

12-NA01

雲マイクロ物理過程と乱流混合との相互作用の計算科学的解明

後藤俊幸（名古屋工業大学）

概要 雲マイクロ物理プロセスを適切に取り込んだ雲マイクロ物理シミュレータを開発した。約 1m^3 の立方体内で雲粒子数 2^{27} の大規模シミュレーションを実行し雲の初期成長過程を解析した。雲粒子は小クラスターを構成し、そのクラスターが非一様に分布する階層構造が見出された。この非均一な空間分布は雲粒子の慣性ととも増大し、雲粒子集団のラグランジュ的特性時間が乱流のコルモゴロフ時間であることを見いだした。一方、乱流場は高波数側から雲粒子により非等方な励起を受け、やがて巨視的な非等方性に成長する新しい乱流励起過程を見出した。微小雲粒子生成を水分子レベルから解明する時間反転対称性をもち、高速かつエネルギー保存性に優れた分子動力学アルゴリズム (FT 法) を開発した。さらに水分子のもつ電荷によるクーロン相互作用をオーダー N で取り込む多重極展開スキームを FT 法に組み込んだコードの開発にも成功した。数 10 ナノメートルの水滴の衝突シミュレーションに応用し水滴成長の解析が可能になった。

1. 研究の目的と意義

目的

地球温暖化や気候変動の問題を考える上で極めて重要な要素でありかつ多くの謎に包まれているのが雲である。雲の分布によって地球のアルベドが変化し地球の熱収支に大きな影響を与えるので、雲物理の解明と予測は地球環境問題におけるグランドチャレンジ的な問題である。雲中を航空機が通過する際に大きく揺れることからわかるように、雲中には乱流が存在し、これが雲粒子の衝突、合体、成長、降雨の促進などと深くかかわっている。しかし、その重要さにも関わらず雲の発生、成長、移動、降雨、消滅などや乱流との相互作用の理解が十分ではない。

本研究においては、雲の発生と成長の初期段階における乱流混合と雲粒子の相互作用などをはじめとする雲マイクロ物理素過程の解明にむけての基礎計算技術を、ペタスケールコンピューティングによる解析を視野に入れ、計算機科学の最新の知見を取り込みながら開発することを目的とする。もとより、すべてを解明することは大きな困難を伴うので、雲微物理と呼ばれる雲粒子生成、乱流による水蒸気混合、凝結、雲粒子の集団運動までを視野に入れる。 1m^3 程度までの領域を念頭におき、乱流状態にある空気塊がどのように雲粒子を形成するのか、雲粒子同士の衝突や合体が乱流と

重力の作用によりどの程度促進されるのか、それらの空間分布などを大規模並列計算によって解析を行う。さらに、これまで手の付けられてこなかった雲発生のごく初期におけるナノスケール雲粒子（水滴）の生成・衝突・蒸発などの相変化にかかる素過程を分子レベルから解明する高速かつ高精度な分子動力学計算手法の開発を行い、これを現象の解明に応用する。

乱流と雲粒子、雲粒子同士の相互作用、乾燥空気と湿潤空気の乱流混合を正しく解析するためには、乱流の間欠性による高渦度領域の微細構造（約数 $100\ \mu\text{m}$ ）までを解析するオイラー的数値計算と、 10^9 個以上の数 μm の粒子運動を追跡するラグランジュ的数値計算法が要求される。また、ナノスケール水滴生成と成長・合体の分子レベルからの解明においても、構造を持った水分子集団の分子動力学に特化した高速かつ高精度な計算手法が必要である。そして、これらの数値計算をきわめて大きな並列計算機上で、むらなく効率よく実行させるための計算技術を開発する必要がある。そのため、ペタスケールコンピューティングに向けて流体方程式専用の 3 次元 FFT や高精度差分計算法、時間反転対称性やエネルギー保存性に優れた計算法を、計算機科学の専門家の協力を得てプロセッサアーキテクチャの詳細まで考慮に入れて開発することを目的とする。

意義

雲の生成から消滅までには多くの物理過程が存在し、そのスケールは 10 km から数 μm まで 10 桁以上にわたる。また、雲粒子の生成における分子レベルでの素過程までを含めるとさらにそのスケール領域は広がる。その重要性にも関わらず実験的、観測上の様々な制限から雲に関するデータは十分でなく、雲物理の基本的解明ができていない。

ペタスケールコンピューティングでは数 m から数 μm 程度までの現象を対象とした雲の物理過程を再現できる雲マイクロ物理シミュレータを構築する。これにより雲を計算機内に作り出すことができる。雲発生の詳細が直接シミュレーションによって明らかにされることは、これまで観測や実験では得られなかったデータや知見をもたらし、さらに大きなスケールでの雲物理解明と予測のための物理モデルの構築に大変役に立つ。

