



1. 研究の目的と意義

大気・海洋などの地球規模流動現象や、ものづくりをはじめとした社会的関心の高いさまざまな流動現象は、乱れた流れの状態（乱流状態）になっている。したがって、環境問題や工学的諸問題の解決には乱流現象の解明が必要不可欠である。乱流は、強非線形性に起因して大小さまざまな渦が幅広い強度をもって混在し（マルチスケール性）、小さなスケールほど、空間的にまばらに分布し（強間欠性）莫大な自由度を有している。乱流の大スケールは、通常、壁や外力の影響など、系固有の性質が反映したスケールである。乱流研究の挑戦的目標の1つは、自由度が莫大な十分小さいスケールにおいて、さまざまな乱流に共通する普遍的な性質を解明し、その知見を個別の乱流現象に役立てることにある。フーリエ・スペクトル法による高精度な一様乱流の直接数値計算（DNS；基礎方程式をモデル化することなく計算する手法）はその目標に資するもので、画期的な結果が創出されてきた（Ishihara, Gotoh, Kaneda, Annu. Rev. Fluid Mech., 41, 165-180, 2009）。スペクトル法は、与えられた格子点数において最高精度で微分を評価できるものの、流体の基礎方程式（Navier-Stokes (NS) 方程式）の非線形項の計算においてFFTを多く用いるため、大域的な通信に多大な時間が費やされる。したがって、通信量の点では超並列計算機において非効率である。実際これまで「京」コンピュータ上で行われた乱流のDNSは、スペクトル法としては実行性能が高いものの2~3%程度にとどまっている（Pencil型FFT, AlltoAll通信が用いられている）（Ishihara, Morishita, Yokokawa, Uno, Kaneda, Phys. Rev. Fluids, 1(8), 082403, 2016）。今後、日本が世界トップレベルの科学的に卓越した乱流基礎データを構築するためには、富岳に代表される次世代の超並列計算機を可能な限り効率的に利用することが不可欠であり、乱流DNSで用いられうる種々のアルゴリズムの検討・開発を、(i)正確さと(ii)計算コストの点から行うことが早急な課題である。計算コストを削減する方向性として、空間の離散化の効率化、時間スキームの効率化ならびにこれらの混合などが考えられる。

本研究では、コンパクト差分法を利用した流体ソルバーを開発し、スキームの正確さと計算コストの評価を行う。強非線形な乱流（高レイノルズ数乱流）の特徴の1つとして、Extreme Events (EE)が知られている（e.g., Yeung, Zhai, Sreenivasan, Proc. of the National Academy of Sciences, 112(41), 12633-12638, 2015）。これは乱流中のエンストロフィーやエネルギー散逸などの物理量の空間分布に、その平均的な値より数オーダー高くなる領域があることであるが、これはシミュレーションにとって正確に捉えることが最も難しい量の1つであると考えられるため、スキームの正確さを調べる指標として主に用いた。ここではEEとして、エンストロフィーの空間的な最大値を採用し調べたものを報告する。

2. 研究成果

これまでに開発済みであった非圧縮3次元乱流のMPI-OpenMPコードに外力項を加え、小スケールを減衰させない発達した乱流をシミュレートできるようにした。より具体的なスキームの種類としては、空間離散化には6次精度コンパクト差分（CD6）、時間方向には4次、3次、2次精度Runge-Kutta法（RK4, RK3, RK2）、または3次、2次精度Adams-Bashforth法（AB3, AB2）を用いた。外力には、負の粘性に基づく方法を実装した。非圧縮性を満たすために、フラクショナルステップ法を用いた。その際に、圧力に関するポアソン方程式を解く必要があるが、実空間のみの解法で高い非圧縮性を持つ解を得ることは計算コストが非常に高く、ここでは例えば Laizet & Lamballais（J. Comput. Phys. 228(16), 5989-6015., 2009）と同様にFFTを利用した。

負の粘性による外力を有するスペクトル法（SP法）によるコードSP-RK4（Ishihara et al. (2016). Phys. Rev. Fluids, 1(8), 082403.）によって得られた結果と比較し、今回作成した外力有りのCD6-RK4, RK3, RK2, AB3, AB2コードの結果の妥当性を確認した。

高解像度の格子（ $N=2048^3$, $k_{max}\eta\sim 6$ ）でSP-RK4で計算された場を正解とし、その場から計算されるエンストロフィーの空間的な最大値EEを $A(\tau)$ とし、中解像度の格子（ $N=1024^3$, $k_{max}\eta\sim 3$ ）で各スキームによって計算された場により求められEEの値を $B(\tau)$ とし、次の量で定義される累積的な誤差を計算した。 η はKolmogorovスケールであり、最小渦の代表的な長さを表す。 $k_{max}\eta\sim 3, 6$ は、それぞれ $\eta/\Delta x\sim 1, 2$ に対応する。 Δx は格子刻みである。

$$e(t) = \frac{1}{t} \int_0^t \frac{|A(\tau) - B(\tau)|}{A(\tau)} d\tau$$

表は、各スキームにおける $e(t)$ の値を時刻 $t = 2.5, 5$ に対してまとめたものである。まずSP-RK4による結果が、どちらの時刻においても他のスキームと比べて誤差が最も小さいことがわかる。CDとRK4, RK3, RK2, AB3, AB2の組み合わせについては $t = 5$ におけるCD-AB2の誤差が比較的大きいが、それ以外はほとんど違いがないことがわかる。これは、SP法から差分法であるCD6に空間離散化を変更したことによる誤差の影響の方が、時間スキームによる違いが誤差に与える影響より大きいことを示していると考えられる。

表:各スキームによって得られたEEの累積的な誤差 $e(t)$. CFLの定義はYeungら（Yeung, Sreenivasan, Pope, Phys. Rev. Fluids, 3(6), 064603, 2018）と同じものを用いた。

	$t = 2.5$	$t = 5$
SP-RK4 (CFL=0.5)	0.025	0.04
CD-RK4 (CFL=0.25)	0.037	0.10
CD-RK3 (CFL=0.5)	0.037	0.09
CD-RK2 (CFL=0.25)	0.038	0.11
CD-RK2 (CFL=0.5)	0.042	0.11
CD-AB3 (CFL=0.25)	0.037	0.09
CD-AB2 (CFL=0.25)	0.039	0.15

3. まとめと今後

今年度は外力項を含めたコード開発と、表に対応するプロダクトランを行った。申請時には、ここで記載したものより大規模な格子点数を用いてより高レイノルズ数乱流をターゲットとする予定であったが、このプロジェクトが採択された年度から代表者が他大学に異動することになり、時間の制約から計算規模を縮小し研究を行った。本報告書で解析したデータは $R_\lambda\sim 200$ 程度であるが、Extreme Eventsの振る舞いはYeungら（Yeung, Sreenivasan, Pope, Phys. Rev. Fluids, 3(6), 064603, 2018）の高レイノルズ数乱流の振る舞いと定性的によく似ており、本研究で得られた知見は有用であると考えられる。今後の課題としては、エンストロフィーだけでなくその他の物理量（例えば、 n 次構造関数やエネルギー散逸率のExtreme Eventなど）の再現性を調べることならびに、計算コストと統計的再現性の関係をまとめることである。