

jh140025

乱流混合と内部自由度のあるマイクロ粒子巨大集団との相互作用

後藤俊幸 (名古屋工業大学)

概要 雲粒子や鎖状高分子など内部自由度をもつマイクロ粒子の巨大集団と乱流混合との相互作用を大規模数値計算により解析した。高レイノルズ数の雲乱流中のスケール r での温度・湿度揺らぎの高次モーメントには対数関数の補正があること、普遍性は規格化されたモーメントのスケールリング指数にあることを発見した。雲中を上昇気流により移動する系内での凝結による雲粒子成長の長時間積分が可能になった。また、衝突による雲粒子半径分布関数が急速に広がることを確認した。実際の雲中での衝突に近い条件で微小水滴の衝突を気液二相系の格子ボルツマン方程式により計算できるようになった。鎖状高分子を多数含んだ低レイノルズ数 ($R_\lambda=2$) の弾性乱流の周波数スペクトルにべき的振る舞いを見出し実験による観測と一致することが分かった。高層にある雲中の微小氷晶表面の融解現象における局所的に揃った水分子ダイポールの効果、さらに不純物分子混入による融点変化を分子シミュレーションにより解析する準備が進んだ。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

名古屋大学

(2) 共同研究分野

- 超大規模数値計算系応用分野
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

(3) 参加研究者の役割分担

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, 乱流場と雲粒子コードの高速化, 乱流混合および雲成長プロセスの解析
田中良夫	産業技術総合研究所 情報技術研究部門	大規模並列計算における高精度差分並列化コード開発および高効率通信への助言
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	大規模並列計算機にむけて水分子動力学計算の高速計算法の開発と応用
渡邊威	名古屋工業大学 創成シミュレーション 工学専攻	乱流中の高分子粒子輸送モデルの開発と大規模計算, 乱流混合の解析
小林亮	名古屋工業大学 創成シミュレーション 工学専攻	大規模並列計算機にむけて水分子動力学計算の高速計算法の開発と応用
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並列化コード開発および高効率通信への助言
三浦英昭	核融合科学研究所 ヘリカル研究部	乱流中の粒子輸送モデルおよび雲粒子衝突モデルの開発
吉野正人	信州大学工学部 機械システム工学科	格子ボルツマン法による μm スケールの雲粒子の衝突解析

2. 研究の目的と意義

本研究では、雲マイクロ物理と乱流との相互作用の研究でこれまで培ってきた乱流と内部自由度を持つ粒子集団の数値計算法をさらに発展させ多様な問題に展開することを目的とする。具体的には (1) 内部自由度を持った極めて多数 ($0(10^9)$) のマイクロ粒子 (系) と乱流との相互作用を記述するシミュレーションコードを開発し大規模計算に向けて効率の良いものにする、(2) 雲粒子と乱流の問題では雲マイクロ物理過程と乱流混合輸送の相互作用を解析し、雲粒子の成長の速さや粒径分布、衝突・合併の効果、乱流による雲粒子、温度、水蒸気の混合輸送特性や揺らぎの効果を調べる、(3) 鎖状高分子と乱流との相互作用を解析し、乱流抵抗低減のメカニズム、高分子の破壊による高分子溶液劣化やマイクロ流動における混合現象の解明を行うこと、4) 高層にある雲中の微細な氷晶の融解過程をミクロの視点から探ることを目的とする。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

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、名古屋大学情報基盤センターにある Fujitsu FX10 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、乱流中の雲粒子（水滴）成長や衝突・併合、氷晶の融解、鎖状高分子と流れ場との相互作用のシミュレーションには分子動力学(MD)の知識と経験が欠かせない。また、より巨視的なサイズへの階層間接合の数理モデル化や数値的結合が必要である。このように、ミクロとマクロが密接に相互作用する問題の解明においては、幅広い分野の研究者が「大規模計算」という 1 本の縦糸に絡み合うチームを構成し研究とコード開発をする必要があり、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。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

【1】雲マイクロ物理シミュレータを構築し、これに疑似的な上昇気流の効果を取り入れて過飽和状態を維持して雲粒子の凝結による持続的成長機構を取り入れた。また、雲粒子の衝突計算の高速化に成功し、以前と比較して約 100 倍以上計算時間を短縮できた。雲粒子の空間分布における揺らぎを調べるために雲粒子の動径分布関数を計算し、べき的振る舞いを確認した。可視化により、雲粒子はフラクタル的に分布していることが分かった。

【2】高シュミット数 ($Sc = \text{分子拡散係数} / \text{分子動粘性率}$) のスカラーであるエアロゾル（雲凝結核となる）や、温度場と水蒸気場 ($Sc = 0(1)$) の世界最大規模の DNS (Direct Numerical Simulation) を実行し揺らぎのスペクトルや高次構造関数のスケールリング指数の解析を行った。スペクトルは統計理論と一致することがわかった。一方、高次統計ではスケールリング指数に単純な普遍性が見いだされないことが分かった。

