

jh240020

内部自由度を持つ粒子群と乱流の相互作用に関する大規模シミュレーション

渡邊威（名古屋工業大学）

概要

乱流による粒子群の輸送現象は、自然界から工学的流れに至るまで広く観測されるユピキタスな現象である。各問題における着眼点や研究目的に相違があっても、粒子の数理的な扱いや計算手法、データ解析手法などには共通する部分が多い。また、多くの問題に共通する特徴の一つに、流れ場と無関係に決まる系固有の特性時間を伴うことが挙げられる。多くの複雑混相乱流の問題は、内部自由度に対応した特性時間を有する粒子系と、特異構造で特徴づけられる乱流場の相互作用の問題に帰着できる。そこで本研究課題では、粒子集団による輸送問題の高効率計算、乱流場の特異構造と粒子輸送の相関、粒子群と乱流の相互作用に関する高精度計算、に関する研究を包括的に実施し、乱流粒子輸送のシミュレーション基盤を整備することを目指す。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同利用・共同研究を実施している拠点名

名古屋大学 情報基盤センター

(2) 課題分野

大規模計算科学課題分野

(3) 参加研究者一覧と役割分担

渡邊 威	名古屋工業大学・工学研究科	研究総括、粒子と流れの相互作用解析
後藤 俊幸	名古屋工業大学・先端医用物理・情報工学研究センター	乱流場の特異構造の解析
齋藤 泉	名古屋工業大学・工学研究科	粒子輸送計算の高速化
片桐 孝洋	名古屋大学・情報基盤センター	最適化に関する助言
横嶋 哲	静岡大学・大学院工学領域	粒子に働く力の解析と検討

2. 研究の目的と意義

2.1 目的

本研究課題は、ポリマー混入流、金属微粒子の精製過程、微小気泡や液滴を伴った流体機器内の

流れ、河川流中の掃流砂輸送などの複雑混相流れを、“内部自由度に起因する特性時間を有する粒子集団と乱流場の相互作用の問題”としてとらえ、新奇シミュレーション手法の開発、粒子内部自由度と乱流構造の関連性の理解、乱流場と粒子群の相互作用の解明、を目指すものである。

上記した混相乱流の問題は、扱う対象や目的は互いに異なっているが、粒子に働く流体力のモデル化や計算手法、データ解析手法など共通する部分が多い。また、上記した問題の多くは、流れ場とは無関係に決まる系固有の特性時間を有する事が特徴である。この特性時間と乱流の特性時間の比で定義される無次元パラメータの値によって、粒子群の振る舞いや乱流場の構造や統計性は大きく変化する。さらに乱流の強い非線形性は速度勾配場に強い間欠的揺らぎを誘起し、これは粒子群の輸送・拡散に大きな影響を与える。我々は複雑な混相乱流の問題を、内部自由度に対応した特性時間を有する粒子系と、特異構造で特徴づけられる乱流場の相互作用の問題に帰着することにより、多様な現象に横たわる普遍的な性質を炙り出す事ができると考えて、関連する研究をこれまで進めてきた。

本年度は（１）粒子集団表現によるスカラー輸送問題の高効率計算手法の開発，（２）質点近似粒子に働く流体力の高精度化の検討，（３）乱流中の粒子群の分布と乱流統計量の関係，について研究内容を深化させる。

2.2 意義

基礎研究の観点：相変化の特性時間を伴う仮想粒子集団の乱流輸送現象は，高シュミット数のスカラー乱流における古典的問題と密接に関連している．粒子群により表現されるスカラー場の輸送解析は，高シュミット数スカラー分散スペクトルの普遍定数を決定する有力な方法の一つであり，乱流輸送に関する未解決問題の解明，並びに乱流輸送モデルで導入されるモデルパラメータの決定に大きな貢献ができる．

応用展開：本研究で扱うモデルは粒子法の一つであり，これまで混相流など複雑な流れの計算で広く用いられてきた粒子法の知見を容易に適用することができる．この利点を活用することで，粒子の運動量慣性や重力沈降，凝縮・蒸発などの様々な物理過程の影響を取り込んだ流れや，化学反応を伴う反応流れの高精度シミュレーションへと発展することが可能である．

計算科学の観点：粒子と場の相互作用は，計算機の中では局所的小および大域的にデータのやり取りが同時多発的に生じる事を意味し，様々な物理計算で普遍的に生じる問題である．本課題の大規模計算の実現の過程で得られる知見や経験をコミュニティに還元することは，計算科学分野全体の発展に寄与するものである．

3. 当拠点の公募型共同研究として実施した意義

3.1 課題の学際性

内部自由度を有する粒子集団と乱流の相互作用の問題として混相乱流の素過程を捉え，その性質を解明することで得られる知見は，問題の詳細に関わらず様々な系の振る舞いを統一的に理解する足掛かりとなる．また，本課題で扱う問題の高速・

