

乱流研究におけるコンピューターシミュレーション

広島大・理 八 幡 英 雄

流体運動をその基礎方程式である Navier-Stokes 方程式を計算機を用いて数値的に解き、気象予報や乱流現象解明に役立てようとする試みは、Richardson や von Neumann に始まると考えられるが、近年の計算機の高速化・大容量化によってこの方向の研究は近い将来相当の発展が期待される。勿論ただ単に計算速度の上昇だけによってその発展が可能になるのではなく、実験測定技術の精密化による未知の物理機構の探索や、数学的あるいは物理的に新しい概念の提起などが、これと並行して行われなければならないことは言うまでもない。ここではこれらの問題点を紹介しながら、乱流研究における computer simulation の役割について述べる。

§ 1. カオス

一般に有限自由度の決定論的微分（あるいは差分）方程式の非周期的運動を示す解はカオスとよばれる。確率論においては古くから例えば単位区間 $[0, 1)$ 上で定義された写像 $x_n \rightarrow x_{n+1} = Tx_n = 2x_n \pmod{1}$ によって生成される数列 $\{x_n\}$ は一般に極めて不規則・乱雑であって変換 T は混合的であることや、また負の曲率をもつコンパクト・リーマン多様体上の測地線に沿う運動が混合的であることなどが知られていた訳であるから^{1), 2)} カオスそのものは全く新しい概念であるとは言えないであろう。しかしこれもまた古くから研究されてきた非線型振動論においては、常微分方程式系の解として、定常解として現われる不動点・振動解として現われる limit cycle・複数列の基本振動数を含む準周期的運動を現わすトーラス軌道が基本的であった。その際、準周期的運動は振動子間の相互作用がある程度強ければ、同期化 (synchronization) して単純な振動になることが一般的と考えられ、確率論で知られていたような数学的模型と同じように乱雑な挙動を示す解をもつ実際の常微分方程式系の存在は否定的に考えられていたように思われる³⁾ したがって体系の示す乱雑な振舞いは一般に非常に多数個の独立な（あるいは弱く結合した）振動数をもつ振動子が同時に存在することによると考えられた。乱流発生に関する有名な Landau の理論はその代表的な例である⁴⁾ この通念を打破したのが Lorenz で、彼は 2 枚の平行平板間に閉じこめられた液体を下から熱した時発生する対流 (Bénard 対流) を記述する偏微分方程式系において、速度場・温度場をフーリエ展開してそのうち 3 個のフーリエ係数 X, Y, Z の満たす方程式

$$\frac{dX}{dt} = -10X + 10Y, \quad \frac{dY}{dt} = -XZ + rX - Y, \quad \frac{dZ}{dt} = XY - \frac{8}{3}Z \quad (1)$$

(r は平板間の温度差を示すパラメタ) を考察した⁵⁾ この方程式の解は XYZ-相空間において、 $0 < r < 1$ の時熱伝導に対応する不動点 $(0, 0, 0)$, $1 < r < 24.74$ の時定常対流解に対応する 2 つの不動点 $C, C'(\pm 6\sqrt{2}, \pm 6\sqrt{2}, 27)$ によって表現されるが、 $r = 24.74$ で亜臨界 Hopf 分岐が起って定常解は不安定化して振動解が発生する。Lorenz は $r = 28$ の場合 (1) を計算機によって時間積分し解軌道を追跡した。図

1 は変数 Y の時間発展, 図 2 は XY-および XZ-相空間における軌道を示す。運動は不安定化した 2 つの不動点 C, C' のまわりの不規則回の回転と相互の乗り移りによって乱雑になっている。この

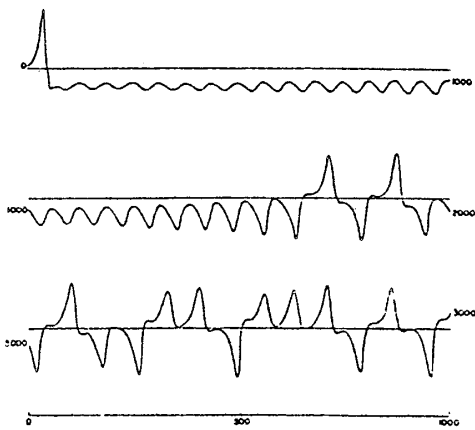


図 1

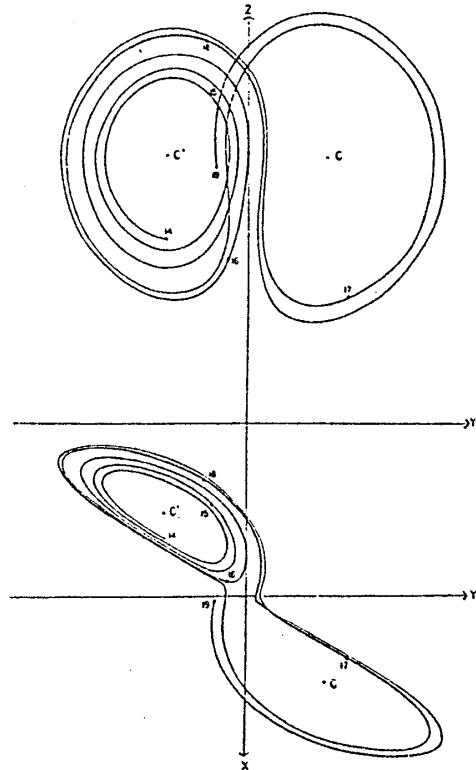


図 2

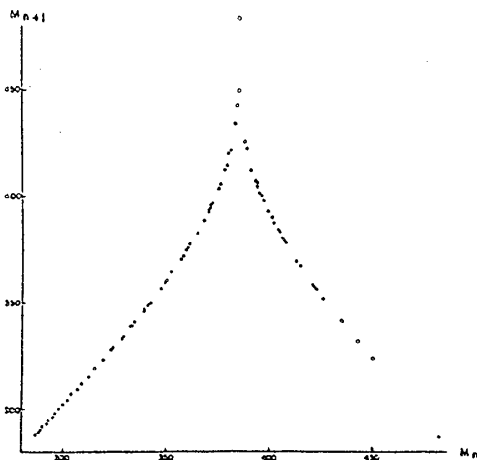


図 3

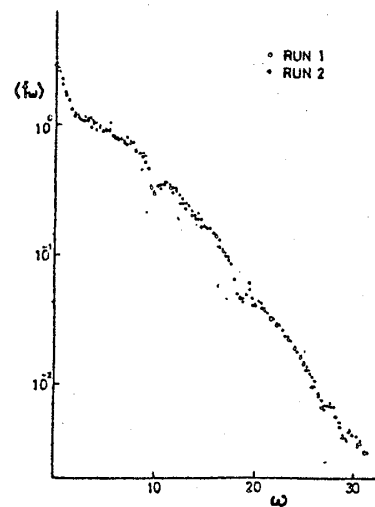


図 4

乱雑運動が数値誤差などの外的な要因によるものではないことを示すため、彼は数値解における $n+1$ 番目の Z の極大値 M_{n+1} を n 番目の極大値 M_n に対して描き、それが一つの曲線上に分布することを示した (図 3)。運動 $Y(t)$ が周期的か非周期的かをみる最も簡便な方法は、高速フーリエ変換 (FFT) を用いてパワースペクトル密度 (PSD)

$$P(\omega) = E\left[\frac{1}{T}\left|\int_0^T e^{i\omega t} Y(t) dt\right|^2\right] \quad (2)$$

を計算することであろう (ここで T は分解能 $\Delta\omega = 1/T$ に応じて十分長くとり、 E は異なる初期値をもつ軌道に関する集団平均とする)。図 4 の Lorenz 模型に対する PSD は線スペクトルを含まず運動が非周期的であることを示す⁶⁾。

Lorenz の研究は気象学の分野で行われたため長く数学や物理学の研究者に知られず、少数自由度系におけるカオスの存在を提示した点では Ruelle-Takens の仕事が重要である⁷⁾。最初に述べた負の曲率をもつ曲面上の測地流における特徴は軌道の双曲性で、これは接ベクトル空間が指数函数的に増大する方向と縮小する方向に分解されることであり、微分方程式においては初期値の微小な差がその後の解の時間発展につれて指数函数的に増大することを意味する (軌道の指数函数的不安定性・解の初期条件への敏感な依存性)。軌道が双曲的性格をもつより抽象的な数学的模型の構成が Anosov や Smale によって行われたが、Smale の公理 A を満たす力学系は現在最も一般的なもので、strange attractor とよばれる非周期的軌道をもちうることが知られている⁸⁾。その結果有限自由度力学系が非周期的解をもつことが可能であることが明らかになり、さらに Ruelle-Takens は少数個 (2 個は除く) の独立振動数からなる準周期的運動は、一般的にはすでに strange attractor 上の不規則的運動として現われる可能性を示唆し、これによって乱流発生を理解することを提示した。これらの研究に刺戟されて 70 年代後半から、おびただしい量の少数自由度微分 (または差分) 方程式系の模型が多く研究者によって構成され、その解の分岐とカオス発生の機構が詳細にしらべられるようになった。その際計算機を用いて解の時間挙動に関する知見を得ることは、ほとんど必須の手段であった。またカオスが流体乱流だけでなく、化学反応系・非線型光学系・回路系・生態系など広範な分野に現われる現象として認識されるようになったのも特徴である。