【3】雲マイクロ物理シミュレータコードを流れ場中の高分子鎖の粒子モデルに応用した。乱流中に大多数の高分子鎖を分散させるオイラー・ラグランジュ並列数値計算を実施し、高分子鎖が乱流場の統計性に及ぼす影響を調べた。緩和時間の長い高分子鎖は乱流場を大きく変調し、乱流スペク

トルは冪的減衰を示す事などが明らかになった。

【4】直径が $100\mu\text{m} \sim 500\mu\text{m}$ の水滴の衝突実験を二相系 LBM による数値計算で再現し、妥当性の検証を行った。密度比 50, Re を 2000 に固定しオフセット衝突パラメータ B (中心軸のずれの大きさ) とウェーバ数 (慣性力/表面張力) に対する衝突・併合の依存性を解析した。その結果、衝突挙動の 3 パターン、併合、反射分離、伸縮分離の挙動が確認でき、実験とほぼ一致することが分かった。

【5】剛体水分子の動力学計算のために、計算量が既存のものに比べて最も少なく、時間反転対称性やエネルギー保存性に優れた Fast Time-reversible (FT) 法を開発した。FT 法と水分子同士の長距離クーロン力をオーダー N で計算する高速多重極展開法とを組み合わせることで、水分子動力学シミュレーションコードはオーダー N となり、サブ μm スケールの水滴の合体過程および結晶氷の融解過程が、スパコンを大規模に使用して初めてシミュレート可能となった。特に、高層における雲を構成するナノスケール氷結晶に関連して、微小氷の表面融解過程についての分子動力学シミュレーションで、大変興味深い結果が得られた。用いた微小氷は六角柱形状で、132 万個の水分子からなる ice-Ih 相、その最大幅は $0.06\mu\text{m}$ である。分子間には他の多くの研究でも用いられて実績がある TIP4P ポテンシャルを適用した。

対象系を 512 から 2048 程度に等しいサイズで空間分割することで並列化した。融点近傍の温度ではその表面に薄い擬似液体層が生成した。シミュレーション結果を詳細に観察することで、融点より 1K だけ低い温度では、平坦な水面上に水滴状の水が乗っているというユニークな構造をもっていた。さらに、熱ゆらぎにより氷表面の局所的な融解と再結晶化の繰り返し過程を初めて見いだした。この氷表面で分子交換を伴って再結晶化を繰り返すことは、水と親和性がある様々な物質を環境から高速に取り込む可能性を示唆している。このように、微小氷の表面融解過程は結晶核からの雲粒子生成過程を通じて環境問題にも関係すると考えられる。

5. 今年度の研究成果の詳細

【1】雲粒子成長と衝突および雲乱流混合輸送

雲は半径が約 $10 \mu\text{m}$ 程度の微小水滴の巨大集団である。これが水蒸気の凝結により $30\sim 40 \mu\text{m}$ にまでなり、その後は衝突により成長し雨粒子となる。今年度前半は主に衝突計算の検証とストークス数依存性の解析に重点を置き研究を行った。衝突計算で最も重要なパラメータはストークス数 St (=粒子の特性時間/流れの特性時間) である。 St が小さいとき、非圧縮流体中では粒子はほとんど衝突しない。一方、 St が 1 より大きいときには、渦があってもそれをほとんど感ずることなく移動し粒子間の相対速度に比例して衝突頻度が増加する。乱流中の粒子の高速化された衝突計算を行いその結果を検証した。 St が小さい場合には Saffman-Turner の理論と一致し、 St (粒子半径) の増大と共に衝突頻度が増大することが分かり、この傾向は他のシミュレーションでの結果とも一致していることが分かった。

今年度後半は、雲乱流中を浮遊する微小な雲粒子が凝結により $30 \mu\text{m}$ にまで連続的に成長する過程を計算する新たな手法を開発した。これまでのように雲中に固定した小さな立方体領域内での計算では、初期の過飽和度を異常に高く設定するか、常に水蒸気を外部から供給するなどのメカニズムを導入する必要があった。実際の雲中では、雲粒子は凝結に伴う潜熱放出による上昇気流 $W(t)$ により上空に運ばれ、温度低下により過飽和状態が維持されて凝結成長が維持される。この物理機構を取り入れるために、雲中を浮力による上昇気流