大規模計算の観点からは、2 種類の計算方式（連続体計算と粒子計算）が同時進行で動くことになり、きわめて多数のノードを持つ計算機の効率的な利用法、あるいは異なる種類の計算機の同時的使用が求められる。連続体部分について、流体方程式専用に 3 次元 FFT を開発することは、他の分野への応用も可能であるので大変重要である。また、雲粒子の相互作用や流体と雲粒子の相互作用は物理空間で記述されるので、高精度差分解法は雲物理解明には欠かせない数値計算法であり、スケラビリティのよいコードを開発することはペタスケールマシンの利用に当たって重要である。

さらに、質点ではなく構造も持つ水分子にも適用できる高速な分子動力学計算手法の確立は、水分子の巨大集団としての微小な水滴形成・消滅の分子レベルからの解明だけでなく、氷を含めて水が関与するあらゆる現象の分子レベルからの解明においても強力かつ有用な手段となりえる。

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

(1) 共同研究を実施した大学名と研究体制

名古屋大学
研究体制

後藤俊幸	名古屋工業大学 創成シミュレーション工学専攻	総括 Navier-Stokes 用大規模並列化 3 次元 FFT の開発、乱流スカラー輸送ハイブリッドコード開発 雲粒子モデルの開発
尾形修司	名古屋工業大学 創成シミュレーション工学専攻	水分子大規模集団の分子動力学計算手法を大規模並列計算機に向けて開発
渡邊威	名古屋工業大学 創成シミュレーション工学専攻	Navier-Stokes のオイラー・ラグランジュコード、ハイブリッドコード開発 雲粒子モデルの開発
松尾啓志	名古屋工業大学 情報基盤センター長	大規模並列計算における通信部分の高速化技法の開発
石井克哉	名古屋大学情報基盤センター 大規模計算支援環境研究部門	大規模並列計算における高精度差分コード開発
小林亮	名古屋工業大学 創成シミュレーション工学専攻	水分子大規模集団の分子動力学計算手法を大規模並列計算機に向けて開発
石原卓	名古屋大学大学院 工学研究科計算理工学専攻	Navier-Stokes のオイラー・ラグランジュハイブリッドコード開発

(2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

(3) 当公募型共同研究ならではの事項など

本研究では、まず第 1 に大型並列計算機が十分使える環境が必須であり、「京」と同様のアーキテクチャでコード開発を行うことが肝心と考える。名古屋大学情報基盤センターにある Fujitsu FX1 はその条件を満たしている。高効率なスキームとプログラム開発にはマシンの特徴を十分に考慮することが必要不可欠であるのでセンターとの共同作業が欠かせない。極めて多数のプロセッサ間通信については計算機科学の専門家の協力が必要である。また、雲のマイクロ物理過程は多階層にわたるものであり、分子動力学(MD)の知識と経験をもとにした雲粒子形成や合体の MD シミュレーションとそこからのより巨視的なサイズへの接合としての数理モデル化や数値的接合が必要である。雲マイクロ物理解明においては、これらすべての要素を取り入れた研究チームを構成し研究開発する必要がある、この目的達成のためには本拠点公募型共同研究はより適したものになっている。また、研究対象は異なっても、共通する数理モデリングや大規模並列計算のための最新の知識について情報交換ができるという点で、この公募に応募することは大いに意義のあることである。

3. 研究成果の詳細と当初計画の達成状況

(1) 研究成果の詳細について

今年度前半の研究成果は大きく分けて 2 つある。その第 1 は、雲粒子集団と乱流輸送との相互作用を解析するためのスペクトル法による乱流スカラー輸送コードの連続体部分について MPI と Open MP によりさらなる高速化を行ったこと、ハイブリッド乱流スカラー輸送コード(速度場にはスペクトル法、スカラー場には結合コンパクト差分法を用いる)に雲粒子動力学部分を実装して、2 種類の計算手法による雲マイクロ物理過程のシミュレーション実行が可能になったことである。第 2 は、露点付近での凝結・蒸発による雲粒子の生成・消滅をミクロスコピックな視点で解明するため、ナノスケールオーダーの水滴(雲粒子)の分子動力学のための大規模スパコンに適した並列計算プログラムを開発し、これを応用してナノスケール水滴の衝突シミュレーションを行ったことである。

後半では、前半に開発された雲マイクロ物理シミュレーションを 25.6 cm^3 の立方体領域(格子点数 128^3)における小規模計算から 102.4 cm^3 の立方体領域(格子点数 1024^3)へと拡大して大規模シミュレーションを行い、雲成長の極初期過程での様々なデータを取得し解析を始めたことが重要な成果としてあげられる。雲粒子の衝突過程を取り入れるプロトタイププログラムを作成したこと、高シュミット数の乱流スカラー輸送現象をさらに高解像度で実行し、波数空間で遠拡散領域におけるスカラー揺らぎスペクトルをハイブリッドコードを駆使して解析したこと。さらに、水分子間のクーロン相互作用を取り入れるため多重極展開法を用いたコードを開発し水分子集団の分子動力学の高速計算法と融合させることに成功したことも重要な成果である。