それらのうちここでは分岐のたびに周期が 2 倍になる遷移を経て、すなわち周期が $1 \rightarrow 2 \rightarrow 2^2 \rightarrow \dots \rightarrow 2^n \rightarrow \dots$ と 2 倍になりながら、最後に遷移点が集積した点でカオスが発生する場合について述べる (period doubling bifurcations)。このような遷移を起す最も単純な模型は、May が生態学における個体数 y_n の世代 n による変動を記述するために用いた 1 次元差分方程式 ($[1-r/4, r/4]$ から自身への写像)

$$y_{n+1} = g_r(y_n) = ry_n(1 - y_n), \quad 2 < r \leq 4 \quad (3)$$

あるいは変数変換 $y = (r/4 - 1/2)x + 1/2$, $\mu = r^2/4 - r/2$ により, $[-1, 1]$ 上で定義された

$$x_{n+1} = f_\mu(x_n) = 1 - \mu x_n^2, \quad 0 < \mu \leq 2 \quad (4)$$

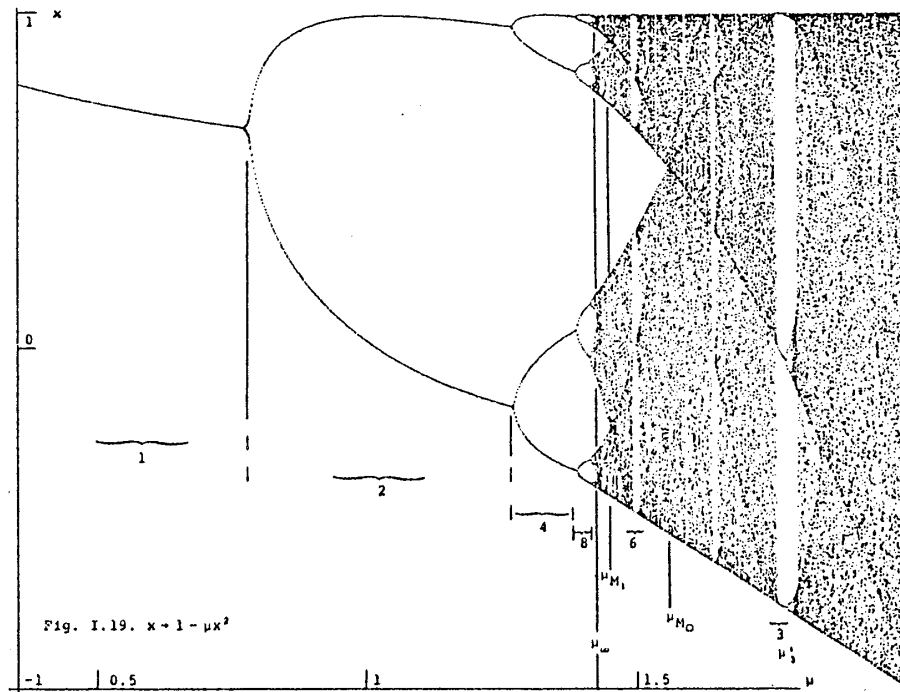


図 5

である。⁹⁾ 図 5 に分岐パラメタ μ の値に対して, 適当な初期値 x_0 より出発して数列 $\{x_n\}$ の到達する値を示す。¹⁰⁾ μ の値に対して p 個の異なった値が存在する場合は, p 周期軌道 $f^p(x) = x$, $f^q(x) \neq x$; $q = 1, \dots, p-1$ を示す。非周期軌道が軌道の指数函数的不安定性と関係していることを確かめるために, Lyapunov 特性指数

$$\bar{\lambda}(r) = \frac{1}{N_j} \sum_{j=1}^N \log |Dg_r(g_r^{j-1}(0))| / \log 2 \quad (5)$$

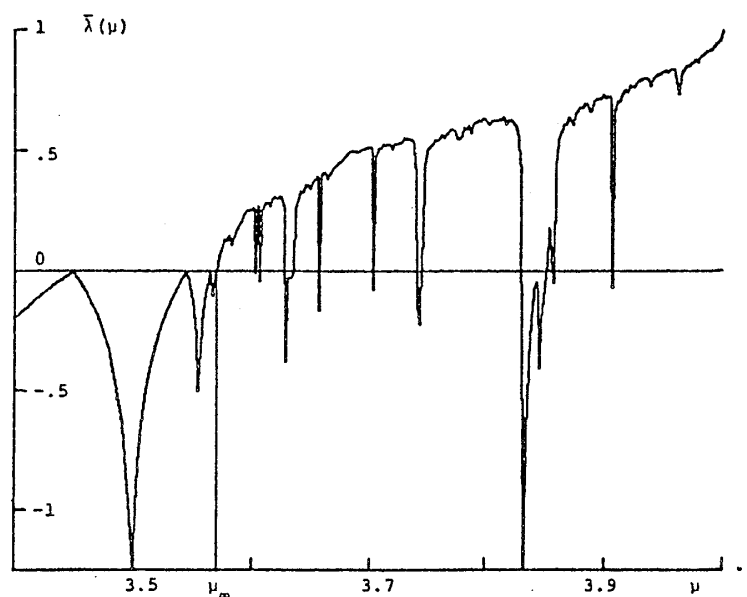


図 6

($N=10^5$) が計算された (R. Shaw, 図 6)¹⁰⁾ ここで $\bar{\lambda}(r) > 0$ が非周期軌道に対応している。(ただし 2^n 分岐の集積点 r_∞ において, 全周期軌道は不安定化しエルゴード的であるが, $\bar{\lambda}(r_\infty) = 0$ で軌道は混合的ではない。) 次に 2^n 分岐が起る分岐点 μ_n の μ_∞ への収束に関して比 $(\mu_n - \mu_{n-1})/(\mu_{n+1} - \mu_n)$ が n の増大と共に一定値 $\delta = 4.6692 \dots$ に収束することが, Feigenbaum らによって見出された¹¹⁾ つまり μ_n は μ_∞ の近傍で漸近的に

$$|\mu_n - \mu_\infty| \sim \delta^{-n} \quad (6)$$

であり, さらに δ は写像の種類によらず普遍的であることが提唱され, その数学的証明が試みられた。この例証として図 7 にいくつかの 2^n 分岐を起すモデルに対して, $\log |\mu_n - \mu_\infty|$ を n に対して描いた図を示す。¹⁰⁾

この節の最後に, 流体乱流が strange attractor によって記述される可能性について述べる。非圧縮性粘性流体の速度場 $\mathbf{v}$, 圧力場 p の満たす Navier-Stokes 方程式は

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \text{grad } \mathbf{v} &= -\text{grad } \frac{p}{\rho} + \nu \Delta \mathbf{v}, \\ \text{div } \mathbf{v} &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

であり (ここで ν は動粘性率, ρ は密度), 流体乱流が strange attractor

によって記述される場合には, その attractor M の相空間における次元は有限である。¹²⁾ これに関してはまず Hopf の仮説があり, それによると Reynolds 数が十分小 (つまり ν が十分大) であれば粘性項 $\nu \Delta \mathbf{v}$ の効果により解の高波数成分は時間と共に減衰して, 相空間において有限次元の多様体上に落ち込むであろうと推測された。¹³⁾ その後空間の次元 $d=2$ の場合については, 数学的証明が行われたが (Foias-Prodi, Ladyzhenskaya), $d=3$ の場合については不明である。¹⁴⁾

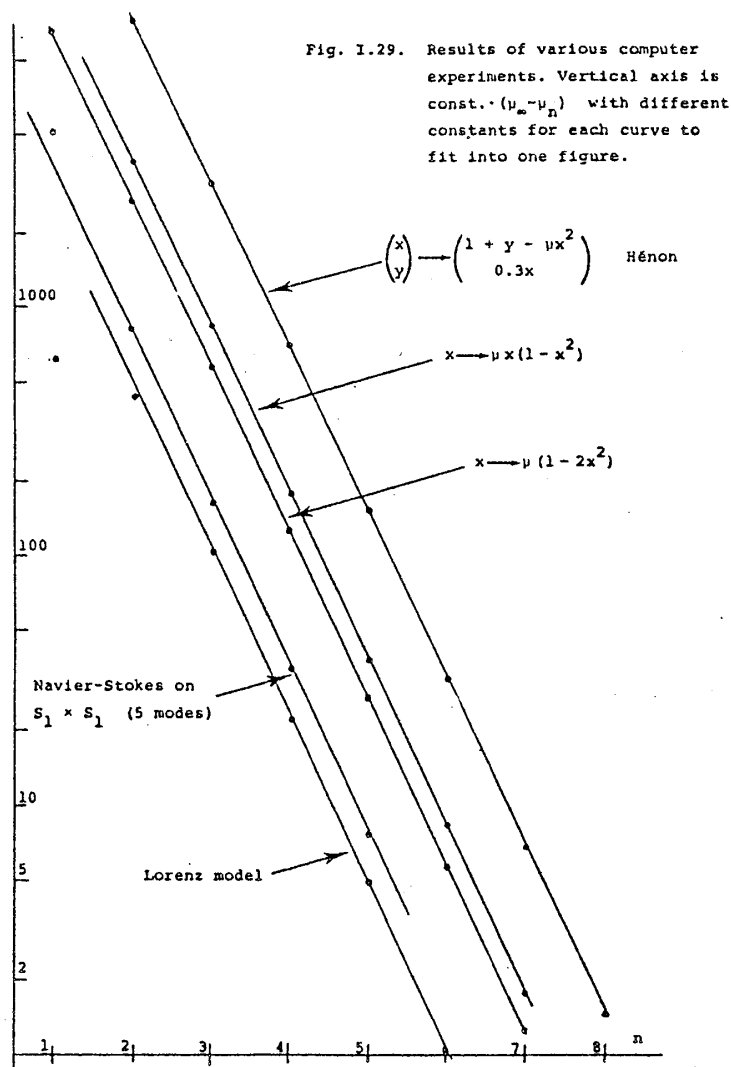


図 7

§ 2. 流体乱流の発生

この節では流体系の典型的な例のうち、閉水路系として Taylor 渦流と Bénard 対流、開水路系として平板境界層流と 2 次元 Poiseuille 流を取りあげる。閉水路系に関しては、熱平衡状態およびその近傍における相転移現象の非平衡状態における類似の現象として、装置も小規模なため従来の物性物理における実験家の関心を集めた。レーザー流速計 (LDV) による流速の直接測定、測定データの計算機による自動処理、Bénard 対流においては液体ヘリウムを流体として用い低温技術の駆使による低雑音測定などによって測定精度が非常に向上した。それに対応してこれらの観測結果の再現をめざす模型計算も試みられるようになってきた。

§ 2.1 Taylor 渦流

2 つの同軸円筒 (内径 R_1 ・外径 R_2 ・高さ H) の間に流体を入れ、内側の円筒の回転角速度 Ω_1 を次第に増加していく。以下 Ω_1 を Reynolds 数 $R = \Omega_1 R_1 (R_2 - R_1) / \nu$ により表わし、 $\eta = R_1 / R_2$ 、 $\Gamma = H / (R_2 - R_1)$ として、円筒座標を (r, θ, z) とする。 R が十分小の間流体運動は方位角方向の一様定常流で、流速 $V(V_r, V_\theta, V_z)$ は

$$V_r = V_z = 0, \quad V_\theta = \frac{\Omega_1 R_1^2}{R_2^2 - R_1^2} \left(-r + \frac{R_2^2}{r} \right) \quad (8)$$