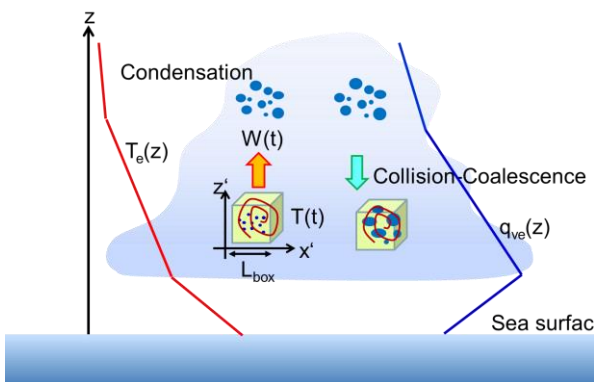


図 1 上昇気流 $W(t)$ で移動する計算領域。浮力は領域内の平均温度 $T(t)$ と周囲の温度 $T_e(z)$ との差で決まる。

$W(t)$ で移動する立方体領域 (パーセル) を導入した。この浮力は、雲周囲の平均気温 $T_e(z)$ と立方体内の平均温度 $T(t)$ の差により発生する。雲粒子が雨粒子にまで成長する時間は約 20 分程度である。この系での典型的な時間ステップ幅は 1msec であり、降雨までには約 120 万ステップを要するので、大規模計算の前に簡単な系で全体のおおよその振る舞いを推定した。立方体内の雲粒子と乱流の効果をすべて平均値で置き換えたパーセルモデルを開発しこれを数値解析した。すると、当初のモデルのままでは上昇気流が極端に強くなることが分かった。そこで、雲の外の乾燥空気が乱流混合により雲内部に取り込まれるエントレインメント効果を導入し、温度差を小さくして上昇気流をより現実的な値に近づけるよう工夫した。これにより、パーセルは 500m から約 2000m まで秒速約 4[m/s] で上昇し、その後 2000m 付近で約 400 秒の周期で振動することが分かった。この振動周期は理論によるブラントバイサラ周期の約 1.6 倍に相当する。また、平均雲粒子半径は $10 \mu\text{m}$ から $20 \mu\text{m}$ に成長し、観測結果ともつじつまが合うことが分かった。

この結果を基に、1 辺 25.6 cm の立方体内に約 200 万個の雲粒子を分散させ、乱流 ($Re_\lambda=86$) により温度、水蒸気と混合輸送される系の時間発展を雲マイクロ物理シミュレータにより計算を行った。ハワイで観測された温度と水蒸気混合比の鉛直分布を参考に、初期に 500m の高さにある計算領域内

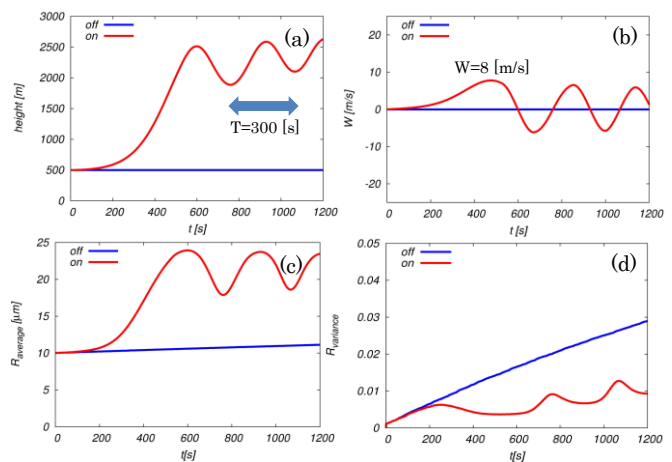


図 2 パーセルの (a) 高度, (b) 上昇気流 $W(t)$, (c) 平均雲粒子半径, (d) 雲粒子半径の揺らぎの標準偏差の時間変化。青(off): 上昇気流なし, 赤(on): 上昇気流あり。

温度を周囲より 0.25°C だけ高くした。水蒸気は過飽和状態にあり、これに小さな揺らぎを印加した。乱流場は初期に約 10 [cm/s] の振幅をもつ Gauss 分布に従う揺らぎを与えた。初期の雲粒子はすべて半径 10 μm で、平均粒子数密度 125/cm³ と典型的な雲での観測値として、約 20 分間の積分を行った。図 2 に示すように、パーセルは最大 8 [m/s] の速度で約 2300m まで急速に上昇し、平均雲粒子半径は約 24 μm まで成長する。その後、高度の上下動とともに平均半径も約 300 秒の周期で変動する。周期の理論値は高度にもよるが 200-400 秒であり、計算結果は十分納得のいくものである。また、上昇気流により、粒子半径の分布の広がりや抑えられること、乱流によるエントレインメントの効果は、凝結による雲粒子成長に大きな影響をおよぼすことが分かった。これらの結果は 3 月に名工大で開催された国際ワークショップ「Cloud Turbulence」で発表され、大きな関心を集めた。

雲粒子衝突計算においては、初期雲粒径分布に観測データに近い対数正規分布を導入した。乱流速度場が高波数側で十分解像されていないと、粒径分布の広がりや不適切になるため、レイノルズ数をやや抑え気味にして十分解像されるようにした。その結果、数 100 μm の雲粒子が短時間に(数分)で生成されることが分かった。

