計算科学フロンティアの展開　その2
−ランダムなスカラー場の多点相関関数に関する固有値問題の数値計算−

水 野 吉 規

Ⅰ．はじめに

計算機能力の向上は，多自由度系の数値シミュレーションをはじめとする，これまで解析的なアプローチが困難であった方程式を数値的に解くことを可能にしてきた。今回はそのような例の一つとして，ランダムなスカラー場の相関関数の方程式（偏微分方程式）の数値計算を紹介する。この試みは，文部科学省21世紀COEプログラム「計算科学フロンティア」[1]において行われたものである。

ここでは，水や空気などの非常に乱れた流れ−乱流−に流される熱や不純物の空間的な分布を考える。温度や不純物の濃度などは一般に空間上に定義されるスカラー場として扱うことができるが，乱流中ではこれらは空間的に非常に複雑な分布をするため，それらの統計的な性質が主な興味の対象となる。図1に人工的につくったランダムなスカラー場の例を示す。

ランダムなスカラー場 $\psi(\boldsymbol{x})$（$\boldsymbol{x}$は位置）の空間分布を決定する統計量として，n点相関関数 $\Psi_n \equiv \langle \psi(\boldsymbol{x}_1)\psi(\boldsymbol{x}_2)\cdots\psi(\boldsymbol{x}_n)\rangle$ がある。ここで，$\langle\rangle$ はアンサンブル平均をあらわす。乱流中のスカラー場 ψ は，その分布が流れに影響を及ぼさない場合には，移流拡散方程式と呼ばれる線形の偏微分方程式に支配されると考えることができるが，この支配方程式から相関関数の閉じた

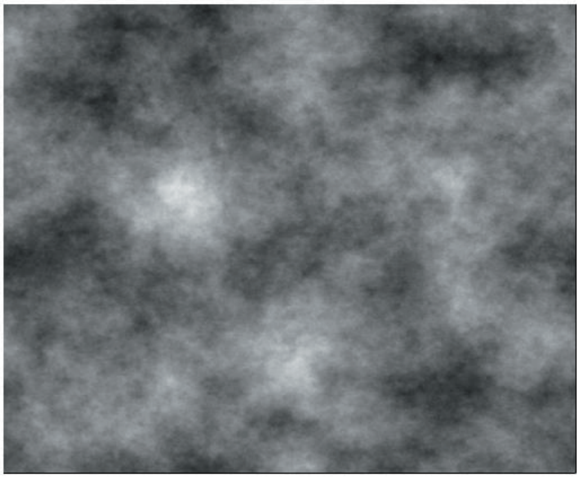

図1　空間変動の大きさがスケールの減少とともにあるベキ則で減少するガウス場の例
乱流中のスカラー場はガウス場とは異なった性質を持っており，それらの違いは
多点相関など高次の統計量にあらわれる。

方程式を得ることはいまだになされておらず，現在のところは，流れの時間変動が白色的であるという仮定によって閉じた方程式が得られることがわかっている[2]。そのようにして得られた２点相関関数の方程式は解析的に解くことが可能であるが，それ以上の相関に対する解析的なアプローチは漸近解析を除いては難しい。

そこでここでは，４点相関関数の方程式を数値的に解く試みを行った。４点相関関数は４つの観測点 $\boldsymbol{x}_1$，$\boldsymbol{x}_2$，$\boldsymbol{x}_3$，$\boldsymbol{x}_4$ の配置に依存する関数であるが，これは空間スケールの変化に対してベキ的に変化すると仮定して，スケールの大きさをあらわす変数 r について $\Psi_4 \equiv \sum_i r^{\lambda_i}\Phi_i$ と展開できるとする。このとき，相関関数の方程式からベキ指数 λ_i を解とする固有値問題

$$\mathcal{L}_\lambda \Phi = 0$$

が導かれる。ここで，$\mathcal{L}_\lambda$ は２階の微分演算子である。この固有値問題を数値的に解く場合に最も大きな障害となるのは，独立変数の数が多いことである。離散化によりこの問題は行列の固有値計算に帰着されるが，変数の数が多いと行列のサイズが極めて大きくなる。したがって，ここで必要となるのは数値計算に適した定式化と高速な固有値計算アルゴリズムである。

Ⅱ．定式化－変数・格子点の削減－

４点相関関数の変数の数は４×（次元数）であるので，３次元の場合は 12，２次元の場合でも８となる。離散化の際に単純に各変数に対する格子点数を 10 としても，全部で必要な格子点数は 10^{12} あるいは 10^8 と極めて多くなり，現在のところいくら高性能の計算機と高速なアルゴリズムを使っても現実的な時間でこれを解くことはできない。ただし，相関関数が並進対称性や回転対称性を有すると仮定できるため，これらの対称性を考慮することで変数の数は６（3 次元），あるいは５（２次元）とすることができる。問題はこれらの変数を具体的にどのように定義するかである。

