着目し小さなスケールをモデル化することの難しさと直結している。一切のモデル化を導入せず、全てのスケールを解像する直接数値シミュレーション (DNS Direct Numerical Simulation) が必要となるのはこの理由による。

スカラー場を含む乱流理論で扱うのは、多くの場合、極めて高いレイノルズ数における巨視的な条件の詳細によらない乱流の普遍的統計法則である。特に、スカラー差分の ρ 次モーメントのスケーリング指数 ζ_ρ ($\log \langle |\theta(x+r) - \theta(x)|^\rho \rangle \propto \zeta_\rho \log r$) については多くの研究がなされてきた。しかし、最近の DNS においてもレイノルズ数(ペクレ数)がいまだ十分高くないため、 ζ_ρ は十分な精度を持って決定されておらず、普遍的であるかどうか定かではない。速度場におけるスケーリング指数の確かさと比べるとこの違いは際立っている。このような状況から、高レイノルズ数乱流スカラー輸送の DNS の実行が強く求められてきている。

乱流のレイノルズ数が大きくなるほど渦半径や界面の厚さは小さくなるから、乱流中の最小の渦およびスカラー散逸界面までを正しく解像できる極めて高解像度の DNS を行うことが必要不可欠である。これまで筆者らは、大規模並列計算機を駆使して一様乱流スカラー場の DNS を実行し乱流速度場とスカラー場の様々な解析を行ってきた。現在、我々の乱流スカラー場の DNS データはその到達レイノルズ数および質、量において世界標準となっており、本研究への期待は国内外を問わず非常に高い。この期待に応えるためにも、乱流スカラー場のより信頼できるデータの構築にむけて、より高いレイノルズ数の DNS を大規模並列計算機で高効率に実行できる数値計算法とプログラムの開発が必要である。開発に当たっては、従来から用いられている空間精度に優れた FFT を改良することがまず考えられる。しかし、メニーコアを用いるハイパフォーマンス計算機では FFT の通信負荷が高いため、空間精度を損なうことなくこれよりも効率的な計算手法を見出す必要性が求められている。

2. 研究の目的

上に述べた状況を踏まえ、本研究では、工学や環境問題で重要となる非圧縮及び圧縮性流体乱流により輸送される物質やエネルギーなどのスカラー場について、その特異なゆらぎの時空間における構造(特に界面形状)とスペクトル、輸送係数、確率分布との関連を明らかにする。このため、ペタフロップス級のハイパフォーマンスコンピュータによる大規模直接数値計算のための高精度な計算手法と高効率なプログラム開発を行うこと、そしてこれを用いた乱流スカラー輸送現象を解析すること、乱流とスカラー輸送に関する理論を構築することを目的とする。

3. 研究の方法

計画は 3 年で大きく分けて 2 つの部分からなる。第 1 の部分は、非圧縮流体および圧縮性流体乱流により輸送されるスカラー場(流体運動には影響を及ぼさないパッシブスカラーを扱う)の超高解像度での大規模 DNS のための専用プログラムを開発し実行することである。第 2 の部分は、大規模 DNS のより得られた速度場とスカラー場の動力学的性質、統計的性質、場の特異構造(スカラーにおいては界面、速度場においては渦管、渦層、よどみ点)の幾何学を解析し、相互の関連性を読み取りながら乱流スカラー輸送理論を構築することである。非圧縮性流体乱流とスカラー場には 3 次元 FFT を用いたスペクトル法によるコードの改良、圧縮性流体乱流中のスカラー場については高次精度差分解法を用いたコード開発を行う。いずれのコードもハイパフォーマンスコンピュータに適した形で開発する。具体的には以下のように行う。

(1) 非圧縮コードの改良

これまで用いてきたパッシブスカラーを含む非圧縮性流体乱流コードで最も計算負荷の高い 3 次元 FFT を改良する。これまで筆者と研究分担者らが培ってきた並列計算の技術を最大限駆使して、新世代のスペコン(名古屋大学の次期計算機等)の特性に十分配慮したコーディングを行ことが数値計算上の重要な作業となる。通信効率の改善、2 基底から 4 基底への変更、行列転置の効率化が主な改良点となる。