【1】雲粒子と乱流輸送

層積雲中の乱流により輸送される希薄な雲粒子の運動・成長を考える。雨の降らない雲を考えるため、ミリメートル以上の水滴や氷の成長、降雨は考えない。浮力にはブシネスク近似を用い、乱

流場は Navier-Stokes 方程式、連続の式、熱と水蒸気の方程式で与えられるとする。雲粒子は半径 $R_j(t)$ の球で R_j^2 に比例する緩和時間 $\tau_j(t)$ を持ち、流体と雲粒子の相対速度に比例した粘性抵抗と重力を受けて運動するものとする。また、雲粒子半径は、周囲の水蒸気の過飽和度 S に応じて、凝結 ($S > 0$) による成長または蒸発 ($S < 0$) による縮小を受け、雲粒子の衝突は当面ないと仮定する。

[1-1] 乱流輸送方程式ソルバーの MPI+Open MP による高速化

スペクトル乱流スカラー輸送コード、ハイブリッド乱流スカラー輸送コードの両方、および両者に共通の 3 次元 FFT はこれまで MPI と自動並列の併用で開発してきた(論文[1])。「京」などの大規模並列計算機上で実行することを念頭に置き、これらのコードを MPI と Open MP による高速化を Fujitsu FX1 上で行った。コード全体は乱流輸送部分と雲粒子動力学部分からなるが、まず、乱流輸送部分について変更を行った。

(1) 粒子を含まないスペクトル法による乱流スカラー輸送コードにおいては、 512^3 の格子点数で 16 ノードの場合に約 1.18 倍の高速化がはかられた。512 ノード、2048 コアでも問題なく稼働することを確認した。

(2) 粒子を含まない乱流スカラー輸送ハイブリッドコードにおいては、約 2.8 倍という大きな高速化を達成した。3 次元分割したノード上で、結合コンパクト差分法において用いられる連立方程式解法部分の MPI+OpenMP 化が大きく寄与した。

[1-2] ハイブリッドコードによる高シュミット数のスカラー揺らぎのスペクトル

雲粒子はその半径が数 μm から数 $100 \mu\text{m}$ まで幅広く分布する。この雲粒子半径分布を予測するには、乱流混合による雲粒子を取り巻く温度場や水蒸気場のゆらぎの微細構造が正しく解像される必要がある。一方、乱流混合においては、非線形性(レイノルズ数)の強さに応じてスカラー場の散逸界面構造はいくらでも小さい構造をとるよう

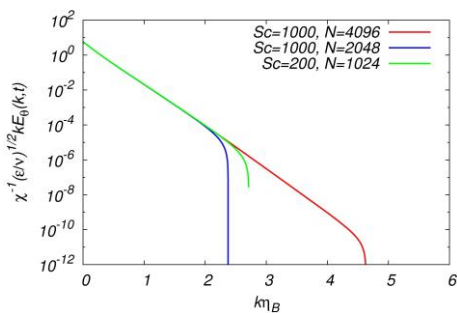


図 1. 遠拡散領域におけるスカラースペクトル $E_0(k)$ の指数的減衰. $R_\lambda=42$.

になり（間欠性）、数 $100 \mu\text{m}$ 程度の厚さの複雑な界面を持つようになるため、乱流スカラー場の微細構造を十分な精度で解像する必要がある。

高シュミット数 ($Sc=v/\kappa$ =分子動粘性係数/分子拡散係数) における粘性・移流領域から遠拡散領域でのスペクトル $E_0(k)$ を求める問題は高速化されたハイブリッド乱流スカラー輸送コードの試金石である. $E_0(k)=C_B \chi (\epsilon/\nu)^{-1/2} k^{-1} f(k\eta_B)$ であることが理論的に導かれている. ϵ と χ はそれぞれ乱流の単位質量あたりのエネルギー散逸率とスカラー散逸率であり, C_B は普遍定数と考えられている無次元数であり $f(x)$ は遠拡散領域 ($x \rightarrow \infty$) で急速に減衰する関数である. 乱流レイノルズ数 (R_λ) が 42 の定常乱流で, $Sc=200, 1000$ で速度場には $Nv=256^3$, スカラー場には $N_0=2048^3$ の格子点数で乱流スカラー方程式を長時間積分（巨視的渦時間で 72 以上）し $C_B=5.7$ を得た. この値は実験値や他の数値計算結果よりも大きい. 低波数側でのスカラー揺らぎの励起の仕方によって C_B が変化することは, C_B が非普遍的であることを意味する. さらに, 遠拡散領域でのスカラースペクトルを求めるために世界最大の格子点数 4096³ に拡大して計算を行った. その結果, 図 1 に示すように, 遠拡散波数領域の深いところまで指数的減衰であることがわかった. さらに, 乱流場のストレインの確率密度関数の非正規性と結び付けることにより指数的減衰は乱流場の間欠性によることを明らかにした. これらの高解像度と長時間積分による解析はハイブリッドコードの高速化により初めて達成できたものである.