高解像度な計算手法を確立することにより，化学反応流，ポリマー混入流，雲マイクロ物理，古微生物学などの様々な分野への研究展開を可能にすることができる．

3.2 拠点資源利用の必要性

場から力を受けて運動する粒子の計算においては，場（オイラー）と点（ラグランジュ）の情報交換が必然的に生じる．場は大規模配列として表されるため，粒子数や流れ場の格子点数が大きくなると，情報の授受や演算にかかるコストは膨大なものになる．よってスパコンを用いた高効率計算の実現が必須の課題である．課題の推進には，乱流と粒子輸送現象に精通した研究者と，スパコンや計算機科学に熟知した研究者が協力することが重要であるため，拠点資源の利用を含めた共同研究が必要である．

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

4.1. 粒子集団表現によるスカラー輸送問題の高効率計算手法の開発

雲乱流における微小液滴の輸送・混合現象において，雲粒子集団は相変化を伴う高シュミット数のスカラーであり，通常のエイラー的な手法による直接数値計算は著しく困難である．同様の問題は化学変化を伴う混相乱流全般に当てはまる．そこで我々は内部特性時間を有する仮想粒子を用いた新奇なオイラー・ラグランジュ計算法を開発して問題に適用し，スカラー場の分散スペクトル等

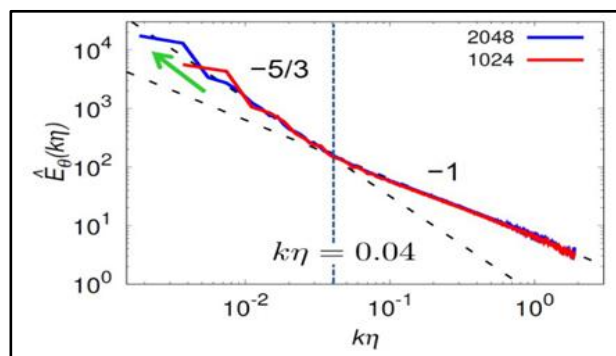


図 4-1：雲水混合比のスペクトルの振る舞い．スペクトルは $k\eta = 0.04$ で明瞭な遷移が観測される．

の統計則の解明を進めてきた．非圧縮流体の速度場 $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ における，スカラー θ_{pj} を付随した非慣性粒子の時間発展方程式は，

$$\frac{d\mathbf{x}_{pj}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}_{pj}, t), \quad \frac{d\theta_{pj}}{dt} = -\frac{\theta_{pj}}{\tau_\theta} + f_\theta(\mathbf{x}_{pj}, t)$$

で与えられる．この時スカラー場 $\theta(\mathbf{x}, t)$ は

$$\theta(\mathbf{x}, t) = \frac{V}{N_p} \sum_{j=1}^{N_p} \theta_{pj}(t) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{pj}(t))$$

で評価できる．古典的な乱流輸送の理論では，スカラー分散スペクトルは

$$E_\theta(k) = \begin{cases} C_{oc} \bar{\chi}_{in} \epsilon^{-\frac{1}{3}} k^{-\frac{5}{3}} & (k\eta \ll 1) \\ C_B \bar{\chi}_{in} \left(\frac{\epsilon}{\nu}\right)^{-\frac{1}{2}} k^{-1} & (k\eta \gg 1) \end{cases}$$

のスケーリング則に従うことが予測されている（ η はコルモゴロフ長さ）．我々はレイノルズ数 = 550, 流体格子点数 = 2048³, 粒子数 = 236/単位格子セル, の大規模解析を実施した．結果の一例を図 4-1 に示す．この結果より，明瞭な慣性移流領域（ $k^{-5/3}$ ）と粘性移流領域（ k^{-1} ）の存在を確認した．また，各領域の遷移は $k\eta \approx 0.04$ で生じていることを計算結果は示しており，これは乱流理論の予測するもの（ $k\eta \gg 1$ ）とは大きく異なることを見出した．さらに，普遍定数であるバチェラー定数 C_B の値として， $C_B = 5.7 \pm 0.3$ が得られ，これは過去に実施された連続場の計算結果によるものと一致することが明らかとなった[1]．

4.2. 粒子輸送問題におけるコスト削減にむけたコード改良

本課題で扱う粒子輸送計算において，扱う粒子数が増加すると，それに伴って計算時間が膨大に増える現状のコードでは実施の目途が立たない．原因の一つは，分割した領域を跨ぐ粒子情報のプロセス間通信について，最適化が十分考慮されていないところにある．そこで本課題では計算の効率化に向けて，粒子個数・位置・速度情報のプロセス間通信と再ラベリングに伴って発生する配列の allocation と deallocation に要する時間の計測とそのプログラム構造の見直しを行った．