で与えられる。 R が臨界値 R_c に達するとこの一様流に、水平なトーラスが垂直方向に一定の周期で積重なった形状の新たな定常流 (Taylor 渦流) が重畳する。さらに R を増加させると Taylor 渦流は方位角方向に伝播する波動を伴うようになり、この振動は十分大きな R で乱れて乱流になる。この体系に対して、LDV を用いた局所流速測定が Swinney のグループによって行われた ($\eta = 0.875$, $\Gamma = 20$)¹⁵⁾ 図 8 に結果を PSD によって示す。横軸は Ω_1 を単位として測った角振動数である。 $r = R/R_c = 9.6$ では運動は 1 個の基本振動数 ω_1 を含む周期的運動で、空間的には方位角方向に波の数 $m = 4$ をもった伝播波に対応している。 $r = 18.1$ では 2 つの振動数 ω_1, ω_3 を含む準周期的運動となり、 $\omega \sim 0.4$ 付近にバンド状の連続成分 B が現われ、さらに $r = 22.8$ では線成分は消失して運動は完全に乱流化している。ただしこの場合時間的に運動は不規則化しても、空間的な Taylor 渦のトーラス状構造は残存している。図 9 に 2 つの振動数成分の比 ω_3/ω_1 を r に対して描いた図を示す。 ω_3/ω_1 は r の増加にしたがってほぼ連続的に値を変え、 ω_1, ω_3 が独立成分であることがわかる。乱流の発生は、 r の増大と共に独立振動数成分比は無理数のまま非線型相互作用により不変トーラスが次第に崩れることによると考えられている³⁵⁾ B がどのような流れの成分に対応しているか、現在のところ公表された報告はないようである。また振動数成分 ω_1 および ω_3 の消失の機構も明らかにされていない。方位角方向の波の数 m の値によって、振動数の値 ω_1, ω_3 が異なるので、この実験では r の変化によ

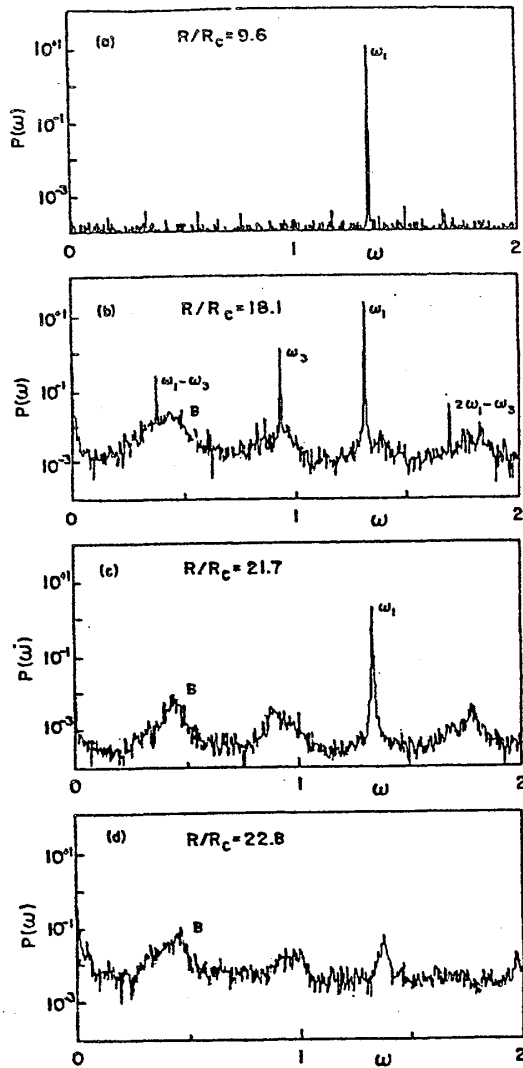


図 8

って m が変化しないような流れを生成する初期条件を選んで実験を行っている。したがって空間的基本構造は定常渦流から乱流に至るまで同じと考えられる。これに対して縦横比の大きい容器 ($\Gamma = 80$) の場合の実験が Donnelly のグループによって行われた。¹⁶⁾ これによると図 10 に示すように m の値は r の増加と共に不連続的に変化し、しかもその中間の r の値では Taylor 渦のトーラスに図 11 に示すような dislocation が入り結果として流れは乱流化する。このように流速場の空間的構造の乱雑化に伴って時間変

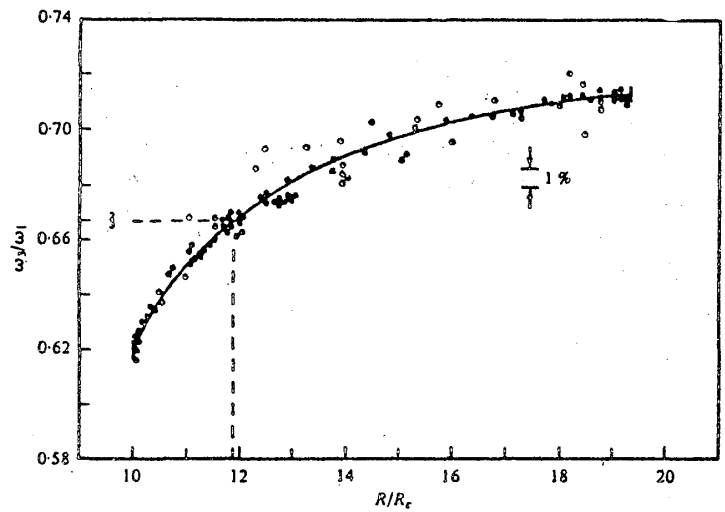


図 9

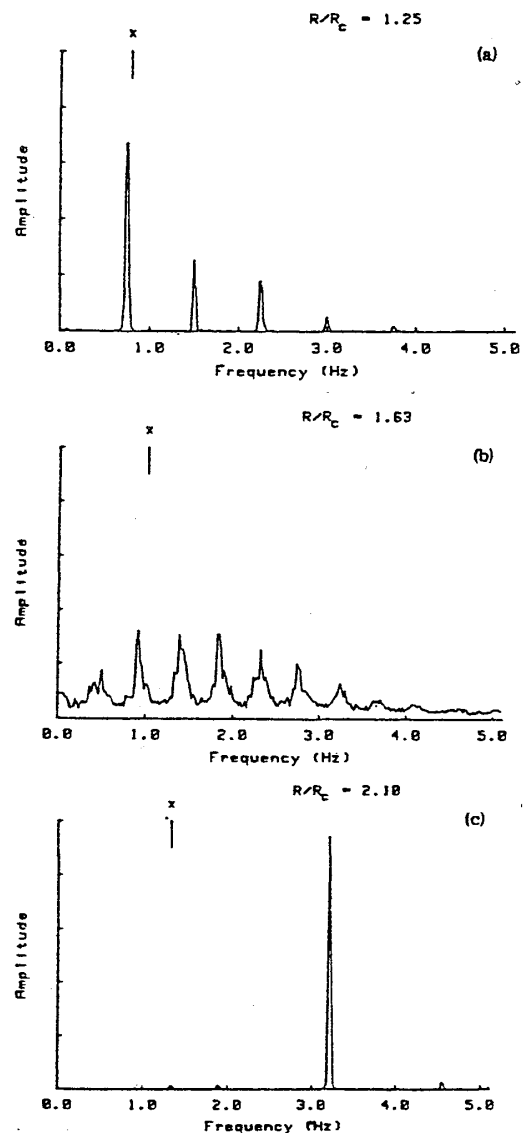


図 10

動が乱雑化する場合には, strange attractor によって流れを記述することは困難と考えられる。

次にこの現象に対する computer simulation の一つの試みを述べる¹⁷⁾ 基礎方程式(7)において, 速度場 $\mathbf{v}$ ・圧力場 p を一様定常流(8)の値 $\mathbf{V}$, Π とそれに対する乱れ $\mathbf{u}$, δp の和として, $\mathbf{v} = \mathbf{V} + \mathbf{u}$, $p = \Pi + \delta p$ とおき, 乱れ $\mathbf{u}$, δp に対する方程式を得る。ここで $\mathbf{u}(u_r, u_\theta, u_z)$, δp を Taylor 渦の空間周期性を考慮して次のようにモード展開する:

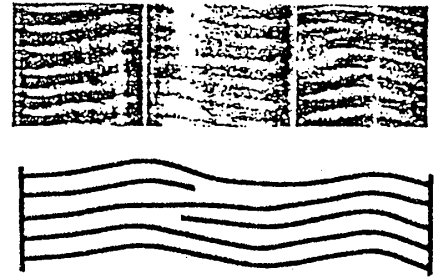


図 11

$$\begin{aligned} u_r(r, \theta, z, t) &= \sum_{\varepsilon=\pm} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \xi_{(\varepsilon, l, m)j}^{(1)}(t) \phi_{1,j}(r) e^{im\theta} \psi_{\varepsilon, l}(z) \\ u_\theta(r, \theta, z, t) &= \sum_{\varepsilon=\pm} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \xi_{(\varepsilon, l, m)j}^{(2)}(t) \phi_{2,j}(r) e^{im\theta} \psi_{\varepsilon, l}(z) \end{aligned} \quad (9)$$

ここで $\psi_{+, l}(z) = -\sqrt{2} \cos laz$, $\psi_{-, l}(z) = \sqrt{2} \sin laz$, $\phi_{1,j}$, $\phi_{2,j}$ は固有値方程式 $\partial_x^4 \phi_{1,j} = \alpha_j^4 \phi_{1,j}$, b.c.: $\phi_{1,j}(\pm 1/2) = \partial_x \phi_{1,j}(\pm 1/2) = 0$; $\partial_x^2 \phi_{2,j} = -\beta_j^2 \phi_{2,j}$, b.c.: $\phi_{2,j}(\pm 1/2) = 0$ の解より定める。円筒は軸方向には無限に長いと仮定し, Taylor 渦の軸方向の波長を $2\pi/a$, 方位角方向の波の数を m とし, 各モードを記号 $(\varepsilon, l, m)_j$ によって指定する。展開(9)を Navier-Stokes 方程式に代入し, Galerkin 法によってモード変数 $\xi_{\lambda j}^{(p)}(t)$, $p = 1, 2$; $j = 1, 2, \dots, N$; $\lambda = (\varepsilon, l, m)$ に対する非線型常微分方程式系

$$\frac{d}{dt} \xi_{\lambda j}^{(p)} + \sum_{q, k} C_{\lambda j, \lambda k}^{pq} \xi_{\lambda k}^{(q)} = \sum_{p' p''} \sum_{\lambda' \lambda''} \sum_{j' j''} U_{\lambda j; \lambda' j', \lambda'' j''}^{pp' p''} \xi_{\lambda' j'}^{(p')} \xi_{\lambda'' j''}^{(p'')} \quad (10)$$