[1-3] 雲粒子分布と乱流場のラグランジュ相関

雲粒子は半径の 2 乗に比例した特性時間 τ_p を持つ. 一方, 雲乱流における最小渦（半径数 $100 \mu\text{m}$ 程度）の特性時間はコルモゴロフ時間 τ_η で与えられ, 両者の比はストークス数 $St=\tau_p/\tau_\eta$ と呼ばれる. ストークス数が大きいほど粒子の慣性の効果は大きくなる.

ハイブリッド乱流スカラー輸送コードに粒子追跡プログラムを新たに実装し, 粒子半径をパラメータとして ($10, 20, 100 \mu\text{m}$) 200 万個の粒子を定常乱流中に分散させた. その結果, St が大きくなるにつれ, 分布が非一様になることがわかった. 渦度が大きいところでは粒子はその慣性により渦中心から周辺に追いやられ, ストレインの大きいところに局在するようになる. そこで, 流体と共に移動して渦度やストレインがどれほど同じような値を維持するかを示すラグランジュ的自己相関関数を計算した. その結果, 相関関数の特性時間がコルモゴロフ時間 τ_η であることがわかった.

[1-4] 雲粒子の成長とレイノルズ数の影響

乱流スカラー輸送スペクトルコードを用いて雲の初期成長過程を解析した. H24 年度前半では, それまでの $(25.6)^3$ の立方体領域を $(102.4 \text{ cm})^3$ に拡大した試験的な計算を行ったが, 後半ではこの計算を本格的に推し進め, いくつかの条件のもとで乱流レイノルズ数の大小による乱流と雲粒子の相互作用の変化を解析した. 立方体内に厚さ $1/3$ の水平な過飽和水蒸気相を考え, この中に初期半径 $10 \sim 20 \mu\text{m}$ の雲粒子を 3 千万個 (2^{25}) から最大で約 1 億 3 千万個 (2^{27}) ランダムに分散させた. 雲粒子密度は 1cm^3 あたり約 31 から 125 個で, 後者は観測値と同程度であり, これを一定に保ってレイノルズ数と過飽和度を変化させ, 雲粒子半径の平均値, 半径分布, 空間分布, 乱流の非等方性や運動エネルギースペクトルへの寄与等を解析した. 初期過飽和度は, 雲粒子集団が一様に分散して平衡状態になったと仮定した時, 過飽和（雲粒子は太る）か未飽和（痩せる）になるよう設定し, レイノルズ数は $R_\lambda=92, 252$ の 2 種類を主に解析した.

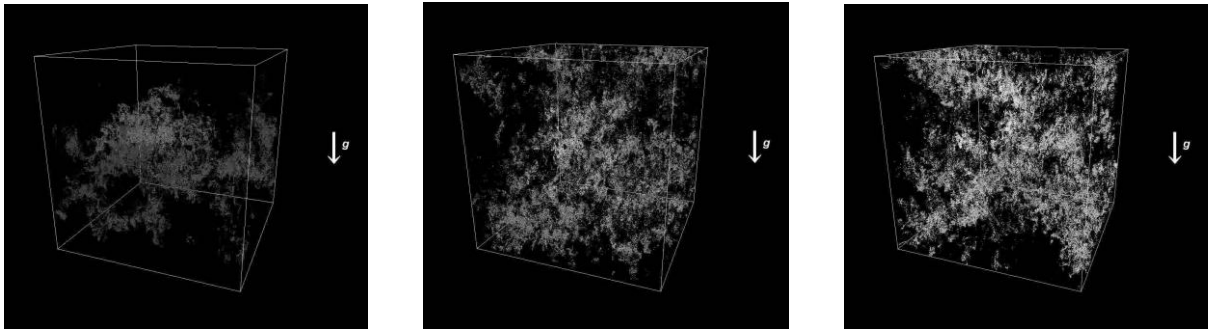


図 2. 乱流中の雲粒子の成長. 左から 時刻 1, 5, 10 秒. 雲粒子数 2^{27} 個からランダムに 10 万個取り出し, 半径が $20 \mu\text{m}$ 以上ものを半径に応じてグレーから白に可視化. 雲粒子集団は下降しつつも, 空間内にクラスターを作って成長. 平均雲粒子密度 $125/\text{cm}^3$, 乱流レイノルズ数 $R_\lambda=252$, 格子点数 $N=1024^3$.