(2) 圧縮コードの開発

圧縮性流体およびスカラー輸送コードの開発については、高次差分近似等のスキームを導入し、スペクトル法の結果とも比較しな

がらコード開発を行う。これはまず、妥当な高精度差分スキーム等の検討からはじめ、プロトタイプ、並列版、そして大規模並列機に向けてのチューニングを必要とする。

(3) d 次元乱流

乱流ゆらぎを理解するために有効なやり方の一つは、基礎方程式に課せられている制限を変化させることである。これには、非圧縮条件を緩める、空間次元を変化させる、外力の仕方を変化させるなど様々なやり方があり、本研究では最初の2つを採用する。空間次元の変更のアイディアは、相転移点近傍での揺らぎの性質が $d>4$ では正規分布になり平均場近似が有効であったという統計力学での経験に学んでいる。実際、非圧縮流体乱流によるスカラー輸送におけるゆらぎの統計的性質は空間次元 d に大きな影響を受ける。中野と筆者はこれまで、2, 3, 4 次元における非圧縮乱流の統計的性質、散逸構造の幾何学(フラクタル次元など)を解析してきた。得られた結果は、空間次元が高くなるほど巨視的スケールから粘性スケールへのエネルギー輸送が活発になりエネルギー散逸が増大するというものであった。また、圧力の役割が次元とともに小さくなりかつ対流項のうち縦微分が強調されて、いわば圧縮性のバーガース乱流に近くなることも見出された。これを5次元乱流とそのスカラー輸送に拡張して、空間次元が増えることによりどのように空間内の特異性やエネルギー散逸に影響があるか、流れの構造がどのようにになっているかを解析する。

4. 研究成果

(1) 3 次元 FFT の改良と乱流プログラムへの実装

乱流の基礎研究における DNS ではスペクトル法が中心的役割を果たしてきている。スペクトル法では3次元 FFT が計算の核心である。これまで1次元分割での MPI 並列化された3次元 FFT を使ってきましたが、ペタスケールマシンと相似であると言われる Fujitsu FX1 での実行を考えて抜本的にプログラムの改良を行った。3次元波数空間で方程式を解くためこれを基本領域とした。大規模並列計算機では多数のプロセッサーでの計算となることから、波数空間を2次元分割にしてより性能を引き出す。プリフェッチ機能やソフトウェアパイプライン機能を利用すること、FFT におけるバタフライ演算軸を第2変数の方向にとること、変換基底を4にとること、MPI 集団通信を効率よく行うために、ブロック転置デ

ータを1次元配列として転送するなどの改良を行って高速化を図った。

2次元分割の場合、最適な分割数を見出す必要がある。図1は、あるテスト問題について1回の変換にかかる平均 CPU 時間を各格子点数と $N_{px} \times N_{pz}$ の各組み合わせについて計測したものである。極端な $N_{px} \times N_{pz}$ の組み合わせは効率を下げる事が分かる。また、プロセス数の増加とともに CPU time はほぼ傾き -1 で減少するが(スケーラビリティー)，プロセス数が大きくなると通信のオーバーヘッドによりスケーラビリティーが悪くなることが分かる。3次元 FFT を改良したのと同時に Navier-Stokes ソルバーも2次元分割に合わせて改良した。キャッシュを最大限利用するようにプログラムを改良した結果、全体として格段の高速化が図られた。

これらの改良されたプログラムのテストを兼ねて、これまで我々の持つ空間格子点 $N=2048^3$ 速度場とスカラー場のデータを初期値として空間格子を $N=4096^3$ に増やし、さらに高いレイノルズ数の直接シミュレーションを 512 ノード 2048 MPI 並列により行った。