４点の場合を考える前に，例として３点の場合を考えてみる。３つの点はそれらを頂点とする１つの三角形を形成するので（図２），これを表現するには３つの変数を用いればよいことはすぐにわかる。問題は，３辺の長さが三角不等式が満たす３次元空間内の領域をどのような変数を使って表現し，どのように計算格子を作るかである。これにはすでに答えが出ていて，３辺の長さをそれぞれ l_1，l_2，l_3 としたときに，３つの変数として以下で定義される変数（r, ρ , ϕ）を用いればよいことがわかっている。

$$l_n^2 = r\left(1-\rho\cos\left(\phi+\left(\frac{2\pi}{3}\right)n\right)\right),\ n = 1,\ 2,\ 3$$

ここでは，$r^{\frac{1}{2}}$ がスケール変数となっており，（ρ , ϕ）の範囲を $0 \leq \rho \leq 1$, $0 \leq \phi \leq \dfrac{2\pi}{3}$ とすれば，l_1，l_2，l_3 は常に三角方程式を満たし，すべての三角形の形状を過不足なく表現することができる。実際にこれらの変数を用いて３点相関関数の計算が行われている[3,4]。

４点の場合に戻る（図３）。ここでは２次元の場合を考えることにする。５つの変数をどのよ

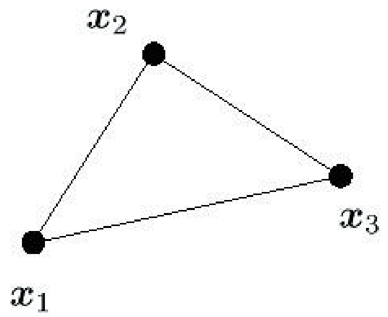

図２　３点の場合は，変数の数は３

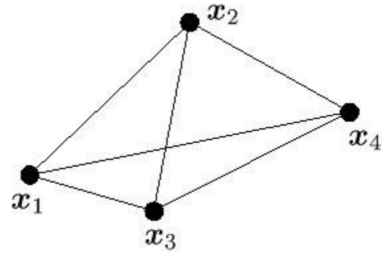

図３　４点の場合は？

うに定義するかであるが，相関関数は観測点の置換や任意の軸に関する反転に対して不変であるという性質を用いて計算領域を縮小することができるので，これらの変換をシンプルに表現できる，もっと言えば，格子点上でこれらの変換が閉じるような変数を用いることが望ましい。このような都合のよい変数の組を見つけることは，（少なくとも筆者にとっては）難問であった。いろいろな試行錯誤の末，図４に示すような，デカルト座標系において４つの観測点をそれぞれ $\boldsymbol{x}_1 = (rx_1,\ ry_1)$，$\boldsymbol{x}_2 = (r(1-x_2),\ ry_2)$，$\boldsymbol{x}_3 = (0,\ 0)$，$\boldsymbol{x}_4 = (r,\ 0)$ とあらわす変数の組 $(r,\ x_1,\ x_2,\ y_1,\ y_2)$ に落ち着いた。ここでは r がスケール変数である。残りの４つの変数 $(x_1,\ x_2,\ y_1,\ y_2)$ が固有関数 Φ の変数であり，それらの範囲は，

$$D = \{(x_1,\ x_2,\ y_1,\ y_2)\,|\,0 < x_i < 1,\ -1 < y_i < 1,\ i = 1,\ 2\},$$

とすれば，４点の配置をすべて表現するのに充分である。さらに，これらの変数を用いると置換 $\boldsymbol{x}_1 \leftrightarrow \boldsymbol{x}_2$，$\boldsymbol{x}_3 \leftrightarrow \boldsymbol{x}_4$ 及び反転 $(x_1,\ x_2,\ y_1,\ y_2) \leftrightarrow (x_1,\ x_2,\ -y_1,\ -y_2)$ を格子点上で閉じさせることができるので，計算領域を D の８分の１に縮小することができる。もちろんこれが最良の選択であるとはいえないが，とにかくこれらの変数で方程式を書き下し差分法によって離散化した。ここでは４次精度中心差分を用いた。これにより，問題はつぎの行列の固有値問題に帰着される。

$$\hat{\mathcal{L}}_\lambda \hat{\Phi} = 0$$

ここで，$\hat{\mathcal{L}}_\lambda$ は行列，$\hat{\Phi}$ はベクトルであり，それらの次元は格子点数に一致する。ただし，以上のように相関関数のもつ対称性を利用して格子点を減らしてもなお，得られる固有値が収束するのに必要な格子点数は大きい。今回の計算で扱った行列のサイズは約 $470{,}000 \times 470{,}000$ である。この場合，スケール変数 r を１とすると，平均格子間隔は $\dfrac{1}{30}$ である。