図 2 は, 平均雲粒子密度 $125/\text{cm}^3$, 乱流レイノルズ数 $R_\lambda=252$, 格子点数 $N=1024^3$ で計算した乱流中の雲の初期成長を示したものである. 雲粒子が平均として成長するように初期条件を設定した場合であり, 2^{27} 個の雲粒子からランダムに 10 万個選び, 半径 $20 \mu\text{m}$ 以上ものを半径に応じてグレーから白に可視化してある. 左から 時刻 1, 5, 10 秒である. 雲粒子集団は時間経過とともに成長し, 乱流により領域全体に分散していくが, やがて重力的作用により平均として沈降が卓越するようになる. 興味深いのは, 雲粒子集団が小さなクラスターを構成し, それらがさらに大きな集団を作って乱流中に非一様に分布する階層構造を持つことである. これは低レイノルズ数のときには見られなかった特徴であり, 今後乱流中の渦度やストレイン分布の間欠性との関連性を解析していく. 雲粒子の空間分布の非一様性は動径分布関数

$$g(R) = \frac{G(R)}{4\pi R^2 n_d \Delta R}$$

によって表される. ここで $G(R)$ は半径が R と $R+dR$ の間の球殻内に含まれる雲粒子の数であり, n_d は平均雲粒子密度である. 図 3 は, $g(R)$ の時間変化を示したものである. 時刻 $t=0$ では, 雲粒子は中央の $1/3$ の厚さの層内に一様に分布しているので層内にある R については $g(R)=\text{一定}$ である. 時間経過とともにべき的にふるまうことがわかる. べき的分布は, 雲粒子分布がフラクタル的であることを示唆している. 図 4 は, 平均雲粒子密度が $31/\text{cm}^3$ の場合の平均雲粒子半径の分布におけるレイノルズ数の影響を比較したものである. 雲粒子

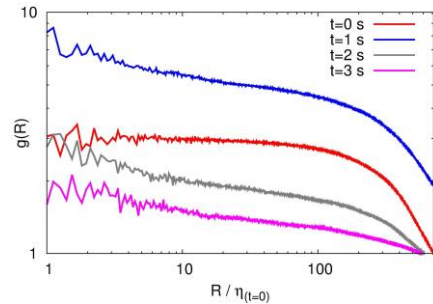


図 3. 動径分布関数の時間変化. べき的振る舞いを示す. $R_\lambda=252$.

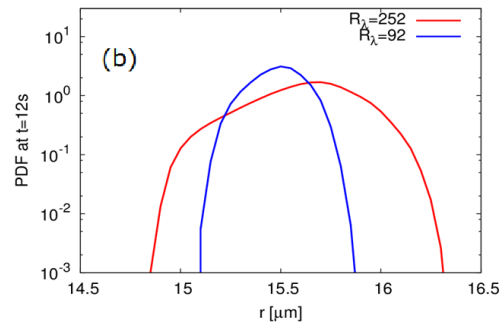


図 4. 雲粒子半径分布におけるレイノルズ数の効果. 赤: $R_\lambda=92$, 青: $R_\lambda=252$.

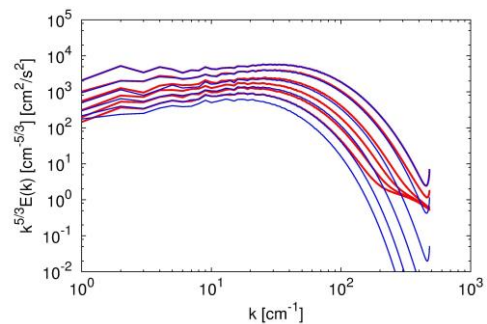


図 5. 乱流エネルギースペクトル $k^{5/3}E(k)$ の時間変化, 赤: 雲粒子あり, 青: 雲粒子なし. 格子点数 1024^3 , 雲粒子数 $N_p=2^{25}$, $R_\lambda=252$.

分布はレイノルズ数が高いほど広がる傾向にある. また, レイノルズ数が高い方が雲粒子半径の成長は速いように見える. しかし, これは雲粒子数密度や過飽和水蒸気分布によっては同程度になることもあり, 今後さらに解析する必要がある.