表 4-1 は，周期境界条件に従う立方体領域にお

ける乱流とそれによって輸送される流体粒子の時間発展における計算時間を示したものである．計算領域は 2 次元領域分割を用いており，計算格子点数は 128³，プロセス数 4×4，粒子数を 1 流体格子点あたり 16 から 128 まで増加させて，1 ステップの計算に要する時間を測定した．また，粒子情報の通信の前処理で扱う配列の allocate-deallocate に要する時間の割合も示している．この結果より，粒子数にほぼ比例して計算時間が増加すること，配列の allocate 等にかかる時間が全体の 3 割ほどを占めることがわかった．配列の allocation にかかる時間を削減するためには，予め必要な配列の大きさを見積もっておき，事前に必要な配列をすべて定義しておくのが一番シンプルな変更である．実際にそのような方針でコードを書き換えたところ，例えば粒子数 80 の場合では計算時間が 2.312s まで削減されることがわかった．これは allocate-deallocate に係る時間がほぼ無視できる寄与になったことを意味する．

格子点当たり 粒子数	1ステップ当 たりの時間[s]	allocate, deallo cateが占める 割合[%]
16	0.67213	21.17
32	1.2851	21.75
48	2.0906	30.06
64	2.7967	30.45
80	3.4767	30.58
128	5.5575	29.68

表 4-1 オイラー・ラグランジュ計算における 1 ステップあたりの計算時間と，計算時間に占める粒子情報通信の前処理（配列の allocate 等）の割合

4.3. 乱流の特異構造の普遍統計則とその粒子群の振る舞いへの影響

乱流中に偏在する階層的渦構造に伴う強い揺らぎは，それにより輸送される粒子やスカラーの輸

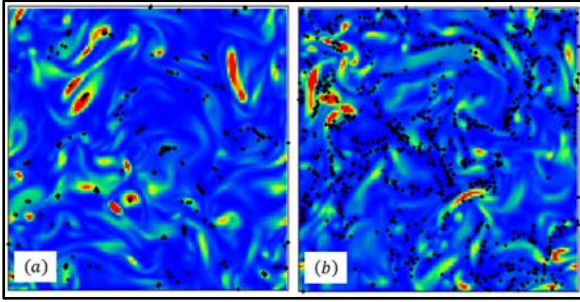


図 4-2 計算領域内の 2 次元断面内における粒子分布 (黒点) を示す. (a) マイクロバブル (b) 慣性粒子の場合で, それぞれ $\tau_b/\tau_K = 1$ とした. 背景の色は渦度の 2 乗値を示す (赤から青にむけて値は減少する).

送混合特性に大きな影響を及ぼすことが知られている. 特に粒子系が化学反応や相変化を伴う場合, 乱流の間欠的揺らぎが引き起こす粒子群の空間的局在化は, 反応・混合促進の鍵となる素過程であり, その役割を理解することは極めて重要である. 本研究では, 乱流中のマイクロバブル群のオイラー・ラグランジュ的大規模シミュレーションを実行し, 散逸場や渦度場の揺らぎによって条件づけられた粒子数密度分布等のデータを収集し, 特異構造の粒子・スカラー輸送の諸特性に及ぼす影響を解析した.

変形を考慮しない, 単一の微小なバブルの運動方程式は

$$\frac{d\mathbf{V}(t)}{dt} = 3 \left. \frac{D\mathbf{u}}{Dt} \right|_{\mathbf{Y}(t)} - \frac{1}{\tau_b} [\mathbf{V}(t) - \mathbf{u}(\mathbf{Y}(t), t)] - 2\mathbf{g} - [\mathbf{V}(t) - \mathbf{u}(\mathbf{Y}(t), t)] \times \boldsymbol{\omega}(\mathbf{Y}(t))$$

で与えられる. $\mathbf{Y}(t)$ はマイクロバブルの位置座標, $\mathbf{V}(t)$ はマイクロバブルの速度をそれぞれ表す. 乱流中に分散したマイクロバブルのような軽い粒子群は, 渦や散逸場の強い揺らぎと関連するような紐状の領域に集積する (図 4-2). 紐状構造が乱流場のどのような特性によって生じるのかを明らかにするために, 速度勾配テンソルの第 2 不変量 Q が粒子分布とどのような相関を示すか解析を行った. 図 4-3 は Q が負の領域に存在するマイクロバブルの割合が, 無次元化された緩和時間 τ_b/τ_K (ストークス数, τ_K はコルモゴロフ時間) にどのように依存するかを示した結果である. この結果より, ストークス数が 1 近傍で全体の 8 割程度が渦領域に集積していることが確認できる.