つぎに必要となるのは，この行列に対する固有値問題を高速に解くアルゴリズムである。

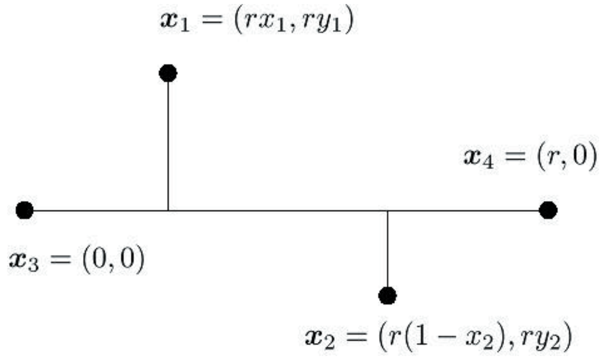

図４　計算に用いた４点相関関数の５つの変数（r, x_1, x_2, y_1, y_2）

Ⅲ．固有値計算

行列の固有値計算の部分は，同じくCOEプログラムに参加している山本有作准教授らが担当した。以下に数値計算法の概要を述べる。

一般に行列$\hat{\mathcal{L}}_\lambda$の各要素が$\lambda$について線形あるいは多項式で書ける場合には，解くのは比較的易しいが，この問題の場合はλがベキの形で入っている。λが演算子$\mathcal{L}_\lambda$の固有値である場合，行列$\hat{\mathcal{L}}_\lambda$は少なくとも一つの０の固有値を持つ（演算子$\mathcal{L}_\lambda$の固有値と行列$\hat{\mathcal{L}}_\lambda$の固有値の違いに注意)。すなわち，行列$\hat{\mathcal{L}}_\lambda$の絶対値最小の固有値を$f'(\lambda) = 0$とすると，ここで求めるべき演算子$\mathcal{L}_\lambda$の固有値は方程式$f'(\lambda) = 0$の解となっている。この方程式は導関数の要らない反復法であるsecant法を用いて解き，各反復において$\hat{\mathcal{L}}_\lambda$の絶対値最小の固有値$f'(\lambda)$をArnoldi法(ARPACK)[5]によって求めた。ただし，Arnoldi法では絶対値の大きな固有値が求まりやすく，絶対値最小の固有値は極めて収束が悪い。そこで，実際にはその代わりに，$\hat{\mathcal{L}}_\lambda$の逆行列の絶対値最大の固有値を求めた。この際，$\hat{\mathcal{L}}_\lambda$を係数とする連立一次方程式を繰り返し解く必要があるが，そこではCOEプログラムのメンバーである張紹良教授が開発した安定性・収束性の優れた反復法であるGPBi-CG法を用いた[6]。

Ⅳ．得られた成果

以上に述べた方法によって，微分演算子$\mathcal{L}_\lambda$の正の最小固有値とそれに属する固有関数（固有ベクトル）を求めた。固有値としては０も存在するのだが，この０の固有値を除くと，正の最小固有値のモードは極限$r \to 0$において最も減衰が遅いモードとなり，さまざまな４次の統計量の小さなスケールにおける振る舞いを決定する。具体的には，固有値は統計量のスケール依存性をあらわし，固有関数は４つの観測点$\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2$, $\boldsymbol{x}_3$, $\boldsymbol{x}_4$の配置への依存性をあらわす。例えば，４次構造関数$S_4(r) = \langle(\psi(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{r})-\psi(\boldsymbol{x}))^4\rangle$,（$r = |\boldsymbol{r}|$）は小さな$r$に対してベキ則$S_4 \sim r^{\zeta_4}$にしたがうが，その指数はここで求めた正の最小固有値に一致する。このスケーリング指数は他の方法によっても求めることができ[7]，実際に今回の固有値計算の結果はその結果ともよく一致していることが確認された。

ただし，今回の計算による大きな収穫は，固有値と同時に得られる固有関数である。この固有関数は，他の方法でも求めることができる固有値とは異なり，相関関数の方程式を解くことによってはじめて得られるものである。この固有関数を用いれば，異なる長さスケールを持つ統計量も計算することができ，これまでにはあきらかにすることができなかった乱流中のスカラー場の分布に関するさまざまな性質を調べることができる。この調査は現在も進行中である。

ここで紹介した内容は，当COEのリーダーである工学研究科計算理工学専攻の金田先生と，同専攻の山本先生，曽我部先生，大井さんとの共同研究によるものである。また，この原稿の作成にあたっては，山本先生のご協力をいただいた。

参考文献

1．文部科学省21世紀COEプログラム「計算科学フロンティア」
http://fcs.coe.nagoya-u.ac.jp/
2．R. H. Kraichnan, Phys. Fluids **11**, 945（1968）
3．O. Gat, V. S. L’vov and I. Procaccia, Phys. Rev. E **56**, 406（1997）
4．A. Pumir, B. I. Shraiman and E. D. Siggia, Phys. Rev. E **55**, R1263（1997）
5．ARPACK, http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/
6．S. -L. Zhang, SIAM J. Sci. Comput., **18**, 537（1997）
7．U. Frisch, A. Mazzino, A. Noullez and M. Vergassola, Phys. Fluids **11**, 2178（1999）

（みずの　よしのり：マドリッド工科大学航空工学科研究員
前名古屋大学大学院工学研究科計算理工学専攻21世紀COEプログラム
「計算科学フロンティア」COE研究員）