る。これまでの結果からわかることは、拡散過程による雲粒子半径の成長は $10 \mu\text{m}$ 以上ではかなり遅いということであり、雲粒子の衝突が重要であることを示唆している。拡散過程は雲粒子の縮小や蒸発において支配的となる。

雲粒子が乱流に及ぼす影響をみることは重要である。水蒸気の凝結あるいは雲粒子の蒸発により浮力が生じ、これにより鉛直方向の速度場が励起される。このため、速度場の非等方性が小さいスケールで発生し、これが次第に巨視的なスケールにまで伝搬する。図 5 は減衰乱流の運動エネルギースペクトルに $k^{5/3}$ をかけた $k^{5/3}E(k)$ を、雲粒子がない場合とある場合についてプロットしたものである。雲粒子がある場合、初期時刻には低波数側でコルモゴロフスペクトル(水平)となっている。時間の経過とともに高波数側から減衰が鈍くなり、それが低波数側に伝搬することが確認できる。高レイノルズ数での非等方なスペクトルについても解析が行われた。

【2】ナノスケール雲粒子の分子動力学

[2-1] 水分子クラスターの分子動力学

ナノスケールにおける超微細な水滴(雲)粒子の凝結や蒸発、衝突、氷からの融解などを解析するため、100 万分子数レベルでの水分子クラスター同士の衝突シミュレーションのための分子動力学アルゴリズムを開発した。有限時間ステップにおいても時間反転対称性があり、既存のアルゴリズムにくらべて計算ステップ数が少なくシンプルな剛体分子動力学アルゴリズム、Fast Time-reversible (FT) 法を考案した。図 6 に示すとおり、様々な計算機について、FT 法が既存の計算法に比べて高速であること、またエネルギー保存性にも優れていることを実証した(論文[2])。特に、エネルギー保存の観点からこれまで最良とされてきた複雑なシンプレクティック法では、5fs 程度以上の比較的長い時間ステップにおいてエネルギー保存性が急に悪化するのに対して、FT 法では悪化の度合いが少ない利点があることが分かった。我々のシミュレーションの対象系は、多数の水分子から成っ

Algorithm	Computation timing (10^{-8} s)		
	Core i7 ^a	SPARC ^b	Xeon ^c
FT1	7.2	20	9.5
FT2	5.7	19	8.8
Symplectic	21	52	29
MN ^f	11	65	15
NET ^g	7.5	26	12

^a3.1GHz Intel Core i7 950 with Intel Fortran compiler Ver. 12.0, option = "-fast."

^b2.5GHz Fujitsu SPARC64VII with Fujitsu Fortran compiler, option = "-Kfast."

^c3.0GHz Intel Xeon E5472 with Intel Fortran compiler Ver. 11.1, option = "-fast."

^fMatubayasi-Nakahara algorithm.³ [J. Chem. Phys. 110, 3291 (1999)].

^gNET algorithm with one time iteration.¹⁰ [J. Phys. Soc. Jpn. 80, 114002 (2011)].

図 6. 開発した Fast Time-reversible 法 (FT1, FT2) と既存計算法との計算時間に関する比較。

クーロン力に関する $O(N)$ の高速多重極計算法

● $O(N^2)$ の直接計算法: $V = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \frac{q_i q_j}{|r_i - r_j|}$

● $O(N)$ の高速多重極計算法:

ポイント1. 遠方クーロン場の多重極係数セットとしての取り入れ:

$$V(r) = \sum_{i=1}^N \frac{q_i}{|r - r_i|} = \sum_{l=0}^{l_{\max}} \sum_{m=-l}^l \left[\sum_{i=1}^N q_i r_i^l Y_l^m(\theta_i, \phi_i) \right] \frac{Y_l^m(\theta, \phi)}{r^{l+1}}$$

ポイント2: $O(N)$ 個の遠方微細セルを中心とした多重極係数セットに関する $O(N)$ の階層的計算:

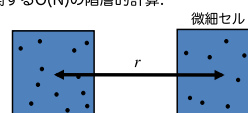


図 7. 分子間に働く相互クーロン力に関するオーダー N の高速多重極計算法の概要

ているが、個々の水分子中では水素原子と酸素原子との間で電荷移動が顕著である。このため、多数の原子が持つクーロン電荷間の相互作用力を高速に計算することが必要である。このことから我々は、設定した誤差の範囲内でクーロン力をオーダー N の計算量で求められる高速多重極法(図 7 参照)を、上記の時間発展アルゴリズム FT 法と融合させることに成功した。名古屋大学の Fujitsu FX1 を含め様々なスパコン上において最大 2048 並列まで水分子のクラスターに関するシミュレーションを試行し、コードがオーダー N で計算時間が十分に実用に耐える程度に短いこと、使用するメモリー量がスパコン「京」においても実行可能である程度に少ないこと等を実証した。

[2-2] ナノ水滴の衝突・合体

上記手法を用いて、温度 300K でそれぞれが 24 万の水分子(直径約 45 ナノメートル) からなる 2 つのナノ水滴の衝突の分子動力学シミュレーションを行った。図 8 は FX1 を 512 ノード利用で 100 時