を導びき, 各 Reynolds 数に対して計算機を用いて時間発展を追えば, 解の挙動を知ることができる。実験によると速度成分 u_z は, 渦の流入・流出水平境界での進行波の位相差のため, $u_z \sim \sin a [z - b \sin(m\theta - 0.25\pi \cos az - \omega t)]$ の形が示唆される (ω は波の進行速度・ b は定数)。これはフーリエ分解すれば, 空間的高調波成分 $\sin az$, $e^{i2km\theta} \sin laz$, $e^{i(2k-1)m\theta} \cos laz$ ($k, l = 1, 2, \dots$) を含んでいる。そこで $m = 4$ の基本波動を考え, モード変数 $(+, 1, 0)_j$, $(+, 2, 0)_j$, $(-, 1, 4)_j$, $(+, 2, 8)_j$, ($j = 1, \dots, 6$); $(+, 0, 0)_j$, ($j = 1, \dots, 8$) からなる全体で 82 変数の切断された方程式系の運動を, 局所流速 $u_r((R_1 + R_2)/2, t)$ の PSD により図 12 に示す。 r の増加と共に周期運動が準周期運動になり, さらに雑音が増加して流れが乱流化している。ただし実験では低調波分岐 $P_2/2$ は起らず, この点この模型は不満足である。

最近モード展開法を用いモード変数 10^4 程度の方程式系を, CRAY 1 によって時間積分する

ことが、2つのグループ (MITのMarcusとStanfordのMoser) によって行われ、現在までのところ Taylor 渦の準周期運動までは、実験結果をよく再現する結果を出しており、今後この種の大規模計算は盛んになる傾向がうかがえる。

§ 2.2 Bénard対流

Lorenz 模型のところで述べたように、水平な2つの平板間に閉じこめられた流体を下から熱した時発生する対流を、Bénard 対流とよぶ。対流の速度場を $\mathbf{u}(u_x, u_y, u_z)$ 、垂直方向に一樣勾配をもつ定常温度場からの乱れの温度場を θ とすると、無次元化された運動方程式は Boussinesq 近似で、

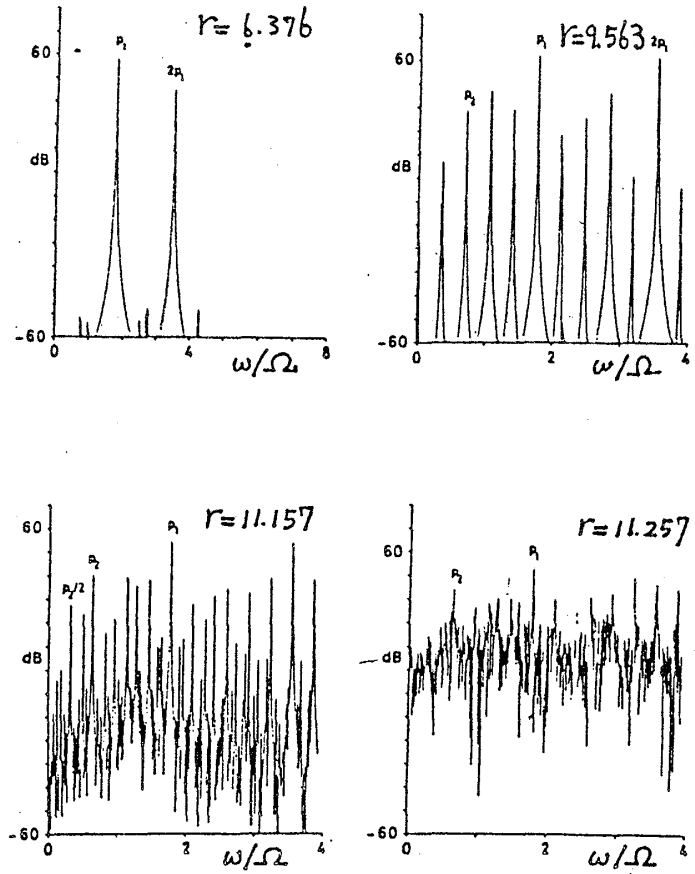


図 12

$$\partial_t u_i - \sigma \Delta u_i - \sigma \lambda_i \theta + \partial_i (\partial p / \rho) = -u_j \partial_j u_i, \quad (i = x, y, z),$$

$$\partial_t \theta - \Delta \theta - R \lambda_j u_j = -u_j \partial_j \theta,$$

$$\partial_j u_j = 0 \tag{11}$$

と書かれる。ここで $\lambda = (0, 0, 1)$ で、無次元化尺度は長さ d 、時間 d^2/κ 、温度 $\kappa\nu/g\alpha d^3$ である。ただし d は平行平板間の距離、 κ は熱拡散率、 α は熱膨脹係数、 g は重力加速度を示す。(12) は2つの無次元パラメタ: Rayleigh 数 $R = g\alpha d^3 T_d / \kappa\nu$ 、Prandtl 数 $\sigma = \nu/\kappa$ を含む。ただし T_d は平行平板間の温度差である。さらに体系を特徴づける量として容器の縦横比がある。直方体であれば、 L_x, L_y を水平方向の辺の長さとして、 $\Gamma_x = L_x/d, \Gamma_y = L_y/d$ により、円筒であればその水平直径を D として $\Gamma = D/2d$ により定義される。

まず最近の乱流遷移実験を列举すると、

- a) Willis, Deardorff (1967-70) 空気 $\sigma = 0.7$
- b) Krishnamurti (1970-73)
- c) Ahlers, Behringer (1974-) 液体ヘリウム

d) Gollub, Benson (1978-) 水 $\sigma = 2.5, 5.0$

e) Libchaber, Maurer, Fauve (1978-) 液体ヘリウム・水銀

f) Giglio, Musazzi, Perini (1981-) 水

となる。これらの実験により明らかになった一般的結論は、定常対流から R を上昇していくにつれ乱流になるまでに経る遷移の類型は、体系の Prandtl 数 σ 、縦横比 Γ 、さらに対流の初期設定がどのようになされたかによって著しく異なるということである。それに従って現在きわめて多様な遷移の類型が知られるようになった。次にそれらのうち代表的なものをいくつか挙げる。矢印 $\rightarrow$ は R を増加していく時に起る運動状態の遷移を示す。

i) 周期的 (振動数 f_1) $\rightarrow$ 周期倍分岐 ($f_1/2, f_1/4, \dots$) $\rightarrow$ 乱流。

図 13 に Gollub のグループが $\Gamma_x = 2$, $\Gamma_y = 3.5$ の直方体容器内で, $\sigma = 2.5$ の水で行った実験結果を, LDV で測定した局所流速の PSD によって示す。¹⁸⁾

R_c は熱伝導状態から定常対流状態に遷

移する点の Rayleigh 数を表わす。 R の増大と共に基本振動数 f_2 の $1/4$ までの分岐が起って、その後乱流化していることがわかる。図 14 に Libchaber グループの液体ヘリウムを用いた実験の結果を示す。¹⁹⁾ 基本振動数の $1/16$ まで観測されているが、 $1/8$ と $1/16$ 成分の出現は再現性がないと報告されている。図 15 に Giglio グループが水を用いて、laser-beam-deflection 法によって測定した局所温度勾配の時間変動を PSD によって示す。²⁰⁾ $R/R_c = 62.6$ では $f_1/4$ まで現われている。しかし $R/R_c = 66.2$ で $f_1/8$ が現われる

時、間隔が $f_1/38$ の分裂した 2 本線として現われ、 $R/R_c = 67.4$ で $f_1/16$ が現われる時には、間隔 $f_1/19$ の 2 本線として現われ両者の間隔はほぼ同程度となり、これによって乱流化が始まる。これらの実験結果は、現実の体系では周期倍分岐が § 1 に述べたように理想的には起らな

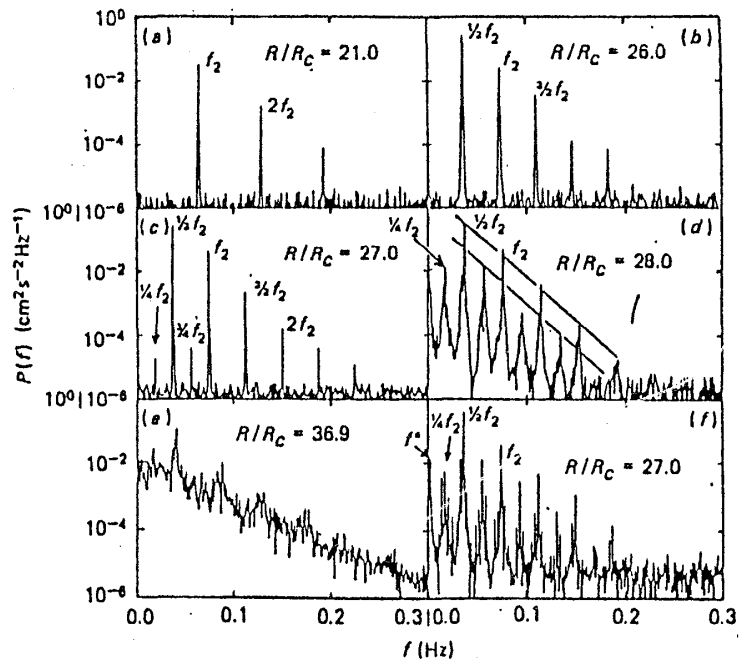


図 13

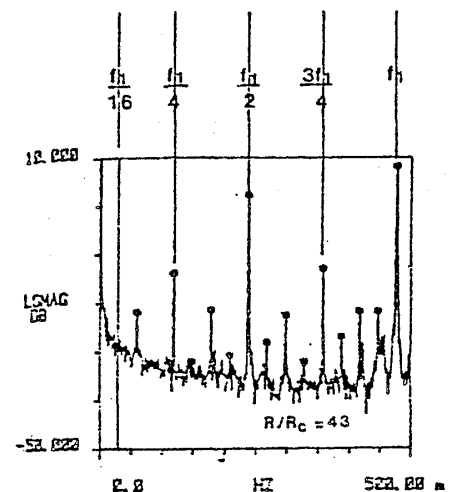


図 14

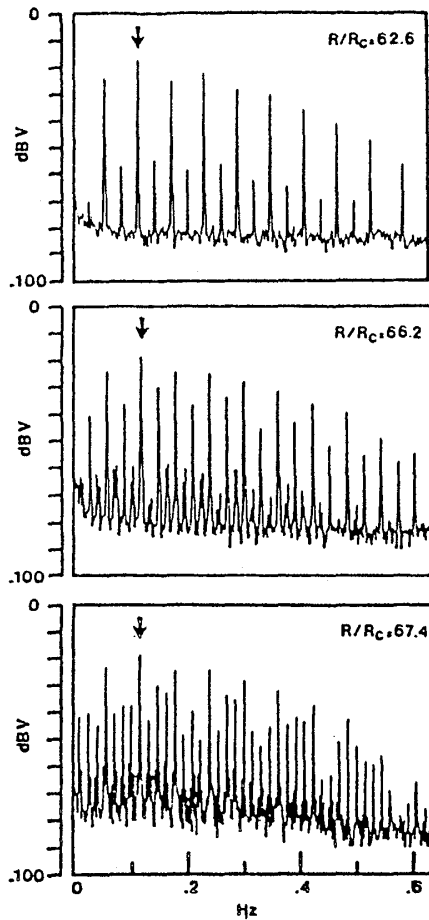


図 15

いこと、多自由度系の運動の1次元写像への還元が集積点に近づくにもかかわらず破れることを示している。この破れ方に何か規則性が存在するの否かは興味ある問題である。最近Libchaber は水銀に対し、水平方向に磁場をかけ Taylor-Proudman 機構によるロール運動の安定化を利用して $f_1/16$ 低調波分岐までの測定に成功している。³⁶⁾

ii) 周期的 (f_1) → 準周期的 (f_1, f_2) → frequency locking ($f_1/f_2 = \text{有理比}$) → 周期倍分岐または locking の破れ → 乱流。