【2】雲乱流混合輸送

水蒸気、温度などのスカラーの乱流混合輸送は、雲粒子の成長に影響を与えるので、微細スケールでの揺らぎの統計法則の解明は必須である。同一の乱流により輸送されかつ異なる揺らぎの注入方法による 2 つのスカラー場（低波数で時間的にホワイトで正規分布に従うランダム揺らぎを注入された水蒸気 q と鉛直方向に一様な平均温度勾配により励起された温度 θ ）の揺らぎのモーメント $S_q^n(r) = \langle |q(x+r) - q(x)|^n \rangle \propto r^{\xi_n}$ と $S_\theta^n(r) = \langle |\theta(x+r) - \theta(x)|^n \rangle \propto r^{\zeta_n}$ のスケーリング指数 ζ_n と ξ_n の普遍法則の探求を引き続き行った。慣性領域で両者が一致すればスケーリング指数には普遍性があることになる。高次モーメント ($n \geq$

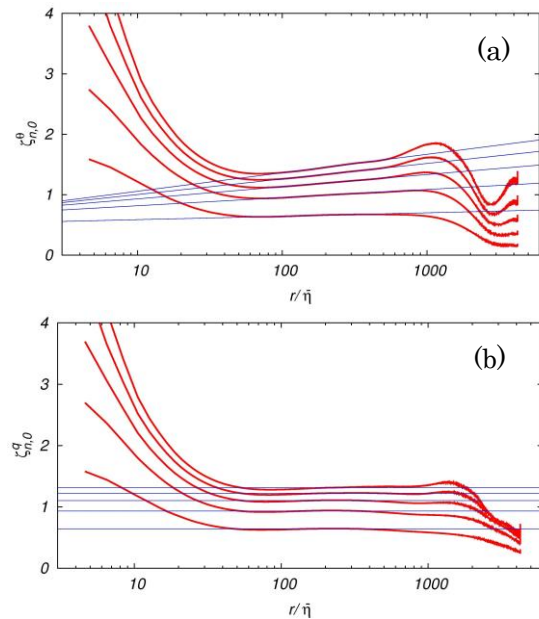


図 3 2 つのスカラー差分のモーメントの局所スケーリング指数。下から 2, 4, 6, 8, 10 次 (a) 低波数でランダムなスカラー揺らぎを注入した場合、(b) 一様な平均温度勾配により揺らぎを注入した場合。両者は明瞭に異なる。前者のモーメントには指数関数の補正が入る。

4) は強い揺らぎが重要(分布の裾野が効いてくる)となるので、十分な空間解像度と統計的に十分収束したデータを得ることが必要である。今年度後半は、世界最大規模の空間解像度 4096³ の計算を 6 から 8.2 大渦回転時間というかつてない長時間にわたって統計平均をとり、S0(3) 分解による等方性と非等方性成分の分離を行うなどの慎重な解析を行った。図 3 は 2 次から 10 次までのモーメントの局所スケーリング指数 $d \log S_q^n(r) / d \log r$ である。(a) では有限の傾きを持つ直線部分が、(b) では水平部分が明瞭に見いだされる。数学的には

$$S_q^n(r) = A_n \left(\frac{r}{r_*}\right)^{\xi_n + \beta_n \log(r/r_*)}$$

$$S_\theta^n(r) = B_n \left(\frac{r}{r_*}\right)^{\zeta_n}$$

と表され、前者には単純なべき法則は成り立たず対数関数による補正が加わるという、これまでの乱流混合輸送理論を覆すような大きな発見に至った。一方、普遍性は規格化されたモーメント

$$F_q^n = S_q^n(r) / [S_q^2(r)]^{n/2} \propto r^{\bar{\xi}_n}$$

$$F_\theta^n = S_\theta^n(r) / [S_\theta^2(r)]^{n/2} \propto r^{\bar{\zeta}_n}$$

のスケーリング指数はスカラー揺らぎの注入方法によらず、普遍性が見いだされることがわかった。

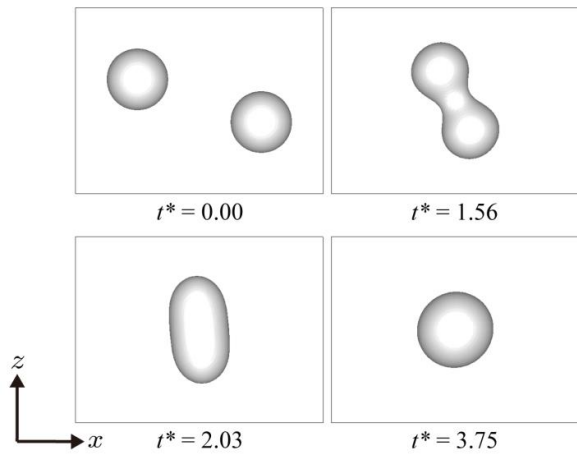


図 4 $D = 10\mu\text{m}$, $B = 0.7$, 密度比 828 における計算結果 ($t^* = tV/D$).