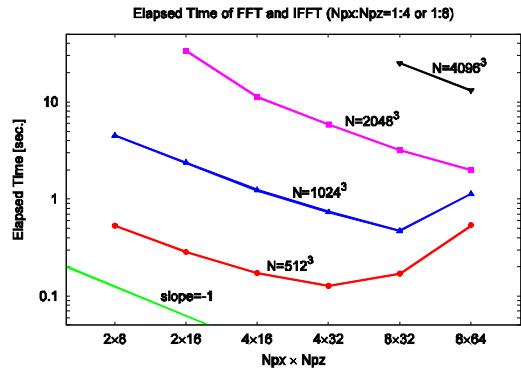


図1 プロセス配置の変化 ($N_{px} \times N_{pz}$) と CPU Time $N_{px}: N_{pz}=1:4$ と $1:8$ 。

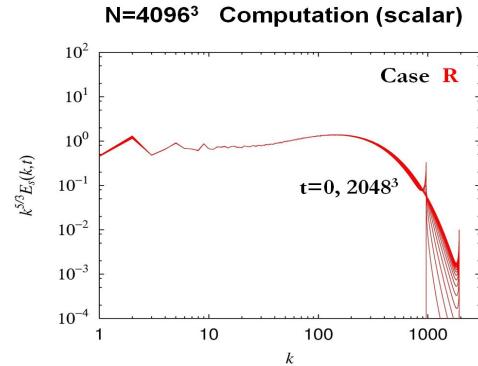


図2 $N=4096^3$ での一様等方乱流によるスカラースペクトルの時間発展。 $t=0$ で 2048^3 の格子点でのデータを与えた。時間経過とともにスペクトルは高波数側に輸送される。

図2はスカラー分散スペクトルの時間発展である。時間経過とともに遠散逸領域へのスペクトルの輸送がみられる。乱流レイノルズ数は $R_\eta=820$ ($Sc=1$, シュミット数) であり、確かに $N=4096^3$ の計算が実行できることが確認された。

(2) スカラー擾らぎの統計法則

すでに述べたように、スカラー差分の構造関数（モーメント）の慣性・移流領域におけるスケーリング指数 ζ_p はこれまで普遍性の観点から大きな興味を持って研究されてきた。上で改良した乱流スカラー輸送プログラムをこの問題に対して応用した。一様な平均スカラー勾配が存在する場合（ケースG）と存在しない場合（ケースR）について空間格子点数 $N=2048^3$ での計算を行った。シュミット数は1, 定常乱流を維持するために流体には低波数領域でランダムな外力を注入する一方、スカラー場のケースRの場合には速度場と同様に低波数領域にランダムなスカラー擾らぎを注入した。ケースGの場合には一様な平均スカラー勾配を通してスカラー擾らぎが系に注入される。勾配に平行な面内におけるスカラー擾らぎを可視化したものである。全体として階段状の構造をしており、おおよそ平坦な領域ではスカラーは平均的によく混合されている。一方、急に変化する領域ではスカラ一散逸が極めて大きい。一般に、乱流中のスカラーの分布には明瞭な界面をもっていることが見て取れる。

一様なスカラー勾配のもとでは、スカラー輸送量の平均値が実用上も重要である。無次元化されたスカラー輸送量であるヌッセルト数 (Nu) がペクレ数 (Pe) とともに線形に ($Nu=APe$) 増大すること、比例係数 A が乱流スペクトル理論による予測値と一致すること

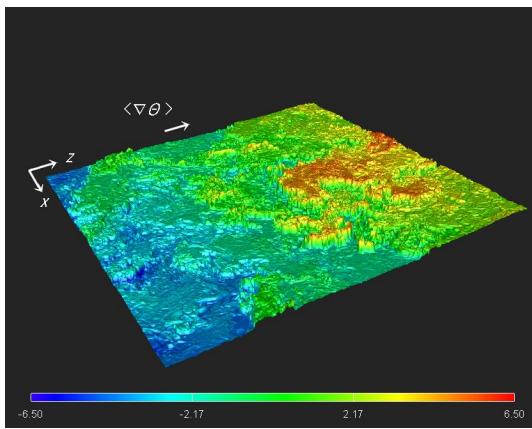


図3 一様な平均スカラー勾配に平行な面内におけるスカラー擾らぎ ($R_\eta=586$, $N=2048^3$)