図 16 に Libchaber グループが測定した液体ヘリウムの局所温度の時間変動を PSD によって示す。²¹⁾ $R = 29800$ で 2 つの振動数 f_1, f_2 を含

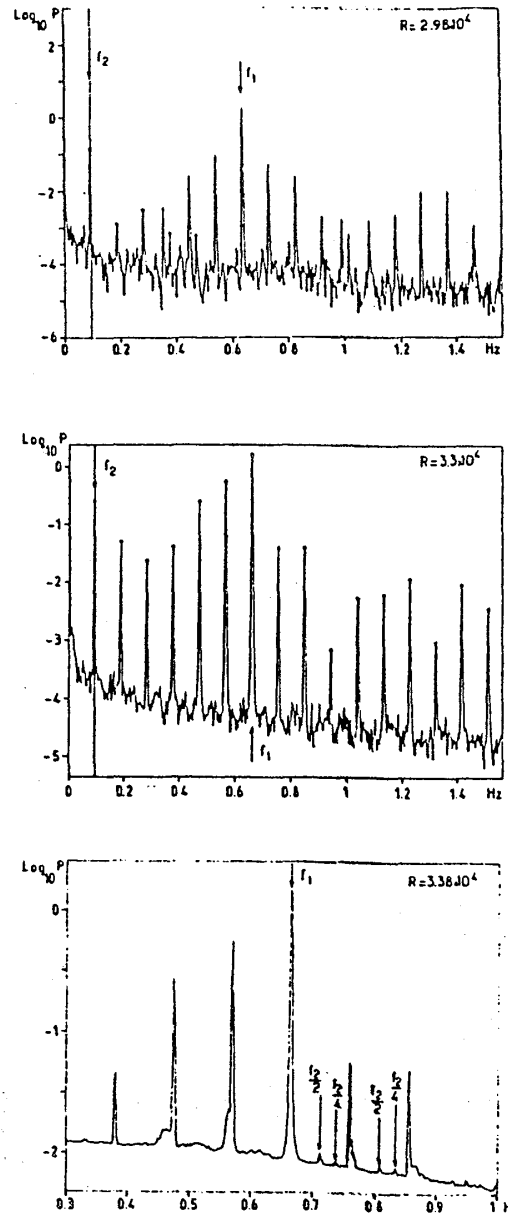


図 16

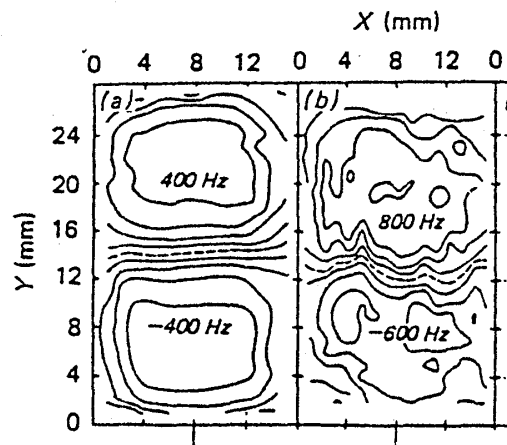


図 17

む準周期的運動が、 $R = 33000$ では $f_1/f_2 = 7$ に同期している。 $R = 33800$ で低調波 $f_2/2, f_2/4$ が観測され、乱流化が始まる。図 17 に Gollub グループが $\Gamma_x = 2$, $\Gamma_y = 3.5$ の直方体容器に入れた水に発生した対流において、LDV によって測定した流速 u_y の等値線を示す。²²⁾ (a) は $\sigma = 2.5$, $R/R_c = 17.1$ で定常対流であり、(b) は $\sigma = 5$, $R/R_c = 65.4$ で乱流であるが両者とも空間的には 2 個のロールが存続していることがわかる。

この体系において、 $\sigma = 5$ の場合 R を増大させた場合の u_y の挙動を PSD によって図 18 に示す。2 つの振動数成分 f_1, f_2 を含む準周期的運動が $R/R_c = 45.2$ では $f_2/f_1 = 9/4$ に同期しているが、 R をさらに増大させると同期が破れて線幅が広がり乱流化する。この場合の乱流化の機構については円周から自身への 1 次元写像系による説明がある。

iii) 周期的 (f_1) $\rightarrow$ 準周期的 (f_1, f_2) $\rightarrow$ 準周期的 (f_1, f_2, f_3) $\rightarrow$ 乱流。

Gollub のグループは、基本流が 3 個のロールの場合にこの遷移を観測したが、乱流化の機構は明らかでない。²²⁾ Libchaber 達は、水銀 ($\sigma = 0.031$) においてこの遷移を観測し、3 個の基本振動数を含む準周期的運動は、低周波部分に連続スペクトル成分を伴って現われ、すでに乱流化していることを見出している。²³⁾ この遷移は Ruelle-Takens の乱流発生理論との関連で興味深い、それ程詳細に究められていないようである。

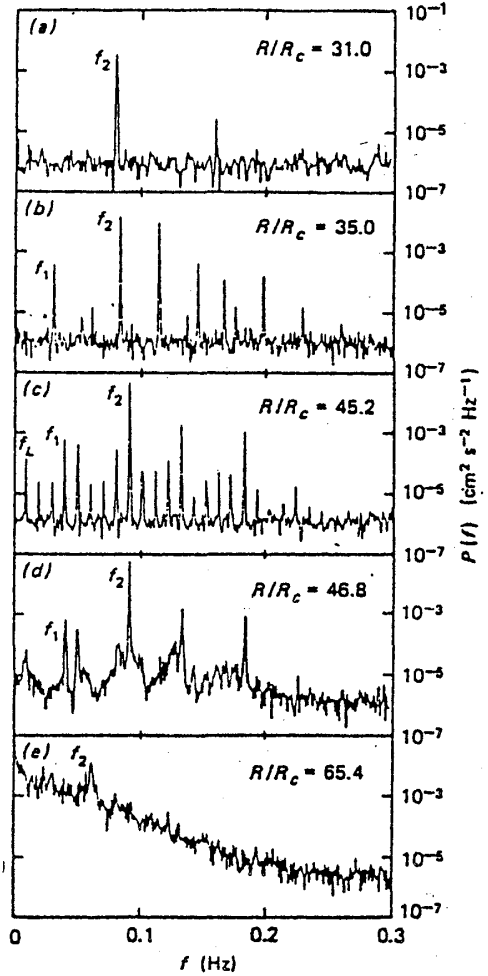


図 18

iv) 周期的 (f_1) $\rightarrow$ 準周期的 (f_1, f_2) $\rightarrow$ 共鳴または mode-softening ($\exists n_1, n_2 \in \mathbf{Z}$ s.t. $n_1 f_1 + n_2 f_2 = 0$) $\rightarrow$ 乱流

これは準周期的運動の独立振動数 f_1, f_2 が、整係数で 1 次従属 (rationally dependent) になって乱流化する場合で、ii) のように同期状態を経ない。Ahlers グループが $\Gamma = 2$ の円筒に入れた液体ヘリウムにおいて、垂直方向に流れる熱量測定から求めた温度場の時間変動を PSD によって図 19 に示す。²⁴⁾ この PSD の詳細な解析により、彼らは乱流化がこの機構によることを示した。

他にも幾多の遷移類型が見出されているが、ここでは省略する。ここにやや詳しく実験結果

を紹介したのは、解明を要する広範な現象が提出されて居り、computer simulation はその最も有力な手段となることが期待されるからである。特に多自由度系の乱流化の機構は、strange attractor で記述可能な本質的に有限自由度系の問題であっても、1 あるいは 2 個の自由度の問題への還元の機構やどの程度完全に還元されるのか不明の点が多い。

次に現在までに行われた computer simulation のうちから²⁵⁾⁻²⁸⁾ 2 例を簡単に紹介する。

i) Lipps は Willis-Deardorff の空気の Bénard 対流実験を再現する目的で、simulation を行った。²⁶⁾ $\sigma = 0.7$ で、 $R = 4000, 6000, 9000, 25000$ に対して計算を行い、直方体容器の縦横比は $\Gamma_x = 2.0 \sim 4.0$, $\Gamma_y = 3.2 \sim 4.91$ の範囲の値から幾組か選ばれている。速度場・温度場に対して、水平壁面ではすべりなし・伝導的境界条件、側壁では周期的境界条件が課された。直方体は R, Γ_x, Γ_y の値に応じて 7840 点から 32000 点の格子点で近似され、空間・時間に関して基礎方程式 (12) が差分近似された。時間積分に関して各ステップごとに、(12) より導かれる圧力に対する Poisson 方程式

$$\Delta \delta p / \rho = \sigma \partial_z \theta - \partial_k (u_j \partial_j u_k) \quad (12)$$

を解きながら、 $\mathbf{u}, \theta$ の時間発展が計算された。 $R = 4000$ においては縦横比の小さい方の辺に平行な軸をもつロールが現われた。 $R = 6500$ ではロールの辺が波打って伝播性波動が現われることが、図 20 (a), (b) に示した垂直速度 u_z , 温度 θ の xy 面 (高さ $d/2$) における等値線によってわかる。同様の現象は同じ量の等値線図、図 21 (a), (b) にも現われている。さらに R を上昇し、 $R = 25000$ における同様な等値線図を図 22 (a), (b) に示す。これと図中の A, B, C, D における u_z, θ の局所的な時間変動から、Lipps はここでは流れが乱流化していると結論した。simulation の時系列が十分長く計算できなかったためか、PSD の計算は行っていない。最近 McLaughlin-Orszag によって、この方向の計算がさらに推進された。²⁶⁾ この場合 3 個の基本振動数からなる準周期運動が乱流化している。

ii) Gollub グループの実験結果図 17 でみたように、容器の縦横比が小さい場合には、ロールの空間的規則性が十分大きな R においても存続していることがわかる。そこで基礎方程式 (12)

