

乱流の数値シミュレーション

堀内 潔

東京大学 生産技術研究所

スペクトル法の紹介を行なうと共に、同法を用いた平行平板間の乱流場の数値シミュレーション結果を報告する。計算は3次元で行ない、下流および横断方向には周期境界条件を課して離散フーリエ変換を適用し、擬スペクトル法を用いた。平板上では粘着の条件を課し、平板に垂直な方向には、2次の中心差分法もしくはチェビシェフ多項式展開を用いた。格子点数は $64 \times 64 \times 62$ から $128 \times 256 \times 129$ に及び、計算にはスーパー・コンピュータ-HITAC S-810/20とFACOM VP-100を使用した。一部の計算には半導体拡張記憶の利用が必須であり、その利用状況もあわせて報告する。

Numerical Simulation of Turbulence

Kiyosi HORIUTI

Institute of Industrial Science, University of Tokyo
7-22-1 Roppongi, Minato-ku Tokyo 106 Japan

The introduction of Spectral methods and their applications to the numerical simulation of turbulent channel flow are reported. The computations are done in three dimension and all the variables are represented by discrete Fourier expansions in the downstream and spanwise directions, owing to the periodic boundary conditions employed in these two directions, and the Pseudo-Spectral method is applied. No-slip boundary condition is imposed on the walls and either second order central finite difference method or Chebyshev polynomial expansions are used in the normal direction. The employed grid points range from $64 \times 64 \times 62$ to $128 \times 256 \times 129$ and computations are done by super computers such as HITAC S-810/20 or FACOM VP-100. Solid State Disk (SSD) is indispensable in some of the computed cases, and the experience in the use of SSD is also reported.

1. Spectral 法の紹介

例として, 熱伝導方程式を考える。

$$(1.1) \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = K \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} & (0 < x < \pi, \quad t > 0) \\ \text{境界条件} & u(0, t) = u(\pi, t) = 0 \\ \text{初期条件} & u(x, 0) = f(x) \end{cases}$$

この厳密解は, 基底関数を $\sin nx$ として,

$$(1.2) \begin{cases} u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) \sin nx \\ a_n(t) = f_n \exp(-Kn^2 t) \\ f_n = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f(x) \sin nx \, dx \end{cases}$$

で与えられる。これを第 N 項で打ち切った Spectral 近似

$u_N(x, t) = \sum_{n=1}^N a_n(t) \sin nx$ を考える。 a_n の満たす微分方程式は,

$$\frac{da_n}{dt} = -Kn^2 a_n \quad (n = 1, \dots, N)$$

$$\text{初期条件} \quad a_n(0) = f_n \quad (n = 1, \dots, N)$$

となり, $u(x, t)$ と $u_N(x, t)$ の誤差 $E_N = u(x, t) - u_N(x, t)$ は,

$$E_N = \sum_{n=N+1}^{\infty} f_n \exp(-Kn^2 t) \sin nx \quad (1.3)$$

$$= O(\exp(-KN^2 t)) \quad \text{as } N \rightarrow \infty.$$

と評価できる。したがって, N 次精度の差分法の与える誤差が $O(1/N^p)$ であるのに対し, Spectral 法は, N のどんな逆べきよりも速い収束を与える。計算の能率に於いても, (1.1) に関しては, 高速フーリエ変換が使えるため, $O(N \log N)$ の演算量ですむ。

次の例として, passive scalar の convection (Color problem) を考える。これは, 次式で与えられる流れ場中の図 1(a) に示したコーンの剛体運動を取り扱ったものである。(Orszag (1971))