とが分かった。また、スカラーフラックスの揺らぎの確率密度関数(PDF)が理論的に解析され、それがDNSの結果と一致すること、およびPDFの非対称性の物理的説明がなされた。これらの結果は、Eilat (Israel) における国際会議での招待講演で報告され、大きな反響を得た。

さて、巨視的なスケールで系に注入される2つの異なるスカラー注入方法に対して、スカラー構造関数のスケーリング指数を解析した。ケースGの場合には、擾らぎは軸対称性を持つので、このうち等方成分のみを注意深く抜き出してケースRの場合と比較した（ケースRは等方的）。図4は、6次構造関数の局所スケーリング指数をスケール r の関数としてあらわしたものである。もし、普遍性が成り立つならば、両者は一致するべきである。しかし、2つの曲線は慣性・移流領域でエラーバーを越えて異なる振る舞いをしている。したがってスカラーの高次構造関数のスケーリング指数は普遍的ではないことを強く示唆している。この結果は、これまでのスカラースケーリング指数の普遍性に対する研究者の予想とは大きく異なる。この分野の研究に大きなインパクトを与えるものであり、本研究の大きな成果である。今後のさらなる検証が必要である。

(3) スペクトル・結合コンパクト差分によるハイブリッドコード開発

圧縮乱流および非圧縮乱流の効率的な計算手法を開発する上で重要な点は、①空間微分を正確に求めるか、②圧力に対するポアソン方程式をいかに高精度で高速に解くか、の2点である。前者については、FFTを用いるほかに、結合コンパクト差分法 (CCD) を用いて精度向上を図ることにした。この方法は陰的な解法であるため、並列計算機では非局所的な通信が発生するが、その負荷はFFTよりもはるかに小さく、また空間3次元分割

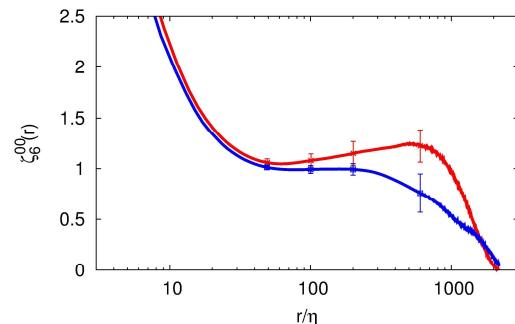


図4 スカラー差分の6次構造関数の局所スケーリング関数の r 依存性。赤はケースR、青線はケースG。普遍性が成り立つなら $r/\eta=100-200$ 近傍で両者が一致する。

	$N_{velocity}$	N_{Scalar}	Cores	計算時間 (step)
Spectral	1024	1024	4096	6.78(s) ↓ -28% ↓ -76%
Hybrid	256			4.85(s) ↓ 1.60(s)

表1 乱流スカラー輸送計算におけるスペクトルコードとハイブリッドコードとの計算時間の比較

も可能なので、スケーラビリティーの観点からも期待が持てた。一方、ポアソン方程式については、3つの方法を考えた。その第1は、非圧縮速度場についてはそのままスペクトル法で解き、スカラー場は CCD を用いる Spectral-CCD ハイブリッドコードを用いる方法、第2の方法は非圧縮乱流の方程式のすべての空間微分に CCD を用いポアソン方程式のみ FFT を用いる方法、第3の方法は、低マッハ数の圧縮性方程式を CCD で解く方法である。第1の手法はほぼ完成しベンチマークテストを行った。その結果、シュミット数が1程度の時には約 25% 高速化できることが分かった。さらにシュミット数が大きい場合には速度場はスカラー場に比して相対的に滑らかとなるため空間格子点を少なくすることができる。そのため、シュミット数が 50 の場合には約 4 倍という驚異的な高速化を達成することができた(表1)。もちろん空間精度はスペクトル法と同等である。スカラー場の各種統計量、空間構造などについてスペクトル法と詳細な比較検討を行ったが、いずれの結果についても満足のいく結果が得られた。これらの結果は、現在、J. Comp. Phys. に投稿中である。