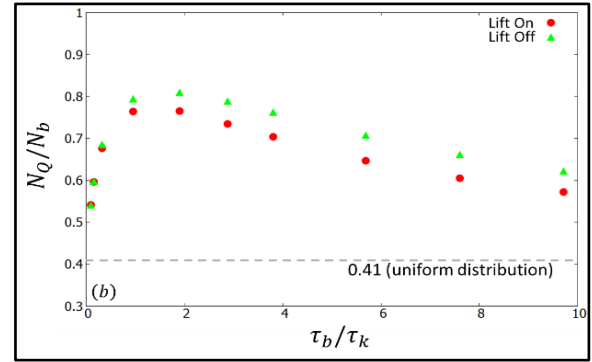


図 4-3 乱流中のマイクロバブルの渦領域への集積度合とストークス数の関係.

4.4. 粒子群と乱流の相互作用に関する高精度計算の検討

固体微粒子やマイクロバブル, 鎖状高分子の集団が分散した乱流場においては, 乱流摩擦抵抗低減に代表されるようにマクロ流動特性が劇的に変化する事が知られている. この問題は微小粒子群による乱流変調として捉える事ができるが, その素過程は極めて複雑であり, 第一原理に基づく解析が実施可能な問題は限られている. 故に, 粒子群は質点粒子の集団として扱うことが現実的なモデル化の第一歩となる.

質点粒子に働く流体抵抗とその流体への反作用力は, ストークス抵抗を点に集中させた単位体積辺りの力 $\mathbf{F}_{pi} = 6\pi\mu a(\mathbf{u}(\mathbf{t}, \mathbf{r}_i) - \mathbf{V}_i(t))\delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i)$ として計算される. この時, 粒子位置 $\mathbf{r}_i$ での流体速度 $\mathbf{u}(\mathbf{t}, \mathbf{r}_i)$ については, 粒子自身による速度擾乱を取

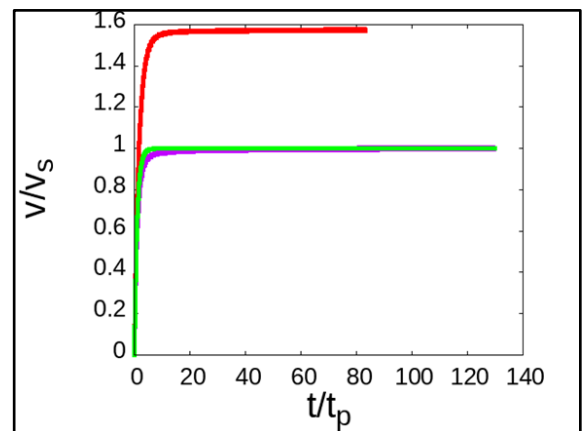


図 4-4 静止流体中を落下する質点粒子の速度の時間変化の様子. 緑の線は解析解を示し, 紫線が非擾乱速度を用いて得られる数値解である. 赤線は擾乱速度を含む場合であり, 理論解から大きくずれる.

り除いた非擾乱速度 $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{t}, \mathbf{r}_i)$ を用いなければ、抵抗は過小評価されることになる。しかし $\tilde{\mathbf{u}}(\mathbf{t}, \mathbf{r}_i)$ は一般的な流れ場では決まらないため、いくつかの近似評価手法が提案されている (Horwitz & Mani, JCP 318 (2016) 85; Ireland & Desjardins, JCP 338 (2017) 405; Yoshida et al., Chem. Phys. Lett. 737 (2019) 136809)。本研究では、先行研究における質点粒子に働く抗力評価を再考察し、本研究課題に沿う形で高精度・高効率計算を実現することを目指した。

2023 年度はストークスレットの解を用いた非擾乱速度の評価方法 (Yoshida et al., Chem. Phys. Lett. 737 (2019) 136809) に着目し、単一粒子の沈降問題についてこの方法の妥当性を検証した。この論文では、 x 方向の一樣流中の原点に $6\pi\mu a U^\infty$ の力が集中して加わっている場合に生じる流れの解 (ストークスレット)

$$\mathbf{u}^A = U^\infty \left[\left(1 - \frac{3a}{4r}\right) \mathbf{e}_x - \frac{3ax}{4r^3} \mathbf{x} \right]$$

を用い、 $\sum_{p=1}^8 |\mathbf{u}^N - \mathbf{V} - \mathbf{u}^A(\mathbf{x}_p)|^2$ が最小をとる U^∞ の値を非擾乱速度と評価し、抗力 $F_{pi} = 6\pi\mu a (U_\infty - V_i(t))\delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_i)$ を求めている。我々は射影法を用いた有限差分法の計算コードにこの方法を実装し、計算の妥当性について検討した。 x 軸方向に一樣な重力場 $\mathbf{g} = (g, 0, 0)$ の中で、静止した流体中を質量 m の質点が流体抵抗を受けながら自由落下する問題を解析した。計算領域は一辺の長さが 4π の立方体とし、計算格子点数は 128^3 とした。粒子レイノルズ数は 0.1、粒径と計算格子幅の比を 1 とし、終端速度が非擾乱速度を用いた場合とそうでない場合にどのように違うかについて解析した。結果を図 4-4 に示す。この結果より、非擾乱速度が提案された方法で精度よく求まることがわかった。