流れ関数 ψ を, $\psi(x, t) = -\frac{1}{2} \Omega x^2$ ($x^2 = x_1^2 + x_2^2$),
 A を color field, V を convection velocity とし,

$$(1.4) \begin{cases} \frac{\partial A}{\partial t} = -V \cdot \nabla A \\ \text{初期条件} : & A(x, 0) = \begin{cases} 1 - \frac{\bar{x}}{r} & (\bar{x} \leq r) \\ 0 & (\bar{x} > r) \end{cases} \\ & \bar{x}^2 = (x_1 - x_0)^2 + x_2^2 \\ & (x_0 \text{ は, コーンの中心の } x_1 \text{ 座標}) \\ \text{境界条件} : & V(x + 2\pi, t) = V(x, t) \\ & A(x + 2\pi, t) = A(x, t) \end{cases}$$

図1 (a) では, $x_0 = 0.5$, $r = 0.25$ としてある. 問題 (1.4) に対し, 時間差分に Adams - Bashforth 形を使い, 空間差分に, (1) 2 次の中心差分, (2) 4 次の中心差分, (3) Spectral 法 を用い, ユーンが一回転して戻ってきたときの解を, 図1 (b), (c), (d) に 各々示す. これより, 差分法を用いた場合には, 1. ユーンの形状がくづれ, 特に, ピークの減衰が著しい. 2. ユーンの後方に, "wake" ができ, 4次精度に上げてても残ることがわかる. したがって, 差分法の欠点は, phase の lag となって現われている. こうした phase の lag は, 解の信頼性を著しく低下させるため好ましくなく, Spectral 法のような高い精度をもった方法が必要となる.

しかしながら, Spectral 法を用いる際には, 次のような困難が伴う.

- (i) nontrivial な境界条件を課さなくてはならない場合がある.
- (ii) 非線形, もしくは, 定数でない係数をもった項の計算が煩雑になる.
- (iii) 複雑な形状に対する適用が難しい.

(i) (1.1) に用いた Sine 展開の場合, ε_N が考えよとの x に対しても一様に, N のどんな逆べきよりも速く収束するのは, $u(x, t)$ が 無限回微分可能で, 次の境界条件 (1.5) を満たす場合である.

$$\frac{\partial^{2n} u(x, t)}{\partial x^{2n}} = 0 \quad \left(\text{at } x=0, \pi; t>0 \right) \quad (1.5)$$

任意の n .

これらの条件が満たされない場合, $\varepsilon_N = O(1/N^p)$ (p : 有限) となり, 差分法に対する優越性は消える. なお, cosine 展開に対する (1.5) に対応する条件は (1.6) である.

$$\frac{\partial^{2n+1} u(x, t)}{\partial x^{2n+1}} = 0 \quad \left(\text{at } x=0, \pi; t>0 \right) \quad (1.6)$$

任意の n .

図2は, 関数 $f(x) = x/\pi$ に対する sine 関数展開の項数を数項とった場合をプロットしたものであるが, (Gottlieb et al. (1977)) $f(x)$ は, 既に $n=0$ で (1.5) を満足しないため, Gibbs 現象と呼ばれる現象が生じている.

しかしながら, 望ましい固有関数展開は, 固有関数の特別な性質によらず, 展開すべき関数のなめらかさのみに収束率がよくなるようなものである. こうした展開の一つは, Chebyshev もしくは Legendre 多項式による展開である. これらの多項式による展開を用いれば, 上記のような Gibbs 現象に伴う困難は除去され, $f(x)$ がなめらかでありさえすれば, 速い収束性を得られる. これは, sine, cosine が non-singular な Sturm-Liouville 問題の解であるのに対し, Chebyshev 多項式等が, singular な Sturm-Liouville 問題の解になっていることによる. 例えば, Chebyshev 多項式 $T_n(x)$ は,

$$\frac{d}{dx} \sqrt{1-x^2} \frac{d\phi_n}{dx} + \frac{\lambda_n}{\sqrt{1-x^2}} \phi_n = 0 \quad (\lambda_n = n^2)$$

の解となっている. 又, $T_n(x)$ は $T_n(\cos \theta) = \cos n\theta$ と表わされる. 関数 $f(x)$ に対する Chebyshev 多項式展開 $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n T_n(x)$