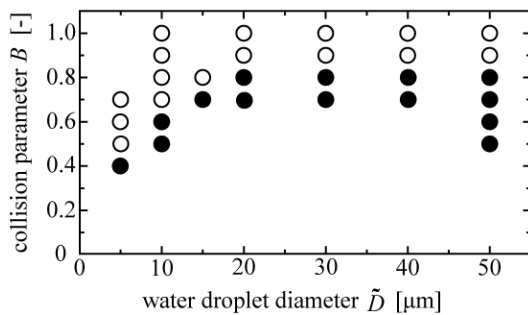


図 5 水滴直径とオフセット量に対する液滴の挙動変化。
(● : coalescence, ○ : deorbit)

【3】空気中の水滴の衝突解析

今年度前半においては、雲中における微小水滴（雲粒子）の挙動を計算するために、粒径が $5\mu\text{m} \leq D \leq 50\mu\text{m}$ 、相対衝突速度が $V = 0.1\text{m/s}$ の雲粒子を想定した衝突挙動を調べた。液相と気相の密度比を 5、ウェーバ数（慣性力/表面張力）を $We = 1.37$ とし、レイノルズ数を $0.497 \leq Re \leq 4.97$ の範囲で変化させた。計算結果の一例として、 $Re = 4.97$ および衝突パラメータ（液滴直径に対する無次元オフセット量）が $B = 0.7$ のケースに対する液滴の挙動を図 4 に示す。この条件では、液滴が衝突後 1 個の液滴に合一する結果となっている。次に、種々のパラメータに対して同様の計算を行い、液滴挙動の違いを表したダイアグラムを図 5 に示す。液滴の挙動は 2 つのパターン（衝突：coalescence, それる：deviation）で変化することがわかる。特に $Re \leq 2$ において、レイノルズ数が小さくなるにつれて、衝突パラメータが小さいケースでも液滴はそれる（衝突しない）ことが

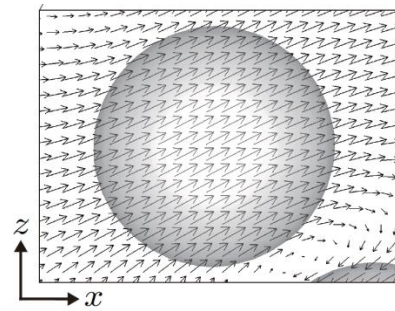


図 6 液滴同士が最接近した際の液滴周りの流れ ($Re = 0.994$, $B = 0.7$).

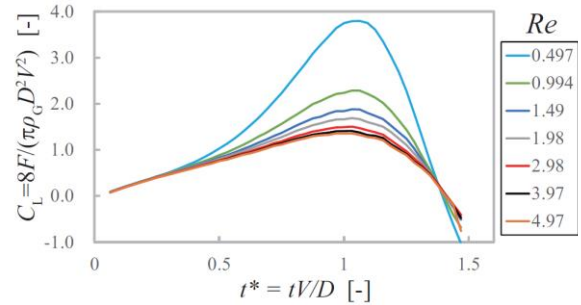


図 7 種々のレイノルズ数に対する揚力係数の時間変化 ($B = 0.7$).

わかる。これは、レイノルズ数の減少とともに液滴の慣性力が粘性力よりも小さくなり、より液滴の軌道が流れ場の影響を受けやすくなることが原因と考えられる。

今年度後半においては、上述の液滴がそれる場合 ($Re = 0.994$, $B = 0.7$) について詳細な考察を行った。液滴同士が最接近したときの流れ場の様子 (図 6) を見ると、オフセット方向 (z 方向) に流速が生じており、この流速の影響により液滴は z 方向に揚力を受けることが予想される。種々のレイノルズ数に対する揚力係数 C_L の時間変化を図 7 に示す。液滴同士が最接近する時刻 ($t^* \cong 1.0$) で揚力係数は極大値をとり、レイノルズ数が小さくなるほどその極大値は大きくなることがわかる。このことから、二つの液滴が衝突せずにそれる挙動を示すのは、レイノルズ数の減少とともに流れ場の影響を受けやすくなることが原因であることが確認できた。