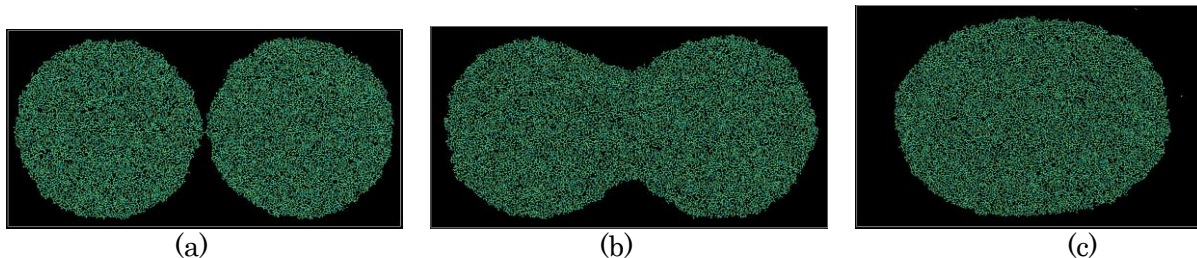


図 8. 2 個の微小水滴（それぞれ直径 45nm, 300K, 合計 48 万分子）の合体過程に関するシミュレーション. (a) $t=0$, (b) $t=120$ [ps], (c) $t=440$ [ps]

間程度, 440ps(11 万ステップ)まで計算したときのナノ水滴の衝突・合体の様子である. 現在, 氷の場合を含めて様々なデータを解析している.

(2) 当初計画の達成状況について

雲マイクロ物理シミュレータが一応の完成をみた. 乱流スカラー輸送部分のコードの MPI+OpenMP による詳細な並列化も済み, 昨年度よりも 1 段と計算速度が加速した. 当初の目標は達成できたと考えている. 高シュミット数 ($Sc=1000$) への高効率な乱流スカラーハイブリッドコードの応用は, 空間格子点数 4096^3 , 巨視的渦開店時間で約 10 までの時間積分により遠拡散領域でのスカラー揺らぎスペクトルを解析でき目的を達成した. 雲粒子の動力学ソルバー部分, 雲粒子と乱流場との結合部分については, 現在 MPI+OpenMP 化を進めている. スペクトルコードを用いて, 空間格子点数 1024^3 , $R_\lambda=252$, 雲粒子数 2^{27} 雲粒子数密度 $125/\text{cm}^3$ の大規模シミュレーションを実行した. 雲粒子成長と空間分布や雲粒子のマイクロ物理過程を通しての乱流への影響を解析できるようになった. 現在, 膨大な計算データを整理している状況である. 同様の計算をスカラーハイブリッドコードでも行う準備が整い, さらに乱流と希薄高分子との相互作用解析にも応用され興味ある結果が得られた (論文 [3]). 以上から, 当初の計画を十分達成できたと考えている.

水分子集団の動力学については, 当初目標としていた高精度かつ高速な剛体水分子系の動力学アルゴリズムを開発すること, これとオーダー N で計算する高速多重極法とを融合してスパコンに適したオーダー N の高度並列化シミュレーションコードを開発するという目標はほぼ達成できた.

4. 今後の展望

【1】雲粒子と乱流輸送

スペクトルコード, ハイブリッドコードいずれにおいても高速化は重要であるので, コード全体の MPI+OpenMP 並列化, 通信の隠ぺいによる加速が必要になると考えている.

拡散過程のみでの雲粒子成長には限界があり, 雲粒子間衝突の影響を取り入れる必要がある. 衝突コードのプロトタイプはできているが, 効率に問題があるので, 雲粒子のグルーピング等による計算の高速化を取り入れる予定である.

大規模計算を行うに当たり, 雲マイクロ物理と乱流輸送においてより適切な初期条件を探る必要がある. 中規模での計算によるデータ同化等を通して観測・実験との整合性を図る. これらを通して, 浮力項の乱流場への影響, 揺らぎの非等方性, 雲粒子半径分布, 空間分布の揺らぎと雲粒子動径分布関数などの計算を行い, 具体的な雲マイクロ物理過程のシミュレーションによる現象解明を行う予定である.

乱流輸送現象そのものの解析も重要である. 巨視的なスケールで異なるスカラー揺らぎの注入を受ける 2 つのスカラー場 θ_1, θ_2 を同じ乱流場により輸送させ, 慣性移流領域と呼ばれる小さいスケールにおける構造関数 $\langle |\theta(x+r) - \theta(x)|^p \rangle \propto r^{5p}$ のスケーリング指数 ζ_p を計算する. スケーリング指数が乱流速度場と同様に普遍的かどうかを確かめることは極めて重要であり, 乱流理論に大きなインパクトを与えるだろうと期待している.