を考えると, $F(\theta) \equiv f(\cos \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos n\theta$ を得,

$F(\theta)$ もしくは $f(x)$ が, p 階の連続微分をもてば, $n^p a_n \rightarrow 0$ (a_n $n \rightarrow \infty$) となるため,

$$\left| f(x) - \sum_{n=0}^N a_n T_n(x) \right| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} |a_n| \quad (|x| \leq 1)$$

において, $F(\theta)$ がなめらか (無限回微分可能) であれば, N のどんな逆べきよりも速い収束が得られる. 見方を変えてみると, この事は, $F(\theta) = f(\cos \theta)$ において, $F^{(2p+1)}(0) = F^{(2p+1)}(\pi) = 0$ が成立するため, (1.6) を満足することになることによる. (p : 整数).

(ii) 次に, 非線形もしくは定数でない係数を持つ項が含まれる場合を考えよう. こうした方程式を

$$\frac{\partial u}{\partial t} = N(u, u) + L u$$

と書くことにし, これに対して, 展開

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^N a_n(t) \psi_n(x)$$

を考える. 今

$$N(\psi_m, \psi_p) = \sum_{n=1}^N c_{nmp}(t) \psi_n(x)$$

$$L(\psi_m) = \sum_{n=1}^N d_{nm}(t) \psi_n(x)$$

とすると,

$$\begin{aligned} \frac{da_n}{dt} &= \sum_{m=1}^N \sum_{p=1}^N c_{nmp}(t) a_m(t) a_p(t) \\ &+ \sum_{m=1}^N d_{nm}(t) a_m(t) \quad (n=1, \dots, N) \end{aligned}$$

を得るが, 右辺第一項の計算に $O(N^3)$ の演算量, 第二項の計算に $O(N^2)$ の演算量が必要になる.

これを解決する方法として, Pseudo Spectral 法がある. これは, 考える x の区間に N 点の選点: $x_1, \dots, x_N$ を与え,

$$u(x_j, t) = \sum_{n=1}^N a_n(t) \psi_n(x_j)$$

として, a_n を決める. さらに, u の微分は次のように与える. 例えば,

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \sum_{n=1}^N a_n(t) \frac{\partial \psi_n}{\partial x}(x_j).$$

さらに, 非線形項 $N(u, u)$, 例えば, $u \frac{\partial u}{\partial x}$ については, 実空間で計算する. もしも $\partial \psi_n / \partial x$ といった項が少ない演算量で計算できれば, 上記の問題は解決される. 例えば Fourier 展開では,

$$\frac{d}{dx} \sum_{n=0}^N a_n e^{inx} = \sum_{n=0}^N i n a_n e^{inx}$$

で極めて容易に計算でき、又、Chebyshev 多項式展開では、

$$\frac{d}{dx} \sum_{n=0}^N a_n T_n(x) = \sum_{n=0}^N b_n T_n(x)$$

と置くと、漸化式

$$\begin{cases} c_{n+1} b_{n+1} - b_{n+1} = 2n a_n & (1 \leq n \leq N) \\ b_n = 0 & (n \geq N) \end{cases} \quad (c_0 = 2, c_n = 1 (n > 0))$$

により、 $O(N)$ で容易に計算できる。

しかしながら、この方法は Aliasing と呼ばれる誤差を持つ。
例えば、Fourier 展開で考えると、

$$\begin{aligned} uu &= \left(\sum_l \tilde{u}_l \exp(ilx) \right) \left(\sum_m \tilde{u}_m \exp(imx) \right) \\ &= \sum_p \tilde{u}_p \exp(ipx) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{において, } \tilde{u}_p &= \sum_{l+m=p} \tilde{u}_l \tilde{u}_m + \sum_{l+m=p+N} \tilde{u}_l \tilde{u}_m \\ &\quad + \sum_{l+m=p-N} \tilde{u}_l \tilde{u}_m \end{aligned}$$