5. 今年度の研究成果の詳細

5.1 粒子輸送問題におけるコスト削減にむけたコード改良

統計理論が予測する三つのスケーリング領域の遷移波数の存在検証にむけた計算の大規模化に取

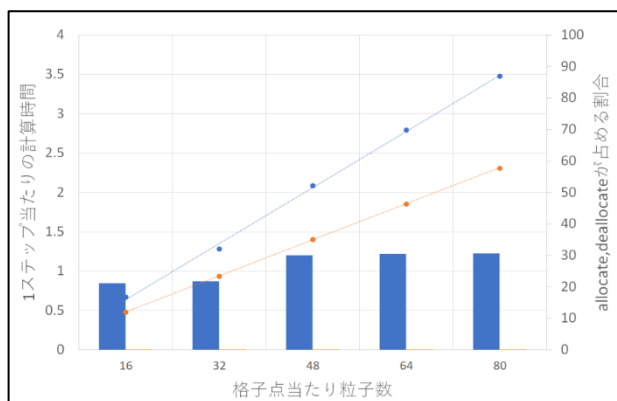


図 5-1 格子点辺りの粒子数の変化による計算時間と allocate-deallocate が占める割合。青が改良前、オレンジが改良後の結果を示す。棒グラフは allocate 等が占める割合を表す。

格子点あたり 粒子数	使用した メモリ量 [MiB]	格子点あたり 粒子数	使用した メモリ量 [MiB]
16	4079.2	16	4172.2(102.28%)
32	6901.2	32	7192.4(104.22%)
48	8626.4	48	10682.0(123.83%)
64	11207.7	64	13976.0(124.70%)
80	13755.7	80	17167.4(124.80%)
128	21150.2	128	27011.0(127.71%)

(a) 改良前

(b) 改良後

表 5-1 コード改良前と改良後のメモリ使用量の比較。最大で 30% 程度使用量が増加した。

り組んだ。昨年度からの解析により、粒子数を増大させると、粒子個数・位置・速度情報のプロセス間通信と用いる配列の再 allocation 等にかかる時間が全体の計算時間に対して 20% から 30% と大きな割合となることがわかった。そこで粒子数と通信に必要な配列サイズの関係性を事前に求めておき、固定サイズ配列を導入することで、配列の allocation と deallocation の回数をなるべく削減するようにコードを改良し、計算効率化の検証を行った。今回行ったシミュレーションの計算条件について記述する。計算領域は、1 辺 2π の立方体領域で、すべての方向に周期境界条件を課す。流体計算に用いる格子点数は $N = 128^3$ 、時間刻み幅は、 1.0×10^{-3} である。また、計算領域を実空間上で z 軸は分割せずに、 x 軸方向と y 軸方向のみを 4 等分した 16 個のプロセスに分けて並列計算を行っている。初期条件は、ランダムな流れ場を発生させ、各プロセスで均等になるように粒子をランダムに配置している。本研究で用いる粒子は、流体粒子とし質量を持たない質点とみ

なす。また、粒子同士の衝突も考慮していない。計算結果が初期状態の影響を受けないようにするため、まず初期状態から 10000 ステップ時間発展を行った。この状態を引き継いだ後、さらに 10000 ステップ分の計算を行い、この 10000step を計算するのにかかった時間を計測した。図 5-1 に得られた結果を示す。allocate-deallocate にかかる実行時間がそのまますべて削減されて、全体の実行時間を 1/3 程度削減できることがわかった。

計算で使用したメモリ量について表 5-1 にまとめる。改良後の表のカッコ内の数字は、改良前のメモリ量に対する割合を表している。計算時間は短縮されたが、メモリの消費量は増加していた。格子点あたり粒子数が 16, 32 個のときには数%増加するだけだったが、粒子数がそれ以上大きくなったときに 30%ほど使用するメモリ量が増加した。粒子数が小さい場合は、深く考慮することはなさそうに見えるが、粒子数が大きい場合には、消費するメモリ量に注意しなければならないことがわかった。

5.2 粒子群と乱流の相互作用に関する高精度計算の検討

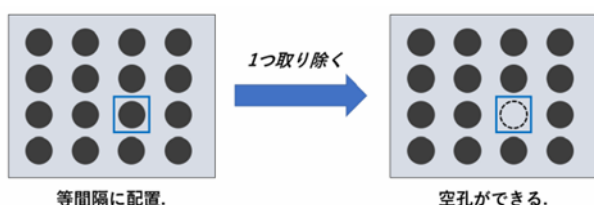


図 5-2 流体中に周期的に固定配置された粒子による非擾乱速度の評価方法。空孔の位置における流速を評価し、非擾乱速度とする。

先行研究で提案された、質点粒子に働く抗力評価を再考察し、高精度・高効率計算を実現することを目指している。昨年度はストークスレットの解を用いた非擾乱速度の評価方法 (Yoshida et al., Chem. Phys. Lett. 737 (2019) 136809) に着目し、単一粒子の沈降問題についてこの方法の妥当性を検証したが、その精度や多粒子系への適用に際して問題点も露呈した。そこで、本年度は周期的に固定した粒子群について、その中の一つ