【4】高分子と流れ場との相互作用

今年度前半では、高分子鎖が流れ場へ及ぼす影響の素過程を調べるために、流れ場のレイノルズ数が極端に小さい場合に、高分子鎖が流れ場に対

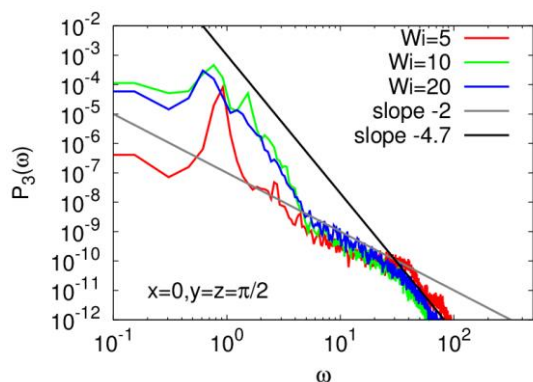


図 8 速度変動のパワースペクトルを示す。弾性乱流に特徴的なスペクトルの冪減衰が存在している($Re=2$)。

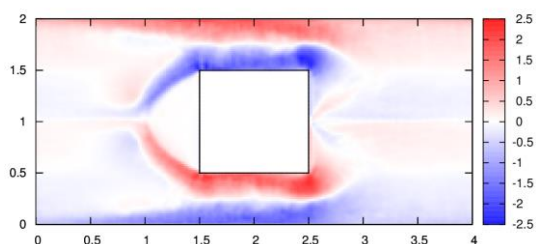


図 9 角柱周りの遅い流れにおける渦度分布を示す。高分子の影響により左右非対称な非定常流れが出現する。

してどのような変調を及ぼすかについて詳細に調べた。テイラー・グリーン流れと呼ばれる定常な渦流れに多数の高分子鎖を分散させると、ワイセンベルグ数(高分子の緩和時間/流れ場の特性時間)が増大するにつれて流れ場は非定常な乱流運動へと遷移すること、また速度揺らぎのパワースペクトルは弾性乱流に特徴的な冪的減衰を示すこと(図 8)が明らかになった。得られた弾性乱流の詳細な性質については、現在、解析を進めている。

今年度後半では、弾性乱流のマイクロ流路内における物質混合促進(マイクロミキサ)への応用を念頭に置いて、チャンネル内に周期的に配置された角柱列周りの流れについて、その高分子の影響を調べた。図 9 に見るように、角柱を過ぎる高分子はその 4 隅において強く伸長し、流れ場は大きな変形を受けることが確認された。またワイセンベルグ数の増加に伴い、流れ場が非定常な時間変動を示すことが見出された。この非定常運動の出現条件や、関連する弾性乱流の実験研究との類似点、相違点について現在解析を進めている。

【5】水分子クラスターの分子動力学

前年度に、融点より 1K だけ低い温度において、微小氷の表面は、平坦な水面上に水滴状の水が乗っている構造をとることを発見した。今年度前半では、この結果等をまとめ、日本物理学会の欧文誌(J. Phys. Soc. Jpn.)の Letter セクションで公表した。純粋な氷と水の界面に存在するこのようなユニークな構造は、雲粒子成長など氷の関与する現象理解の鍵を握っていると考えられる。しかし現実の凍結-融解現象は多くの不純物存在下で起こる。そして少量でも氷成長を大きく促進/阻害する不純物もある。今年度後半では、氷表面で不純物が凍結現象に与える影響とそのメカニズム究明のため、特に不凍タンパク質などによる不凍現象に取り組み始めた。これらの物質が氷成長を阻害するメカニズムはいまだ十分には分かっていない。多くのシミュレーションが存在するが、今の所それらは小規模なシミュレーションに留まっている。不凍タンパク質などによる不凍現象は、一定の規模があつて初めて正しく評価できる現象であると考えられ、我々は現在、不凍タンパク質を(剛体としてではなく)扱うための大規模シミュレーションコードを開発中である。シミュレーションにより、不純物が融解凍結現象に与える影響を解明し、雲中の微細な氷晶の融解凍結現象の新たな発見があることを予想している。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

初期に半径が $10 \mu\text{m}$ 程度の雲粒子が凝結により $30 \mu\text{m}$ 程度にまで成長し、その後衝突により成長し数 $100 \mu\text{m}$ の雨粒子にまで成長する雲マイクロ物理過程を連続的にシミュレートするための準備がおおむねできたと考えている。すなわち、上昇気流とともに移動するパーセル内での雲粒子成長の計算手法の開発と妥当な計算結果を得たこと、自然な初期半径分布を持つ雲粒子同士の衝突計算が可能になったことなどである。全体として研究は順調に推移していると考えている。これらの成果の発表と国内外の研究者との交流とネットワーク形成を意図して、平成 27 年 3 月 4, 5, 6 日に科研

費の支援を受け国際ワークショップ

「International Workshop on Cloud Turbulence」
<http://comphys.web.nitech.ac.jp/cloud.html>
 を名工大で開催した。雲物理、気象、乱流の研究で著名な研究者を海外から 6 名、国内から 7 名を招待し、各 1 時間の講演と交流を図った。これまで、乱流分野と気象分野の交流は決して十分ではなく、参加者からはこのワークショップは新しい研究分野の開拓を目指すものとして受け入れられ、次回開催も強く期待しているとの激励を受け、勇気づけられた。