となり、右辺第2, 3項に見られる誤差が生じる。しかし、実際の計算では、momentum や energy の保存形で近似して、Aliasing が不安定性に結びつかないようにしており、Aliasing が問題になる場合は、ほとんど無いように思われる。

さらに、Pseudo-spectral 法は、与えられた格子点数のもと、最高の精度が得られる。たとえば、 $\partial u / \partial x$ に次のような中心差分を適用すると、 $O((\Delta x)^2)$ の精度が得られる。

$$\frac{\partial u}{\partial x} \sim \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \approx u_x + O((\Delta x)^2)$$

同様にして、与えられた格子点 $\{u_{-K}, u_{-K+1}, \dots, u_0, \dots, u_K\}$ の場合、最大限 $O((\Delta x)^{2K})$ の精度しか得られないのに対し、Pseudo-spectral 法は、微係数を exact に与える。

(iii) 複雑な形状に対する適用については、現在、さかんに研究されており、例えば、Orszag (1980), Patera (1984) を参照されたい。さらに、本節全般の内容については、Gottlieb and Orszag (1977) を参照されたい。

2. 流体力学における Spectral 法の利用例。

本節では、1節で紹介した Spectral 法を、流体力学の数値計算——特に乱流における大規模計算——に適用した例を、半導体記憶（拡張記憶）の利用例を交えながら紹介してみたい。

我々をとりまく流体の流れには、層流と呼ばれるなめらかな状態と、乱流とよばれる不規則な運動の2つが見られるが、通常目にする流れは乱流になっている場合が多い。乱流は、流体力学の基礎方程式であるナビエ・ストークス

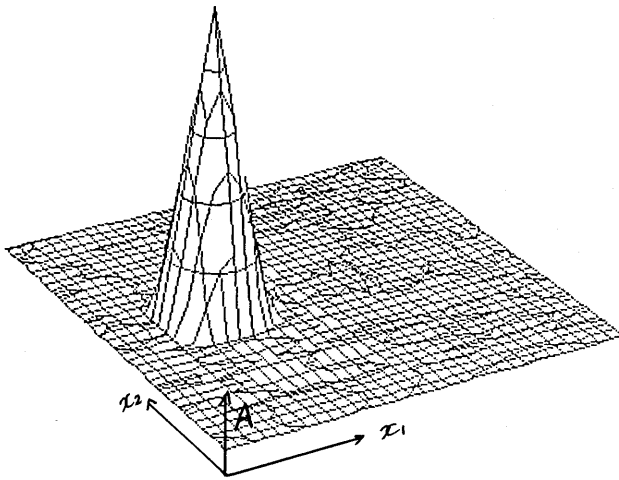


図1 (a)

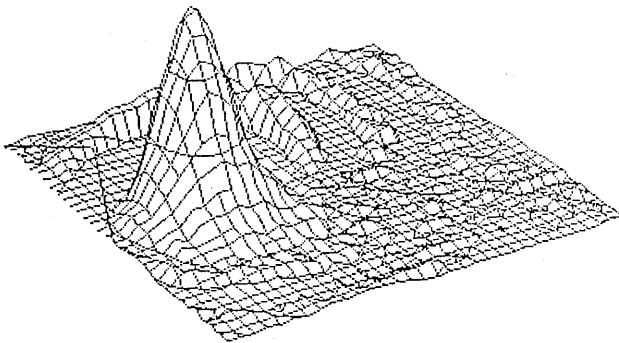


図1 (b)

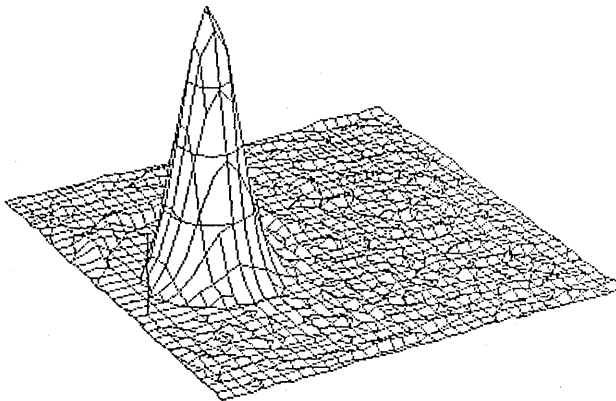


図1 (c)

図1. Color problem (1.4) の数値解 (格子点数は 32×32)
 (a) 初期条件 (b) 2次中心差分
 (c) 4次中心差分 (d) Spectral 法.