の粒子を人為的に除去した場合に、その粒子が存在していた点における速度変動の差異から直接非擾乱速度を評価する方法の妥当性を検討した (図 5-2)。粒子の影響を受けた粒子位置での流速を $U(\mathbf{x}_p)$ 、粒子を取り去ったときの粒子位置での流速を $\tilde{U}(\mathbf{x}_p)$ とすると、粒子による流速の低下率は

$$C_d = \frac{\tilde{U}(\mathbf{x}_p) - U(\mathbf{x}_p)}{\tilde{U}(\mathbf{x}_p)} \times 100$$

と評価できる。粒子数密度や粒径を変化させたときに、低下率 C_d がこれらのパラメータにどのように依存するかを調べた。計算領域は一辺が 2π の立方体とし、周期境界条件に従う。動粘度は 0.02, 乱流場の計算格子点は 32^3 とし、粒子は等間隔に固定配置する。粒子数は $10^3, 13^3, 16^3, 21^3$ とし、それぞれについて粒子径を 0.04, 0.08, 0.12, 0.18 と変化させた。図 5-3 に C_d のパラメータ依存性を示す。

図 5-3 より、低下率は粒子径に比例して増加することがわかる。また、粒子から最近接格子点までの距離が長い時と比べ、短い方が低下率が大きくなることがわかる。これは粒子が大きくなれば、粒子位置での流速はより大きく低下することを意味している。

図 5-3 に示すように、数値計算で予め低下率を各パラメータの関数として決めておけば、それを用いて非擾乱速度を評価し、質点粒子に働く力を補正して流れ場の 2way カップリング計算に応用することができる。実際にこれを行い、乱流の運動エネルギー減衰における粒子群の影響の評価を試みたが、結果は非擾乱速度を用いない場合と比べて大きな違いが見いだせなかった。この事実は、粒子 Re 数の評価に基づいて、より適切な抵抗モデルを用いる必要があることを示唆している。

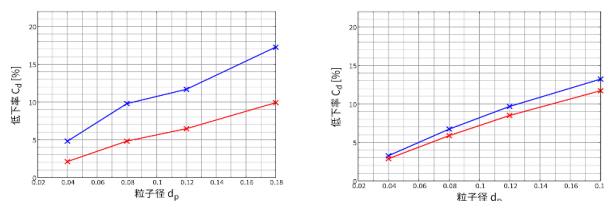


図 5-3 流体中に周期的に固定配置された粒子群に関する、流速低下率の粒子径依存性。左: 粒子数 13^3 , 右: 粒子数 21^3 であり、赤(青)点は最近接格子点からの距離が最大(最小)となるケースの結果である。

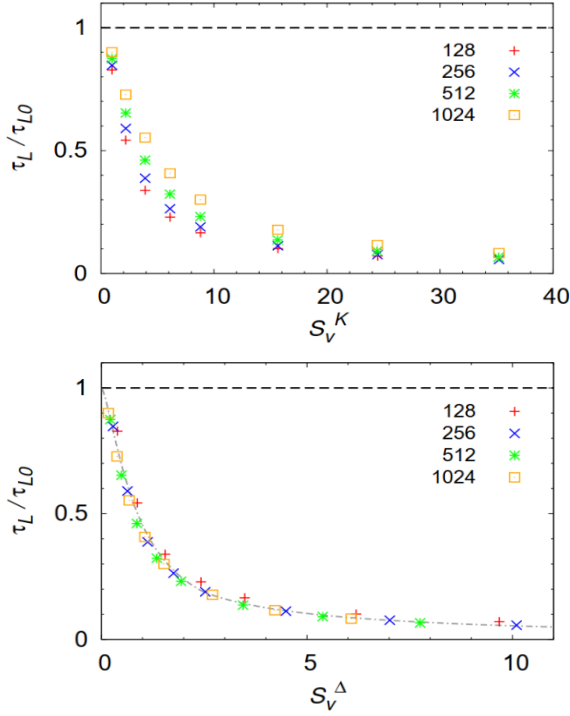


図 5-4 重力沈降する場合の相関時間 τ_L と沈降しない場合の相関時間 τ_{L0} に対する比. 上パネル: 変調を最小スケールの乱流渦に対する沈降パラメータ(S_V^K)で表した場合. 下パネル: 変調を最大スケールの乱流渦に対する沈降パラメータ(S_V^Δ)で表した場合. 点の種類はレイノルズ数 $R_\lambda = 25, 47, 80, 130$ の違いを示す.