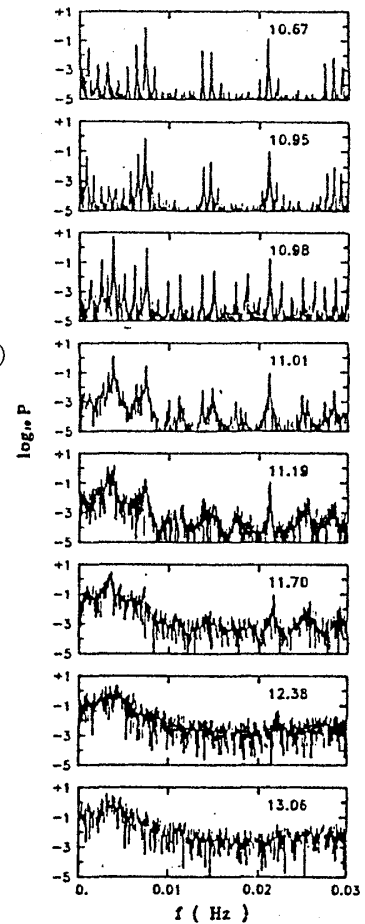


図 19

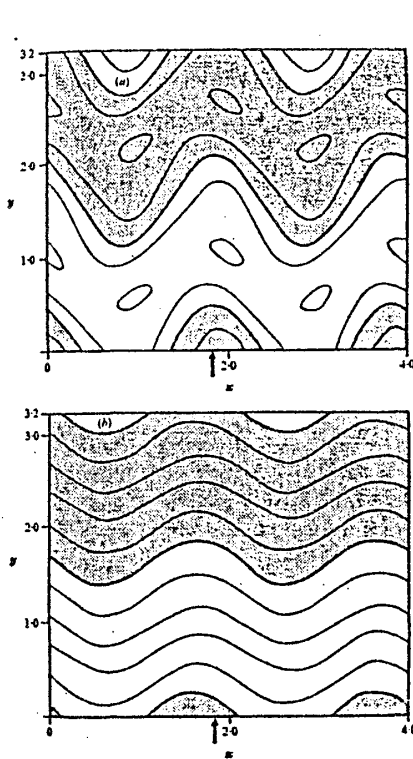


図 20

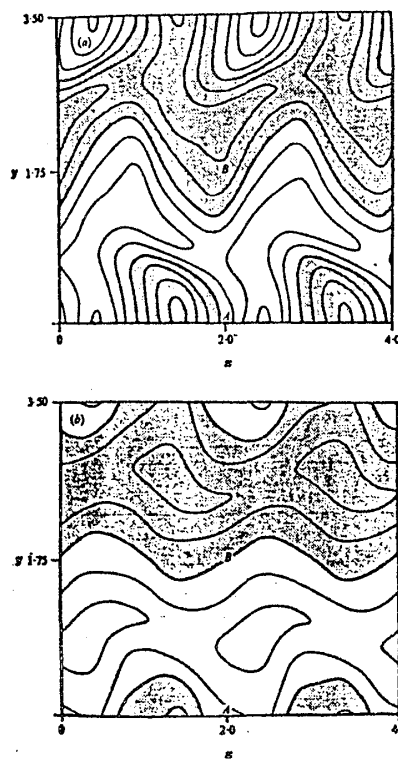


図 21

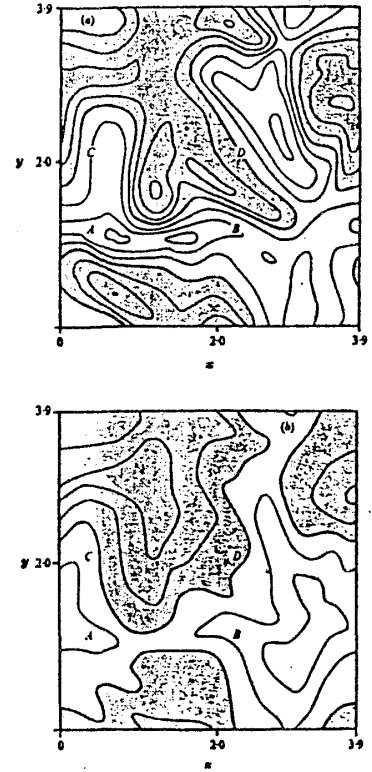


図 22

から Galerkin 法によって、常微分方程式系の模型を導びくことを考える。²⁸⁾ $\Gamma_x = 2$, $\Gamma_y = 3.5$ の直方体中の $\sigma = 2.5$ の流体を考え、速度場に対しては各壁面ですべりなし境界条件、温度場に対しては水平壁・側壁でそれぞれ伝導的・断熱的境界条件を課す。基本流は x 軸に平行軸をもつ 2 個のロールとし、これと振動流を表わすための z 軸方向に軸をもつロールとの重ね合わせで流れの場を表現する：

$$\begin{aligned}
 u_x &= \partial_y \phi_z, \quad u_y = -\partial_z \phi_1 - \partial_x \phi_2, \quad u_z = \partial_y \phi_1; \\
 \phi_1(x, y, z, t) &= \sum_{ikm} \xi_{i,k,m}^{(1)}(t) \chi_i(x/\Gamma_x) \phi_k(y/\Gamma_y) \Phi_{1;m(i,k)}(z), \\
 \phi_2(x, y, z, t) &= \sum_{ikm} \xi_{i,k,m}^{(2)}(t) \Phi_{2;i(k,m)}(x/\Gamma_x) \phi_k(y/\Gamma_y) \chi_m(z), \\
 \theta(x, y, z, t) &= \sum_{ikm} \theta_{i,k,m}(t) \psi_i(x/\Gamma_x) \psi_k(y/\Gamma_y) \chi_m(z). \quad (13)
 \end{aligned}$$

ここで、各展開函数は要求される境界条件を満たすように次の固有方程式 ($|x| \leq 1/2$) で定める：

$$\begin{aligned}
 \partial_x^4 \phi_m &= -\alpha_m^2 \partial_x^2 \phi_m, \quad \partial_x^2 \psi_m = -\beta_m^2 \psi_m, \quad \partial_x^2 \chi_m = -\gamma_m^2 \chi_m, \\
 (D_{p;j,k})^4 \Phi_{p;m(j,k)} &= -(\lambda_{p;m(j,k)})^2 (D_{p;j,k})^2 \Phi_{p;m(j,k)}.
 \end{aligned}$$

ここで、 $(D_{p;j,k})^2 = (\partial_x/G_{3-p})^2 - (\gamma_j/\Gamma_p)^2 - (\alpha_k/\Gamma_y)^2$, $G_1 = \Gamma_x$, $G_2 = 1$; 境界条件は、

$\phi_m = \partial_x \phi_m = \partial_x \psi_m = \chi_m = \Phi_{p;m(j,k)} = \partial_x \Phi_{p;m(j,k)} = 0$ at $x = \pm 1/2$ とする。さらに小さな非 Boussineq 効果を含む密度が $\rho/\rho_0 = 1 - \alpha \cdot (T - T_0) - \alpha_2 \cdot (T - T_0)^2$ で与えられる模型を考え、それを $h = (T_a)_c \alpha_2 / \alpha$ で特徴づける。そこで展開 (14) を用いて、Galerkin 法により時間係数 $\xi_{i,k,m}^{(p)}(t)$, $\theta_{i,k,m}(t)$ の満たす常微分方程式系を導びく。モード $\xi_{ie,10,1e}^{(1)}$, $\xi_{io,10,1e}^{(2)}$, $\xi_{ie,10,1o}^{(1)}$, $\xi_{io,10,1o}^{(2)}$, $\theta_{ie,2e,1e}$, $\theta_{ie,2e,1o}$, $\theta_{ie,1e,1e}$, $\theta_{ie,1e,1o}$, $1 \leq i \leq 6$ (e, o は函数の偶奇性を示す) を含む全体で 48 変数方程式系を、 $h = 0.01$ の下に計算機で時間積分した結果を、 $\xi_{10,10,1e}^{(2)}$ の PSD により図 23 に示す。 r の増加と共に、周期的運動 (振動数 p_1) が周期倍カスケードにより、少くとも $p_1/16$ 迄発生した後乱流化している。

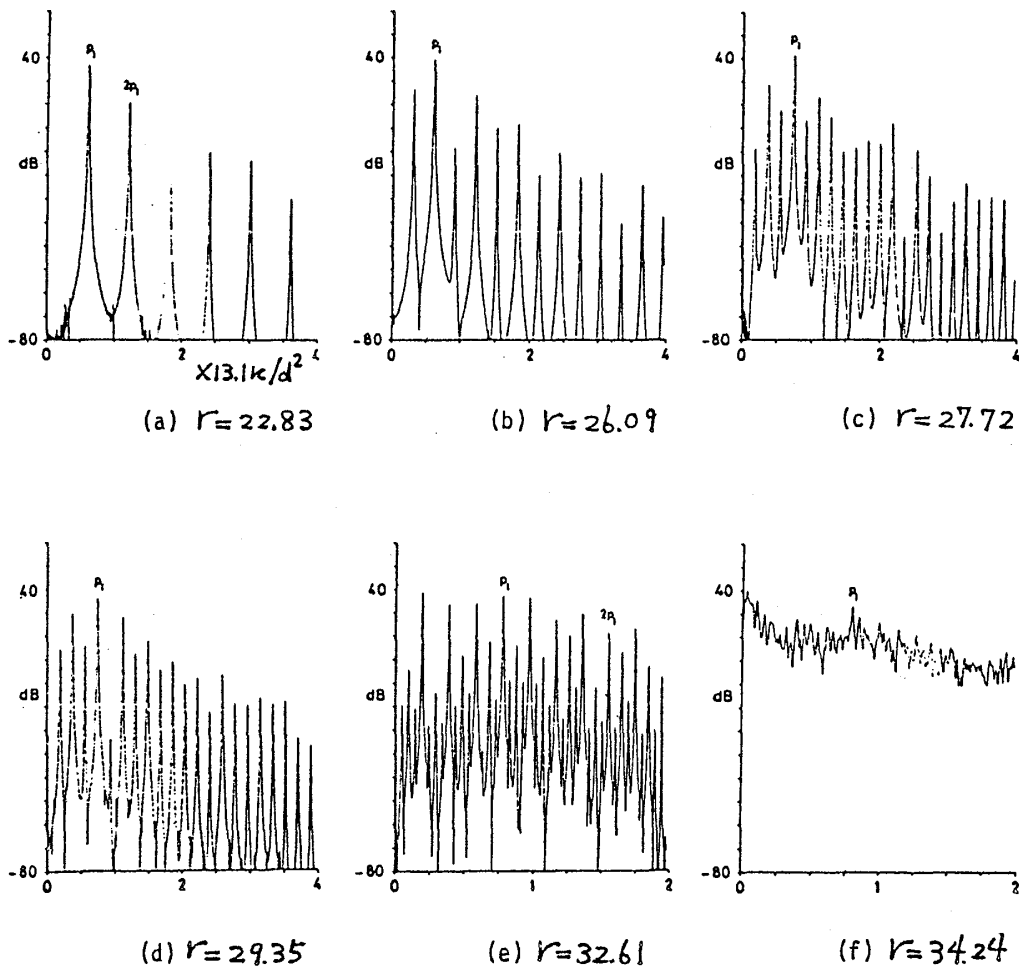


図 23

Bénard 対流に関しては、まだ述べるべきことが沢山あるがここでは省略する。

§ 2.3 平板境界層流

一様流中に流れの方向と平行におかれた半無限平板に沿って生ずる流れは Blasius によって求められた (1908)。一様流 U_0 の方向を x 軸、平板に垂直方向を y 軸とした時、平板の前縁からの距離 x に対応する Reynolds 数 $R_x = xU_0/\nu$ とすると、点 x, y における Blasius 流 $\mathbf{U} =$