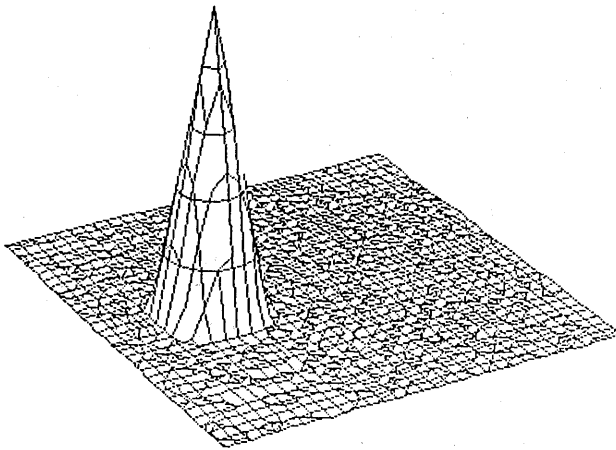
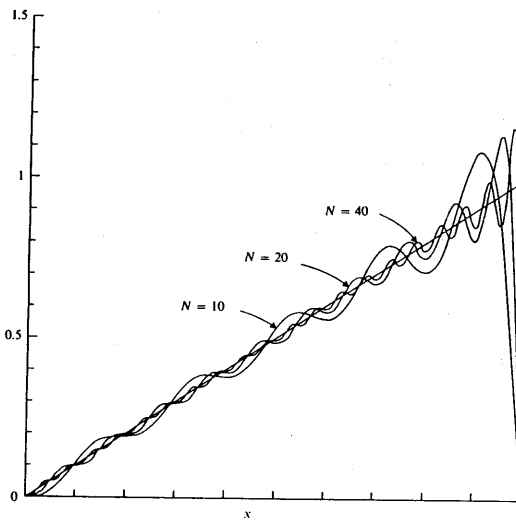


図1 (d)



A plot of the N -term partial sums of the Fourier sine series expansion of the function x/π for $N = 10, 20, 40$. The function x/π is also plotted. Observe the Gibbs phenomenon near $x = \pi$. Also observe that the rate of convergence of the Fourier series is like $1/N$ for x in the interior of the interval $0 < x < \pi$.

図2

$$f(x) = \frac{x}{\pi}$$

の sine 関数展開.

N は 項数 を示す.

(Gottlieb et. al.

(1977) より)

方程式の持つ強い非線形性によって生じ、これが故に、乱流の理論的および実験的解析は困難なものになっている。この事情は、乱流の数値解析にも反映されており、三次元乱流の直接シミュレーション (Full Turbulence Simulation 又は、F.T.S.) に必要な格子点数は、 $Re^{9/4}$ のオーダーにおよぶことが知られている。ここに、 Re はレイノルズ数と呼ばれる流体運動を特徴づける無次元量であるが、一般に、 10^4 以上になるため、 10^9 のオーダーの格子点数が必要になり、現状では不可能なことがあやかりいただけると思う。現在のところ、常識的なメモリー容量、計算および経過時間、さらに計算費用で可能な計算は、せいぜい 128^3 から 256^3 程度である。したがって、今日までに行なわれた F.T.S. は、低いレイノルズ数に限られている。そこで、高レイノルズ数のシミュレーションには、格子以下のスケールのモデル化が必要にな