この FFT-CCD を第2のほうにも拡張したところ、試験的な結果ではあるが空間精度はスペクトル法と変わらず、計算時間は約 25% 高速化が図れることが分かった。さらに第3の方法を圧縮性乱流に応用した。マッハ数が 0.05, 0.1, 0.3 の場合に減衰等方乱流を計算し、空間精度、圧縮性の効果、圧縮性の目安である $\text{div } \mathbf{u}$ の空間分布や PDF を解析した。その結果マッハ数が 0.05 では圧縮性の非圧縮運動への影響はごくわずかであることが分かった。 $\text{div } \mathbf{u}$ の PDF は強く非対称になり、Burgers 乱流に似た振る舞いが観測された。しかし、スペクトル法による計算との詳細な比較検討はあまり十分ではない。今後は、高マッハ数での計算を行うことにより、圧縮性乱流の統計法則を解析していく予定である。第2の方法は、研究の最終段階に入つて思いついた方法であるが、非圧縮性乱流によるスカラー輸送の問題においては、スカラーブルの高速化と合わせると全体では約 2 倍の高速化に相当する。したがって、第2の方法は、基本的な乱流の大規模並列数値計算による解析の強力な数値計算法になると期待され、本研究における第2の大きな成果である。

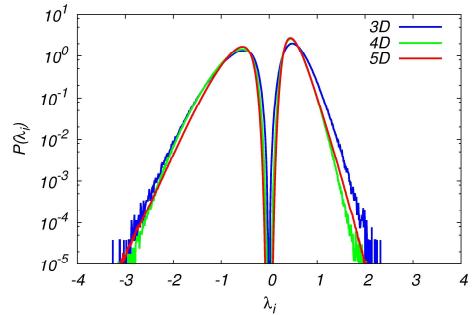


図5 3, 4, 5 次元における非圧縮減衰乱流のストレインテンソルの最小と最大固有値の確率密度関数。負の固有値の PDF は次元が変化しても形が不变。

(4) d 次元乱流における局所乱流構造

空間次元が奇数と偶数では、解の特性が大きく異なることはよく知られている。オイラー方程式の保存量は、3, 4, 5 次元で異なるためこれが乱流統計にも影響を与えることが推測される。5 次元乱流の DNS は世界初の試みであり、これにより 3, 4, 5 次元におけるストレインテンソルの固有値の分布が初めて直接比較できた(図5)。最小固有値の PDF は負の側に長い裾野を持ち、次元が変化しても後者の PDF はほとんどその形を変化させないことが分かった。また、最小固有値が大きな絶対値を持つ領域では他の固有値はすべて正になる傾向があり、このことから、高次元になるほど、乱流は圧縮性を持つ Burgers 乱流に近い特性を持つことが見えてきた。このことは、圧力の分散が次元とともに小さくなるというこれまでの理論結果とも符牒している。したがって、高波数側への乱流エネルギー輸送は、この縦方向の圧縮運動によるものが重要であると示唆された。高次元乱流の DNS による計算は乱流統計理論の研究にとって大きなインパクトを与えるものであり、UCSB の Kavli 理論物理学研究所での招待講演で発表した際には大きな注目を集めた。現在、Phys. Rev. Lett. に投稿中である。

期間中、海外から Biferale 教授(Rome 大), Bordenschatz 教授(MPI Goettingen), Fououx 教授(Tel Aviv 大), Rubinstein 博士(NASA, Langley), Schumacher 教授(Ilmenau 大)など多くの研究者が来訪し、有益な助言と活発な意見交換を行った。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 3 件、すべて査読有)

- ① I. Gotoh and T. Watanabe, Scalar flux in a uniform mean scalar gradient in homogeneous isotropic steady turbulence, Physica D, Vol. 241, pp. 141-148, (2012)