$(U_x, U_y, 0)$ は相似変数 $\eta = \sqrt{R_x} y/x$ の巾級数の形で求められている。いま U_y は小として無視する近似（平行流の近似）を行うと、この Blasius 主流に対する微小乱れ $\mathbf{u} = (u_x, u_y, 0)$ の従う方程式は、 x 方向に正弦波的伝播の形をもつ流れ函数 $\Psi(x, y, t) = \varphi(y) e^{i(\alpha x - \beta t)}$ に対して

$$(U_x - c)(D^2 - \alpha^2)\varphi = -i(\alpha R)^{-1}(D^2 - \alpha^2)^2\varphi \quad (14)$$

となる（Orr-Sommerfeld 方程式）。ここで $c = \beta/\alpha$ ，長さは境界層厚さ δ を用いて無次元化され、 $R = U_x(\delta)\delta/\nu$ 。この方程式を要求される境界条件のもとに解き、固有解の存在条件から、実数の各波数 α に対して、 $\text{Im}\beta = 0$ となる R の値が計算され、中立安定曲線が得られる（Tollmien, 1929）。この際 $\text{Im}\beta > 0$ で生ずる 2 次元線型増幅波は Tollmien-Schlichting 波とよばれ、10 年以上経た後 Dryden-Schubauer-Shkramstad (1943) により低雑音風洞を用いた実験において初めて見出された。図 24 は TS 波の増幅・乱雑化の過程を示す彼らの実験

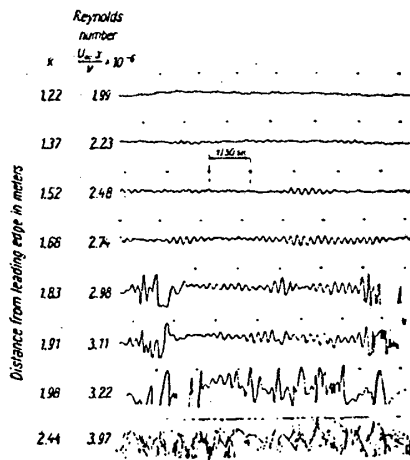


図 24

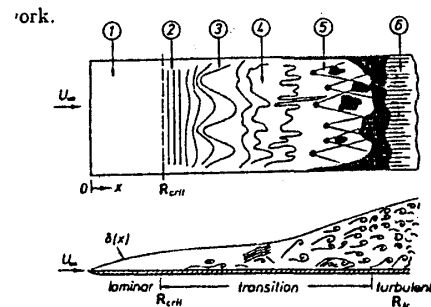


図 25

結果であり、図 25 はその後の実験により知られた遷移過程を示す White による模式図である。²⁹⁾ ②における 2 次元の TS 波は、③で 3 次元のとなり縦渦を生ずる。さらに④では波動に spike とよばれる切込みが生ずるようになり、⑤では空間的に速度乱れの激しい部分が局在的に点在し、いわゆる乱流斑点（turbulent spot）を形成し、⑥ではこれらの空間的重なりあいが出て全

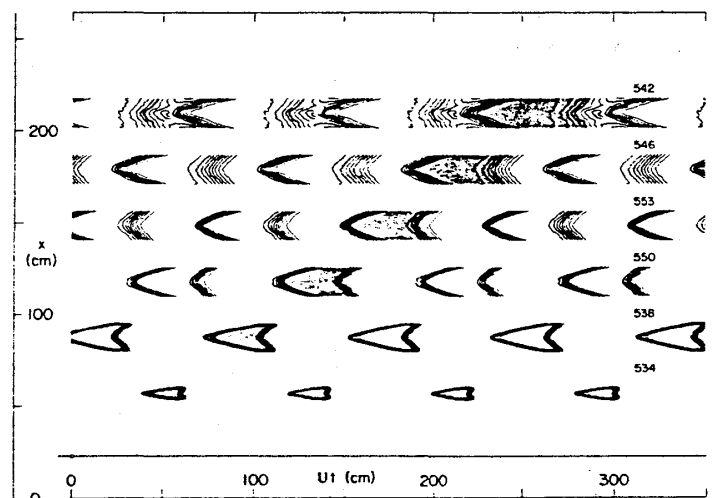


図 26

体が乱流化していく。図 26 に乱流斑点の観測例を挙げる。³⁰⁾ 横軸は時間・縦軸は x 方向の距離で、乱流度の強さの等値線によって乱流斑点が示されている。この遷移過程の理論的理解は、③までの弱非線型理論によるものを除いて、あまり進展していないようである。

§ 2.4 2次元 Poiseuille 流

2次元 Poiseuille 流に対して、放物線型の主流に対する線型不安定性問題は Orr-Sommerfeld 方程式を用いて中立曲線が計算され (Lin, 1945), 対応する乱れの成長に関する精密な実験も近年行われた (Nishioka-Iida-Ichikawa, 1975)³⁷⁾ さらに最近 Orszag-Kells によりこの流れに対する numerical simulation が行われたのでそれを簡単に紹介する。³¹⁾ 基礎方程式は、(7)を変型して渦度 $\omega = \text{rot } \mathbf{v}$, 圧力 $\Pi = p + |\mathbf{v}|^2/2$ を用いて、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \times \omega(\mathbf{x}, t) - \nabla \Pi(\mathbf{x}, t) + \nu \Delta \mathbf{v}(\mathbf{x}, t), \\ \nabla \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) &= 0 \end{aligned} \quad (15)$$

の形に書く。流れの方向を x 軸、溝の幅・高さ方向を y, z 軸にとり、流れは直方体 $0 \leq x \leq X$, $-1/2 \leq y \leq 1/2$, $-1 \leq z \leq 1$ 中にとり、 x, y 方向には周期的境界条件を課す。速度場を Chebyshev 多項式 $T_p(z) = \cos(p \cos^{-1} z)$ を用いて

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \sum_{|m| < M} \sum_{|n| < N} \sum_{p=0}^P \mathbf{u}(m, n, p, t) \exp \left[i 2\pi \left(\frac{mx}{X} + \frac{ny}{Y} \right) \right] T_p(z) \quad (16)$$

の形に展開し、成分 $\mathbf{u}(m, n, p, t)$ に対する方程式系を導びき、その時間発展を初期速度は $U = (1 - z^2, 0, 0)$ と Orr-Sommerfeld 方程式解の重ね合わせとして、計算機を用いて追跡する。その際非線型項のたたみこみ和の計算に FFT が用いられた。線型安定理論による微小乱れの成長する Reynolds 数は $R \gtrsim 5772$, 2次元の有限振幅乱れの成長する $R \gtrsim 2800$ で、実測より

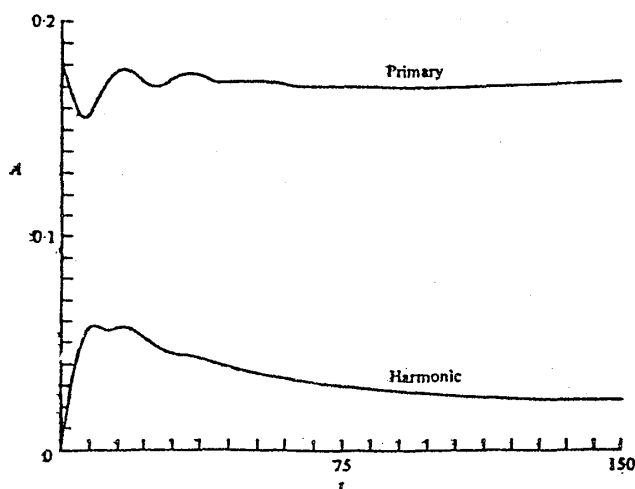


図 27

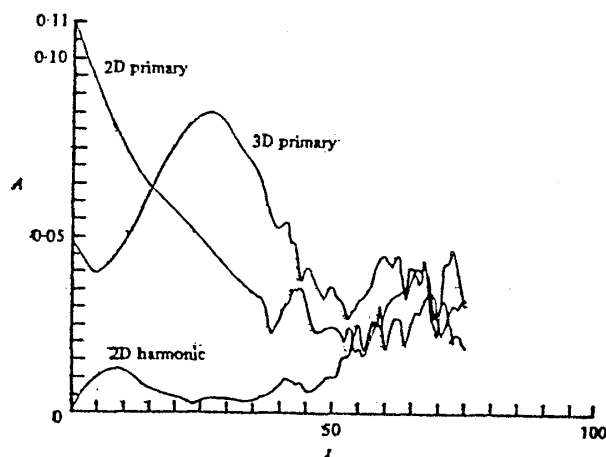


図 28

もはるかに大きい値であることが長い間未解決の問題であった。図 27 に流速場が 2 次元的 ($2M = 32$, $N = 0$, $P + 1 = 33$) の場合, $R = 2935$ で行った計算結果を示す。各モードは何ら乱流的様相を示していない。これに対して図 28 に示す 3 次元的乱れの場合 ($2M = 16$, $2N = 16$, $P + 1 = 33$) に対する $R = 1250$ の計算結果においては, ある時間を経た後乱流化開始の様子が現われているようである。

§3. 発達した乱流

種々の与えられた境界条件のもとで, 乱流場を効率的に計算することは, 工学や気象学などでは重要な課題である。速度場 $\mathbf{v}$, 圧力場 p を平均量とゆらぎに分けて, $\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}} + \mathbf{v}'$, $p = \bar{p} + p'$ とおくと, 平均量 $\bar{\mathbf{v}}(\bar{v}_x, \bar{v}_y, \bar{v}_z)$, $\bar{p}$ の満たす方程式は,

$$\begin{aligned}\partial_t \bar{v}_i + \bar{v}_j \partial_j \bar{v}_i &= \partial_j (-\delta_{ij} \bar{p} / \rho + \nu \partial_j \bar{v}_i - \overline{v'_i v'_j}), \\ \partial_j \bar{v}_j &= 0 \quad (i = x, y, z)\end{aligned}\tag{17}$$