今後は、 $10\ \mu\text{m}$ から数 $100\ \mu\text{m}$ までの雲粒子成長を連続的に計算することが最大の目標となる。巨大粒子形成の場合の乱流場への反作用、粒子径に応じた適切な時間ステップの（自動）選択、100 万ステップ以上の計算のためのさらなる高速化には時間がかかるだろうが積極的に進めていきたい。

雲乱流混合におけるスカラー揺らぎの解析は順調に進行しており、一部は 8 月にアブダスサラム国際理論物理学研究センター（ICTP）での招待講演で発表された。さらなる計算進行に伴い、統計データが充実したことにより、スケール r における高次モーメントがべき法則だけでなく対数関数の補正を含むことを発見した。これは、乱流理論からは全く予想されていないことであり、現在、Phys. Rev. Lett. に投稿中である。この説明は乱流理論にとって大きな課題であり、今後さらなる慎重な解析が必要である。また、雲粒子形成の核となる $1\ \mu\text{m}$ 以下のエアロゾル（固体粒子）の空間分布のむらを解析するために、高レイノルズ数で高シュミット数の乱流混合の計算もさらに進んでいる。今後は、逆の極限、すなわち低シュミット数の乱流混合の研究にも進む予定である。

雲粒子から雨粒子成長までの全ての過程をシミュレーションするにあたり、実際の雲粒子のスケールでの液滴衝突の解析は極めて重要である。今年度の雲粒子の衝突挙動解析に関する研究は順調に進んでおり、レイノルズ数と衝突パラメータに対する衝突ダイアグラムを作成することができた。また、レイノルズ数が減少すると、液滴同士は衝

突せずにそれる挙動を示すこと、ならびにその原因を明らかにした。今後は、異なる液滴直径同士での衝突計算や、重力や上昇気流も考慮に入れた計算を行っていき、より詳細な衝突ダイアグラムを完成させる予定である。さらに、現行の数値計算法では、気液間の界面張力を大きくすると擬似流速（非物理的な流れ）が発生し、実際の雲粒子の衝突で起こるような低ウェーバ数域の計算が困難である。この問題を克服するために、今後は CSF（Continuum Surface Force）モデルに基づく新しい気液二相系 LBM を導入した計算を実行していく予定である。

高分子溶液における特異な流動現象である弾性乱流に関して、粒子描像に基づく高分子鎖と流れ場の連結シミュレーションにより再現した研究は過去に存在せず、本年度の大きな成果の一つであると考えている。物理的には理解が容易なテイラー・グリーン流れにおける弾性乱流の研究は、速度揺らぎの冪法則の起源とその普遍性を議論する上で大いに役立つと期待される。今後、圧力場やポリマーストレス場の統計性に関する解析を通して、弾性乱流の乱流特性に関する理解が深まっていくと期待している。また物体周りの遅い流れにおける弾性乱流の再現計算は、高分子溶液を用いたマイクロミキサやマイクロリアクターのシミュレーションによる設計といった、将来の応用研究に向けた第一歩としてその意味がある。今後用いた計算パラメータの見直しと、流れ場の計算手法の改善を行って、より高精度で信頼性の高い計算を実施することが重要な課題である。

水分子クラスターの分子動力学シミュレーションに関連しては、プログラムコードを改良して、水クラスターに不純物分子を導入できるようにする予定である。この改良により、不純物分子の混入が融点にどのような変化を与えるか、氷の擬似液体層がどのように変化するかを調べる大規模シミュレーションが初めて可能となる予定である。融点変化の理論予測は、雲マイクロ物理過程に関連するのみならず、産業界への波及の観点からも重要である。例えば新たな融雪剤の開発、新しい

メカニズムによる臓器や食品の凍結防止剤の開発にも繋がる。このような分野を超えた展開は、本事業の趣旨に照らして望ましいことであると考えている。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

- [1] T. Watanabe and T. Gotoh, "Power-law spectra formed by stretching polymers in decaying isotropic turbulence", *Phys. Fluids* 26 035110 (2014) (査読有)
- [2] 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講義録 No. 1882 p. 55 (2014) (査読無)
- [3] Y. Kajima, S. Ogata, R. Kobayashi, M. Hiyama, and T. Tamura: "Fluctuating Local Recrystallization of Quasi-Liquid Layer of Sub-Micrometer-Scale Ice: A Molecular Dynamics Study", *J. Phys. Soc. Jpn (Letter)*, Vol. 83 (2014) 083601-1-4. [Awarded as a paper of Editors' choice]
- [4] T. Gotoh and T. Watanabe, "Power and non-power laws of passive scalar moments convected by isotropic turbulence", Submitted to *Phys. Rev. Lett.* (2015)