- ② T. Gotoh, T. Watanabe, and Y. Suzuki, Universality and anisotropy in passive scalar fluctuations in turbulence with uniform mean gradient, *J. of Turbulence*, Vol. 12, pp. 1-22. (2011)
- ③ T. Miyazaki, W. Kubo, Y. Shiga, T. Nakano, and T. Gotoh, Classical and quantum turbulence, *Physica D*, Vol. 239, pp. 1359-1366 (2010)
- 〔学会発表〕(計13件)
- ① 中嶋大樹, 畠中祥吾, 三浦英昭, 後藤俊幸, 「低マッハ数の圧縮性乱流と非圧縮性乱流について」, 京都大学数理解析研究所研究集会, 2012年1月12日, 京都大学数理解析研究所
- ② T. Gotoh, Physics of Hydrodynamic Turbulence and Passive Scalar Transfer (招待講演), 6th Korean Astrophysics Workshop on Fundamental Process of Astrophysical Turbulence, 2011年11月6日, Pohang, Korea
- ③ T. Gotoh and T. Watanabe, Universality of passive scalar fluctuations at small scales in homogeneous turbulence (招待講演), Turbulence Colloquium Marseille, 2011年9月29日, CIRM, Marseille
- ④ 畠中祥吾, 渡邊威, 後藤俊幸, 「乱流スカラー輸送の統計的シミュレーション依存性」, 日本物理学会, 2011年9月23日, 富山大学
- ⑤ 和田恭志, 渡邊威, 後藤俊幸, 「乱流により輸送されるパッシブスカラーの確率密度関数について」, 日本物理学会, 2011年9月23日, 富山大学
- ⑥ R. Rubinstein, T. Gotoh and W. Bos, Vertex corrections and 'optimal' subgrid models for homogeneous isotropic turbulence, 13th EUROMECH European Turbulent Conference, 2011年9月15日, Warsaw
- ⑦ T. Gotoh and T. Watanabe, Passive scalar fluctuations in homogeneous turbulence (招待講演), 6th AIAA Theoretical Fluid Mechanics Conference, 2011年6月28日, Honolulu, Hawaii
- ⑧ T. Gotoh, Classical and Quantum turbulence in D-dimensions (招待講演), KITP program : The Nature of Turbulence, 2011年4月15日, KITP, UCSB.
- ⑨ T. Gotoh, Large scale fluctuations and small scale intermittency of passive scalar, Workshop on TURBULENCE AND MIXING (Invited), Nov. 3, 2010, Eilat, Israel
- ⑩ T. Gotoh, Computational Physics of Turbulence, On the occasion of Prof. Steinberg's 70th anniversary (Plenary Lecture), Oct. 28, 2010, Weizmann Institute of Science, Israel
- ⑪ T. Gotoh, On the scalar transfer flux in homogeneous isotropic turbulence (invited), EUROMECH Colloquium 512 ``Small Scale Turbulence and Related Gradient Statistics'', Oct. 26, 2009, Trieste, Italy
- ⑫ T. Gotoh, Energy spectrum and intermittency of d-dimensional turbulence (invited), International Symposium on Turbulence, 2009, Sept. 21, Beijing, China
- 〔図書〕(計2件)
- ① T. Gotoh and P. K. Yeung, Passive scalar transport in turbulence", in Ten Chapters in Turbulence, P. Davidson, Y. Kaneda, and K. R. Sreenivasan Eds., Cambridge Univ. Press, UK (to appear), (45 pages), (2013).
- ② 後藤俊幸, 「4次元乱流」, パリティ (丸善) 第27巻, pp. 19-21 (2012).

6. 研究組織

(1) 研究代表者

後藤 俊幸 (GOTOH TOSHIYUKI)
名古屋工業大学・大学院工学研究科・教授
研究者番号 : 70162154

(2) 研究分担者

渡邊 威 (WATANABE TAKESHI)
名古屋工業大学・大学院工学研究科・准教授
研究者番号 : 30345946

中野 徹 (NAKANO TOHRU)
中央大学・理工学部・教授
研究者番号 : 50055224