となる (Reynolds, 1895)。ここで Reynolds 応力の項 $\tau_{ij} = -\rho \overline{v'_i v'_j}$ に対して種々の近似式を仮定して, 平均量 $\bar{\mathbf{v}}$, $\bar{p}$ に関して閉じた方程式を導びき, それによって乱流場を計算する試みが数多くなされてきた。最近急速に発展しつつある large eddy simulation とよばれる方法では, 適当なフィルター関数 $\Gamma(\mathbf{x})$ を用いて, 短波長成分を平均化した速度場変数

$$\bar{v}_i(\mathbf{x}, t) = \int \Gamma(\mathbf{x} - \mathbf{y}) v_i(\mathbf{y}, t) d\mathbf{y}\tag{18}$$

の運動を考える。³²⁾ ここで $\Gamma(\mathbf{x})$ としては例えば,

$$\Gamma(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1/(4_x 4_y 4_z), & |x| \leq 4_x/2, |y| \leq 4_y/2, |z| \leq 4_z/2 \\ 0 & , \text{その他} \end{cases}\tag{19}$$

が用いられる。Reynolds 応力に対しては, 例えば渦粘性係数 K を用いて

$$\overline{v'_i v'_j} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \overline{v'_l v'_l} = -K(\partial_j \bar{v}_i + \partial_i \bar{v}_j)\tag{20}$$

の形におき (Smagorinsky), 方程式を閉じさせる。 K は粗視化の格子尺度 4_i が慣性小領域にあるとすると, 次元考察から,

$$K = C^2 (4_x 4_y 4_z)^{\frac{2}{3}} [\partial_j \bar{v}_i (\partial_j \bar{v}_i + \partial_i \bar{v}_j)]^{\frac{1}{2}}\tag{21}$$

の形に仮定される。ここで C は経験的に適当に定める定数である。Deardorff はこの方法を用いて溝の流れの乱流場を計算した。流れの方向を x 軸, 横軸・高さ方向を y, z 軸にとり, 直方

体 $3h \times 0.7h \times h$ を $24 \times 14 \times 20$ の格子に分け、フィルター関数 (19) による平均量方程式を計算機を用いて数値積分した。その際水平方向は周期的、垂直方向は対数壁法則に合うように境界条件が選ばれた。水平面に関する平均量からのゆらぎを $''$ で表わすと、 xz 平面での $\overline{u}''$, $\overline{w}$, $\overline{v}$, $\overline{p}''$ の等値線は図 29 のようになる。最近この問題に対する改良計算が堀内によって行われ、壁付近での burst, sweep などの現象が再現されている^{33), 34)}

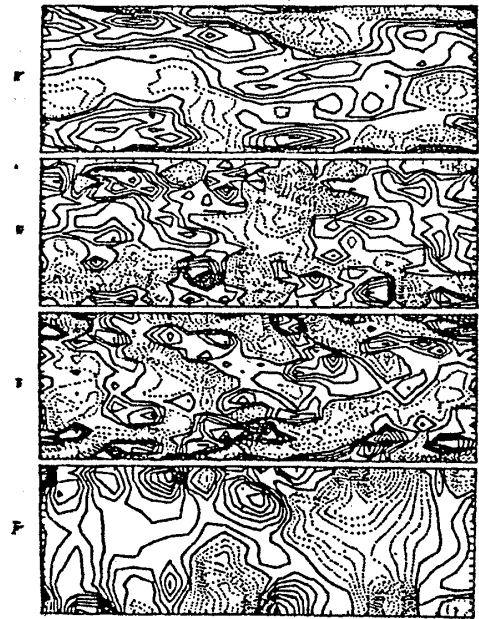


図 29

§4. おわりに

以上乱流研究における computer simulation に関して粗い解説を試みた。乱流発生の研究は、カオスとか strange attractor とかの概念の提出により著しく豊かになり、指標も与えられたと考えられる（例え乱流現象においてその有効範囲はいかに狭いものであるにせよ）。数値計算の大規模化・精密化は今後急速に進むであろうが、そうであればなおさら、それらを整理統括する有効的な概念的枠組も相伴って進展することが期待される。

付記：本解説においては一様等方性乱流に関する研究 (closure theory) など多くの乱流研究の重要な側面について全く触れることができず、その点主題の選択は乱流研究の一部をおおったものにすぎない点をお断りします。

文 献

- 1) P. Billingsley, *Ergodic Theory and Information* (Wiley, 1960).
- 2) V. I. Arnold and A. Avez, *Ergodic Problems of Classical Mechanics* (Benjamin, 1968).
- 3) N. N. Bogoliubov and Y. A. Mitropoliskii, *Asymptotic Methods in Theory of Nonlinear Oscillations* 3rd ed. (Moscow, 1963)
- 4) L. D. Landau, Dokl. Acad. Nauk SSSR **44** (1944), 339.
- 5) E. N. Lorenz, J. Atmos. Sci. **20** (1963), 130.
- 6) Y. Aizawa and I. Shimada, Prog. Theor. Phys **57** (1977), 2146.
- 7) D. Ruelle and F. Takens, Comm. Math. Phys **20** (1971), 167.
- 8) S. Smale, Bull. Amer. Math. Soc. **73** (1967), 747.

- 9) R. M. May, *Nature* **261** (1976), 459.
- 10) P. Collet and J-P. Eckmann, *Iterated Maps on the Interval as Dynamical Systems* (Birkhäuser, 1980).
- 11) M. Feigenbaum, *J. Stat. Phys.* **19** (1978) 25, **21** (1979), 669.
- 12) F. Takens, *Lec. Notes Math.* **898** (1981), 366.
- 13) E. Hopf, *Comm. Pure Appl. Math.* **1** (1948), 303.
- 14) O. A. Ladyzhenskaya, *Sov. Phys. Dok.* **17** (1973), 647.
- 15) P. R. Fenstermacher, H. L. Swinney and J. P. Gollub, *J. Fluid Mech.* **94** (1979) 103.
- 16) R. J. Donnelly, K. Park, R. Shaw and R. W. Walden, *Phys. Rev. Lett.* **44** (1980), 987.
- 17) H. Yahata, *Prog. Theor. Phys.* **66** (1981) 879. and to appear in *Proceedings in IU-TAM Symposium on Turbulence and Chaos* (1983).
- 18) J. P. Gollub, S. V. Benson, and J. Steinman, *Ann. N. Y. Acad. Sci.* **357** (1980), 22.
- 19) A. Libchaber and J. Maurer, *J. de Phys.* **41** (1980) C3-51.
- 20) M. Giglio, S. Mussazi and U. Perini, *Phys. Rev. Lett.* **47** (1981), 243.
- 21) J. Maurer and A. Libchaber, *J. de Phys.* **40** (1979) L-419.
- 22) J. P. Gollub and S. V. Benson, *J. Fluid Mech.* **100** (1980), 449.
- 23) S. Fauve and A. Libchaber, in *Chaos and Order in Nature*, ed. by H. Haken (Springer, 1981) p. 25.
- 24) G. Ahlers and R. P. Behringer, *Prog. Theor. Suppl.* **64** (1979), 186.
- 25) J. B. McLaughlin and P. C. Martin, *Phys. Rev.* **A12** (1975), 186.
- 26) F. B. Lipps, *J. Fluid Mech.* **75** (1976), 113.
J. B. McLaughlin and S. A. Orszag, *J. Fluid Mech.* **122** (1982), 123.
- 27) I. Matsuba, *Butsuri* **35** (1980), 779.
- 28) H. Yahata, *Progr. Theor. Phys.* **68** (1982), 1070, **69** (1983), 1802.
- 29) H. Schlichting, *Boundary Layer Theory*, 7th ed. (McGraw-Hill, 1979).
- 30) D. Coles and O. Savas, in *Laminar-Turbulent Transition* ed. by R. Eppler and H. Fasel (Springer, 1980), p. 277.
- 31) S. A. Orszag and L. C. Kells, *J. Fluid Mech.* **96** (1980), 159.
- 32) J. W. Deardorff, *J. Fluid Mech.* **41** (1970), 453.
- 33) 堀内潔, 乱流現象の解明と制御—理論系 4 班合同研究会報告集 (1982), p. 143.
- 34) P. Moin and J. Kim, *J. Fluid Mech.* **118** (1982), 341.

- 35) H. L. Swinney et al., Phys. Rev. Lett. **51**(1983), 1442.
- 36) A. Libchaber et al., J. de Phys. Lett. **43**(1982), L211.
- 37) M. Nishioka et al., J. Fluid Mech. **72**(1975), 731.

固体電子状態の研究への計算機の利用

東北大・理 森 田 章

1. はじめに

これまでに、私の研究室では半導体、半金属、アモルファス系の研究に関係してかなりの計算機利用を行ってきた。半導体、半金属の研究ではこれらの物質のバンド構造とそれから導かれる物理的性質、不純物準位、結晶構造の安定性に関する問題（例えば、安定構造は何か、その格子定数や弾性定数の値、圧力による相転移 etc.）などを問題にしてきた。アモルファス系の研究では不規則合金や液体金属中の電子状態と電子輸送係数の計算や2次元モデル液体金属によるこれらのシミュレーションなどを行って来た。ここではこれらの研究のうちで黒リンに関する研究を例にして我々の計算機利用の実態を次章で述べる。つぎに第3章で固体電子理論への大形計算機利用の現状と展望について私見を述べることにする。

2. バンド計算

我々はこれまで Si, Ge などのⅤ族半導体や, As, Sb や SnTe, PbTe などのⅤ族半金属やⅣ-Ⅵ族化合物半導体の電子構造の研究を主として擬ポテンシャル法を用いて行ってきた。この種の研究は一般にかなりの計算機利用を必要とするので、使用可能な時間と研究費の範囲に収めるためにはしばしば計算精度を落したり、半定量的な計算で我慢する必要が生じた。このようなことを行うには勿論色々な物理的考察を必要とし、そのような努力は研究者にとって必ずしもマイナス面のみでは無い。しかし、現実にはこの様な努力によって得られた結果も、米国などにおいて大型計算機のブルトナー的使用によって得られた成果の前では影が薄くならざるを得なかった。我々はこの様な過去の経験にかんがみ、現状で我々が取りうる方策の一つとして、興味ある物質でしかも他所ではまだ手掛けていないものを取り上げることを考えた。具体的には黒リンを取り上げた。