(2) 国際会議プロシーディングス

(3) 国際会議発表

- [1] T. Gotoh, T. Watanabe, Y. Kozaki, Y. Suzuki, and K. Yamamoto: "Turbulence and droplets in cloud simulator", Conference on Dynamics of Particles in Flows, Nordic Institute for Theoretical Physics, June 12, 2014 (Invited)
- [2] T. Watanabe and T. Gotoh, "Elastic Turbulence in Taylor-Green flow", Conference on Dynamics of Particles in Flows, Nordic Institute for Theoretical Physics, June 12, 2014
- [3] T. Gotoh and T. Watanabe, "Universality of small scale statistics of passive scalar in turbulence", ICTP, Trieste, Aug. 6, 2014 (Invited)
- [4] Y. Kajima and S. Ogata: Molecular dynamics simulations of quasi-liquid layer of sub-micrometer scale ice with or without dislocation, Aug. 25th, 2014, Fukuoka, IUMRS-ICA2014
- [5] T. Gotoh and T. Watanabe, "Intermittency and universality of small scales of passive scalar in turbulence", APS, San Francisco, USA, Nov. 24, (2014).
- [6] T. Suehiro, T. Ichikawa, T. Watanabe, and T. Gotoh "Cloud droplet growth and updraft in cloud microphysics simulator", International Workshop on Cloud Turbulence, NIT, Nagoya, Japan, March 6, (2015).
- [7] M. Yoshino, N. Fukaya, and K. Suzuki, "Two-phase lattice Boltzmann simulation of binary collisions of small water droplets in clouds", International Workshop on Cloud Turbulence,

NIT, Nagoya, Japan, March 6, (2015).

(4) 国内会議発表

- [1] 渡邊威, 後藤俊幸 「弾性乱流のオイラー・ラグランジュシミュレーション」 京都大学数理解析研究所研究集会「乱流研究のフロンティア」(京都大学) 2014 年 7 月 24 日
- [2] 後藤俊幸, 渡邊威 「高レイノルズ数における乱流スカラー揺らぎの間欠性と普遍性」プラズマシミュレーター シンポジウム, 核融合科学研究所, 土岐, 9 月 11 日, 2014
- [3] 渡邊威, 後藤俊幸 「Taylor-Green 流れにおける弾性乱流の性質 II」日本物理学会 2014 年秋季大会 (中部大学) 9 月 7 日, 2014
- [4] 後藤俊幸, 市川智也, 末廣保 「雲マイクロ物理過程と乱流輸送」, 日本物理学会 2014 年秋季大会 (中部大学春日井キャンパス) 2014 年 9 月 7 日
- [5] 市川智也, 渡邊威, 後藤俊幸 「雲乱流中における雲粒子の衝突過程」日本流体力学会年会, 東北大 9 月 16 日, 2014
- [6] 末廣保, 渡邊威, 後藤俊幸 「雲マイクロ物理過程における雲乱流と上昇気流」, 東北大, 9 月 16 日, 2014
- [7] 市川智也, 後藤俊幸, 渡邊威 「雲乱流中における雲粒子の衝突過程」, 日本流体力学会中部支部講演会, 三重大学, 11 月 7 日, 2014
- [8] 末廣保, 後藤俊幸, 渡邊威 「雲乱流中の上昇気流と雲粒子の成長について」, 日本流体力学会中部支部講演会, 三重大学, 11 月 7 日, 2014
- [9] 深谷昇弘, 吉野正人, 鈴木康祐 「二相系格子ボルツマン法を用いた微小水滴の衝突挙動解析」日本流体力学会中部支部講演会, 三重大学, 11 月 7 日, 2014
- [10] 後藤俊幸, 市川智也, 末廣保 「雲マイクロ物理シミュレータによる雲乱流と雲粒子成長の解析」, 第 28 回数値流体力学シンポジウム, タワーホール船堀, 東京, 12 月 11 日, 2014
- [11] 川口尚吾, 渡邊威, 後藤俊幸 「物体周りの希薄高分子溶液流れに関する数値シミュレーション」第 28 回数値流体力学シンポジウム, タワーホール船堀, 東京, 12 月 11 日, 2014
- [12] 深谷昇弘, 吉野正人, 鈴木康祐 「二相系格子ボルツマン法を用いた雲中における微小水滴の衝突挙動解析」第 28 回数値流体力学シンポジウム, タワーホール船堀, 東京, 12 月 9 日, 2014
- [13] 川口尚吾, 渡邊威, 後藤俊幸 「物体周りの遅い流れにおける高分子の影響」日本物理学会年会 2015, 早稲田大学早稲田キャンパス, 東京, 3 月 22 日, 2015

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

- [1] 鍛島康裕, 尾形修司 「氷表面の擬似液体層 挙動解明」, 2014 年 9 月 5 日, 科学新聞.