るが、統計理論が貢献した例として、ラージ・エディ・シミュレーション (Large Eddy Simulation 又は LES) が知られている。(Yoshizawa (1982))。以上のように、乱流の数値解析は、内在的に、大容量、超高速のスーパー・コンピュータを必要としており、ILLIAC IV の出現以後 (Moin and Kim (1982)), Computational Fluid Dynamics と呼ばれる分野が急速に発展している。

本研究では、2枚の平行平板間 (Plane Poiseuille 流) の乱流場を扱った。ここでは、下流および横断方向には、周期境界条件を課すことが妥当であると考えられるので、この二方向には、全ての変数を離散 Fourier 変換し、計算には、1節の Pseudo-Spectral 法を用いた。平板に垂直な方向には、LES では二次の中心差分を、FTS では、1節の Chebyshev 多項式を用いた Pseudo-spectral 法を用いた。

計算方法の詳細は省略するが、(Horiuti (1984) 参照)、主要な演算は次の通りとなる。

LES では、

- ① 2次元の高速 Fourier 変換
- ② Block Tri-diagonal 形連立一次方程式

FTS では、

- ① 2次元の高速 Fourier 変換
- ② Chebyshev 多項式展開の変換
- ③ Scalar Tri-diagonal 形連立一次方程式

計算に用いているコードは、2通り用意しており、一つは主記憶のみ (Type I)、他方は、主記憶、拡張記憶併用 (Type II) のものである。必要なメモリー容量は表1の通りである。

表1 計算に必要なメモリー容量

ケース	シミュレーション法	格子点数	メモリー容量 (MB)		
			Type I	Type II	
			主記憶	主記憶	拡張記憶
1	LES	$64 \times 64 \times 62$	32	16	36
2	LES	$128 \times 256 \times 129$	512	128	256
3	FTS	$64 \times 64 \times 65$	32	16	16
4	FTS	$128 \times 128 \times 129$	256	128	256

いづれのケースでも、Type IIにおける拡張記憶との I/O 回数は1ステップあたり約 50 回である。計算は、主として、東大・大型計算機センターの S-810/20、および、東大生石井の VP-100 を用いて行なっているが、ケース 2 と 4 の Type I は、現状では何れの計算機でも不可能であるため、Type II を主に用いている。ここでは、磁気ディスクのかわりに半導体拡張記憶を用いた事が、特に、経過時間の効率化に大き

く貢献しているのので、その例を表2に示した。

表2 CPU, Elapsed time の比較 (ケース3)

機種	コンパイルオプション - 二次記憶	CPU-Time	Elapsed Time	1 Step あたりの CPU-Time (単位 sec)	ステップ数
S810/20	HAP-ES	16'23"	49'25"	9.0	100
M680H	IAP-DISK	2'22"	24'20"	63.0	2

(ESは半導体拡張記憶を示す)

1) プレの計測も、多重度が3程度でなされた。なお、M680Hの演算速度は、M280Hの、スカラー速度であおむね2.5倍、IAP速度で4倍程度である。表2をもとに、M680H/IAP-磁気ディスクで、100ステップの計算を行った場合のElapsed Timeを試算すると、約1250分となり、S-810/20/HAP-ESの25倍かかることになり、拡張記憶の優位性がわかる。

計算結果の詳細は紙面の通号で省くので、Horiuti (1987) を参照されたい。

参考文献

1. S. A. Orszag (1971) J. Fluid Mech., vol. 49, p. 75
2. D. Gottlieb and S. A. Orszag (1977) Numerical Analysis of Spectral Methods : NSF-CBMS Monograph No. 26, SIAM
3. S. A. Orszag (1980) J. Comp. Phys., vol. 37, p. 70
4. A. T. Patera (1984) J. Comp. Phys., vol. 54, p. 468
5. A. Yoshizawa (1982) Phys. Fluids, vol. 25, p. 1532
6. P. Moin and J. Kim (1982) J. Fluid Mech., vol. 118, p. 341
7. K. Horiuti (1987) in press in J. Comp. Phys.