【2】ナノスケール雲粒子の分子動力学

現在, 複数の水および氷クラスタの合体ダイナミクスに関連する様々なシミュレーションを

行っている。これは雲生成が、水の固化近傍の状態でも起きることから、水滴同士、水滴と氷塊、氷塊同士の場合で、融合ダイナミクスにどのような違いがあるかを明らかにする為である。特に、氷の表面には、融点以下の温度であっても擬似表層水(quasi-liquid layer)と呼ばれる薄い液体層があることが実験から知られている。最近、表面測定技術の発展により、この擬似表層水が、氷内部に存在する転移芯が表面に至る地点の近傍で優位に生じていること等、様々な興味深い原子スケールでの解析結果が報告されている。我々は、今回開発した水分子集合に対するシミュレーションコードを用いて、螺旋転移を導入した微細な氷の融解過程に関する大規模なシミュレーションを行っている。これまでに、転移を含んだ氷に関するこのような大規模シミュレーションの例は無い。

本共同研究の成果であるオーダーN の分子シミュレーションコードは高い汎用性を持ち、様々な大規模な分子系に適用できる。上記の、氷に含まれる転移の構造と氷の融解との関連性に関する大規模なシミュレーションは、今回の学際的なグループによる共同研究を通じて新しい研究テーマの構築に発展しつつある好例といえよう。

5. 研究成果リスト

(1) 学術論文

- [1] T. Gotoh, S. Hatanaka, and H. Miura: Spectral compact difference hybrid computation of passive scalar in isotropic turbulence, J. Comp. Phys. 231 (2012) 7398-7414.
- [2] Y. Kajima, M. Hiyama, S. Ogata, R. Kobayashi, and T. Tamura: Fast time-reversible algorithms for molecular dynamics of rigid-body systems, J. Chem. Phys. 136 (2012) 234105-1-8.
- [3] T. Watanabe and T. Gotoh: Hybrid Eulerian-Lagrangian simulations for polymer-turbulence interactions, J. Fluid Mech. 717, (2013) 535--575 (2013).

(2) 国際会議プロシーディングス

- [1] T. Watanabe and T. Gotoh: Kinetic energy spectrum of the low Reynolds number turbulence

with polymer additives, J. Phys. (in press) 8 pages (2013).

(3) 国際会議発表

[1] T. Gotoh: Universality of spectrum of passive scalar variance at very high Schmidt number in isotropic steady turbulence: APS meeting, San Diego, Nov. 20, 2012.

[2] T. Watanabe and T. Gotoh: "Kinetic energy spectrum of the low Reynolds number turbulence with polymer additives" Conference on Computational Physics (CCP2012) Oct. 15, 2012, Nichii Gakkan, Kobe, Japan

(4) 国内会議発表

[1] 小崎友裕, 後藤俊幸, 渡邊威: 雲マイクロ物理過程と乱流との相互作用. 日本物理学会 秋季大会. 2012. 9. 19.

[2] 是石拓哉, 後藤俊幸, 三浦英昭: 雲中の水滴と乱流の相互作用, 日本機械学会第 25 回計算力学講演会, 2012. 10. 6.

[3] 是石拓哉, 後藤俊幸, 渡邊威, 三浦英昭: 雲中の雲粒子集団の挙動と乱流, 第 10 回 日本流体力学会 中部支部講演会. 2012. 11. 9.

[4] 小崎友裕, 後藤俊幸, 渡邊威: 雲粒子と乱流による雲マイクロ物理過程のシミュレーション. 第 10 回 日本流体力学会 中部支部講演会. 2012. 11. 10.

[5] 鍛島康裕, 樋山みやび, 尾形修司, 小林亮, 田村友幸: 大規模な剛体分子集合系のための古典 MD コードの開発, 日本機械学会第 25 回計算力学講演会, 2012. 10. 6.

[6] 丹羽洋平, 鍛島康裕, 尾形修司, 樋山みやび, 小林亮: 大規模な水分子クラスターの外部電場に対する時間応答に関する剛体動力学シミュレーション, 日本機械学会第 25 回計算力学講演会, 2012. 10. 6

[7] 渡邊威, 後藤俊幸: "希薄高分子溶液における低レイノルズ数乱流の性質" 日本物理学会第 68 回年次大会 (広島大学) 2013 年 3 月 26 日

[8] 渡邊威, 後藤俊幸: "乱流の減衰過程に及ぼす高分子の影響" 京都大学数理解析研究所研究集会「多重物理・多重スケール乱流現象の数理解析」(京都大学) 2013 年 1 月 10 日

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

- [1] 三浦英昭, 藤堂泰, 後藤俊幸: (講座) MHD シミュレーションのコーディング技法, プラズマ・核融合学会誌 89, No. 2, (2013), pp. 119-127.