5.3 雲乱流におけるラグランジュ時間相関

雲乱流中を運動する雨粒が経験する過飽和度揺らぎのラグランジュ的自己相関時間(τ_s)は、超水滴法に基づく雲モデルのパラメタリゼーションにおける重要なパラメータである。そこで乱流中の微小水滴が経験する、過飽和度揺らぎのラグランジュ的自己相関時間 τ_L に対する、水滴の重力沈降の影響を調べるためのシミュレーション解析を行った。3次元の周期箱を考え、速度場およびスカラー場（過飽和度場）に対し白色ランダムな外力を注入することにより一様等方性乱流を駆動する。多数の質点粒子を乱流場に移流させ、統計的平衡状態において粒子が経験するスカラー揺らぎのラグランジュ的自己相関時間を計測する。重力の影響が無い場合と有る場合の相関時間をそれぞれ τ_{L0} および τ_L とし、比 τ_L/τ_{L0} によって変調の程度を調べる。乱流速度場に用いる格子点数は 128^3 , 256^3 , 512^3 , 1024^3 とし、それぞれのテイラ

ー長レイノルズ数は $R_\lambda=25, 47, 80, 130$ である。

図 5-4 に τ_L/τ_{L0} について結果をまとめたものを示す。ここで、上パネルは粒子の重力沈降の影響の程度を表す沈降パラメータにおいてコルモゴロフ速度 v_K （最小スケールの渦の特徴的速さ）を用いて $S_V^K = V_T/v_K$ （ V_T は粒子の終端速度）とした場合、下パネルは乱流速度場の RMS 速度 v_{rms} （最大スケールの渦の特徴的速さ）を用いて $S_V^\Delta = V_T/v_{rms}$ とした場合の結果を表している。両パネルを比較すると、いずれも沈降パラメータが大きいほど変調の程度が大きくなり、 τ_L は τ_{L0} と比べて短くなっていることが分かる。しかし、計算結果は下パネルの方が一つの曲線上に集まっている。この結果より、相関時間の変調を特徴付けるパラメータとしては S_V^Δ が適切であること、つまり変調において大スケールの乱流渦が重要な役割を果たすことが明らかになった[8, 10]。

5.4 乱流の特異構造の普遍統計則とその粒子群の振る舞いへの影響

乱流の特性を調べる時、最も重要になるのが

乱流運動エネルギー散逸率 $\varepsilon = \frac{\nu}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2$ で

ある。これは乱流中の時空間で激しく変動し（乱流の間欠性）、その確率密度関数（PDF） $P_3(\varepsilon)$ は正規分布とは大きく異なり長い裾野を持つことが知られている。 ε は速度ひずみテンソルの 9 成分の 2 乗和として定義されるが、室内実験での計測や大気乱流の観測においてはその定義に従って ε の計測を行うのは極めて困難であるため、その 1 次元代替量 $\epsilon_1 = \nu(\partial u/\partial x)^2$ と等方性の仮定により $\varepsilon = 15\epsilon_1$ として計測し、その揺らぎの PDF $P_1(\epsilon_1)$ が求められてきた。一方で乱流の数値計算では $P_1(\epsilon_1)$ の裾は $P_3(\varepsilon)$ よりも随分と長く、この理由が不明であった。我々は、等方性乱流の場合において $P_3(\varepsilon)$ と $P_1(\epsilon_1)$ の変換関係式を導くことに成功した。さらに、エンストロフィ($\Omega = (\nabla \times \mathbf{u})^2$)の PDF $Q_3(\Omega)$ とその 1 次元成分($\Omega_1 = (\nabla \times \mathbf{u})_1^2$)の PDF $Q_1(\Omega_1)$ との変換関係式をも導くことができた[2]。図 5-5 は乱流の大規模シミュレーシ

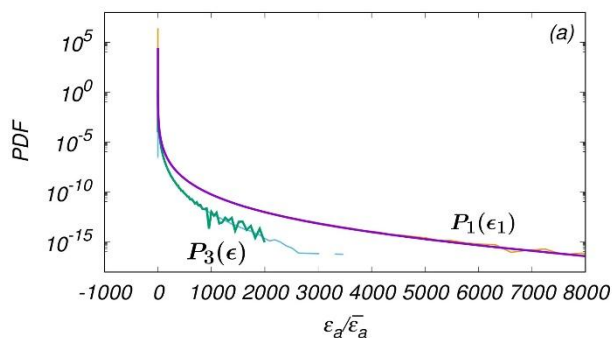


図 5-5 大規模シミュレーションにより得られた $P_1(\epsilon_1)$, $P_3(\epsilon)$ (細線)と変換により得られた PDF $P_{1\rightarrow 3}(\epsilon)$ と $P_{3\rightarrow 1}(\epsilon_1)$ (太線)との比較. $R_\lambda = 956, N = 4096^3$, 平均時間は $8.5T_e$ (T_e : 巨視的渦回転時間).

シミュレーションにより得られた $P_1(\epsilon_1)$, $P_3(\epsilon)$ (細線)と理論解析に基づく変換公式を用いて得られた PDF $P_{1\rightarrow 3}(\epsilon)$ と $P_{3\rightarrow 1}(\epsilon_1)$ (太線)との比較を示したものである. 両者はよく一致しており, 変換公式が正しいことが検証できた[11,12].

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

6.1 粒子輸送問題におけるコスト削減にむけたコード改良

粒子情報の通信に関するコードの書き換えにより, 予想通りの高速化が達成できたと考えている. コードの基本的な構造を粒子によるスカラー輸送コード[1]や, 雲乱流コード, ポリマー混入流コードなどに移植を進め, 内部自由度を有する粒子群の乱流輸送計算について計算の効率化を図ることができた. 現状満足いく計算が効率化・高速化を達成できたので, 今後は各テーマで具体的な成果をアウトプットしていくことを目指したい.

自己評価: 90 点/100 点

6.2 粒子群と乱流の相互作用に関する高精度計算の検討

昨年度から質点粒子と乱流場の相互作用を扱う数値計算において, 質点に作用する抗力の正確な評価法について検討を進めてきた. 過去に提案された手法について検証を行ってきたが, 粒子の大きさを厳密に考慮した計算結果との乖離についての問題点が残ったままであった. そこで, 粒子位

置における非擾乱速度を直接的に評価する方法を採用し, 実際に粒子径や粒子密度をパラメータとして低減率を評価することを試み, 結果を得ることができた.

得られた低下率を応用して, 乱流エネルギーの減衰率を解析する計算を行ったが, 得られた結果は, 補正を導入した計算に比べれば, わずかに有限サイズ粒子による結果に近づいたが, 依然として, 改善の余地が残る結果となった. 本研究における低下率を求める計算では, 粒子レイノルズ数 Re が, $1.6 < Re < 8.9$ の範囲にあり, ストークス抵抗が精度よく得られる適用範囲 $Re < 1$ よりは少し大きい条件であった. 従って, ストークス抵抗を用いて計算を行った本研究では, 求められた低下率 Cd は過小評価されている可能性があるため, 今後は $Re > 1$ の範囲でも近似的に成り立つようなモデル式を考慮した計算を行って再検討を行う必要がある.

自己評価: 50 点/100 点

6.3 雲乱流におけるラグランジュ時間相関

乱流的な雲環境内において水滴が経験する過飽和度揺らぎのラグランジュ統計と, それに対する水滴の重力沈降の影響を明らかにすることは, 近年注目され開発が進んでいる超水滴法に基づく雲モデルにおいて, 超水滴の凝縮成長を計算する際に用いられるサブグリッドスケールモデルにおいて重要である. 本研究では, 雲乱流内で水滴が経験する過飽和度揺らぎのラグランジュ統計について, 水滴の重力沈降の影響を調べた. その結果, 自己相関時間の変調には大スケールの乱流渦が重要な役割を果たすことが明らかになった.

今後の課題としては, 図 5-4 において $St_p < 1$ の領域における振る舞いの理論的な解釈を与えることがあげられる. また, 雲乱流の LES (ラーゼエディシミュレーション) により得られる過飽和度揺らぎのなかでの雲粒子成長のランジュバンモデルの開発も検討してゆく.

自己評価: 80 点/100 点

6.4 乱流の特異構造の普遍統計則とその粒子群の 振る舞いへの影響

乱流中の運動エネルギー散逸率とその 1 次元代替量の確率密度関数間の変換関係を導き大規模計算により検証した。1 次元代替量は実験では測定が容易であり、3 次元散逸率との関係性を明確にしたことにより、乱流・雲乱流における間欠性の研究、特に実験・観測による計測結果の解析に大きく貢献すると期待される。

今後は、運動エネルギー散逸率とその 1 次元代替量の間欠性の問題、特にスケール r で粗視化されたこれら 2 つの散逸率 $\langle \epsilon_r^n \rangle \propto r^{-\zeta_n}$, $\langle \epsilon_{1r}^n \rangle \propto r^{-\xi_n}$ のスケーリング指数 ζ_n と ξ_n の関連性をそれぞれの確率密度関数と結び付けて調べる重要な課題として挙げられる。

粒子群と特異構造の関係について、昨年度はマイクロバブルの挙動と速度勾配の関係性について議論してきたが、本年度はこの点ではあまり進展がなかった。これについては、現在変形を有する気泡と乱流の相互作用に関する解析を進めるべく、コード開発などの準備を行っている。流れ場との相互作用についてモデル抗力を導入することなく、解析が実施できるのがポイントである。これについては、来年度の研究課題として研究を進める予定である。

自己評価： 70 点/100 点

※7. 研究業績はウェブ入力です