

11-NA19

雲マイクロ物理解明のための計算科学的基盤構築

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大規模シミュレーションコードを開発した。非圧縮性乱流場には FFT，温度場などのスカラー場には並列化結合コンパクト差分を用いるハイブリッドコードを開発し，スペクトル法と同等の空間精度が得られることが分かった。高シュミット数でのスカラーゆらぎのスペクトル解析に応用し，普遍平衡領域での k^{-1} スケーリングを得，普遍定数を求めた。乱流中の雲粒子の成長を解析するコードを作成し，雲粒子半径の成長，減衰，空間分布を解析する試験計算を行った。平均雲粒子半径は時間とともに小さくなり，雲粒子半径の確率密度分布の幅は拡大し非対称になる結果を得た。また，雲粒子からの潜熱の出入りによる乱流への浮力効果を解析し，高波数側から低波数側への逆エネルギー輸送が存在することを初めて見出した。さらに，水分子集団から雲粒子生成解明のための高速な分子動力学アルゴリズムを開発した。

1. 研究の目的と意義

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ため，雲物理の解明と予測は地球環境問題における欠かすことのできない課題である。雲粒子はその生成核として海塩粒子，放射性物質や煙粒子などを取り込み，これらは乱流により輸送され降雨により地上に到達する。また，雲中に存在する乱流は雲粒子の衝突，合体，成長，降雨の促進などに深くかかわっていると考えられている。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，乱流混合と雲粒子の相互作用をはじめとする雲マイクロ物理過程の解明にむけて，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た基礎計算技術の開発を目的とする。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。数 10cm^3 から 1m^3 程度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形成に影響を及ぼすのか，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，それらの空間分布や粒子半径の分布はどのようなになっているのかについて大規模並列計算を用いて解析を行う。

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 $10\mu\text{m}$ 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。そして，これらを巨大並列計算機上で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，効率の良い粒子追跡手法，流体場と粒子との相互作用の高精度計算などについて，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

雲の発生には多くの物理過程が存在し，その特性スケールは 10km から数 μm まで 10 桁以上にわたる。その重要さにも関わらず実験や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 10 cm から数 μ m 程度までの現象を対象とした雲の物理過程をできるだけ忠実に再現できる雲マイクロ物理シミュレータを構築する。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す、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、多数のノードを持つ計算機の効率的な利用法、異なる種類の計算機の同時的使用が求められる。非圧縮流体方程式専用高精度高並列ソルバーを開発することは大変重要である。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、高精度差分法は雲物理解明には欠かせない数値計算法であり、スケー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。

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 計算応用科学分野	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 計算応用科学分野	大規模並列計算機に向けての粒子間相互作用および雲粒子核形成の高速計算法の開発
渡邊威	名古屋工業大学 創成シミュレーション工学専攻 計算応用科学分野	Navier-Stokes のオイラー・ラグランジュ 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
津邑公暁	名古屋工業大学創成シミュレーション工学専攻 計算システム工学分野	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

(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

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、ペタスケールマシン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。高効率なプログラムの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不可欠である。きわめて多数のプロセッサ間の通信とキャッシュの利用など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 シミュレーションも必要である。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がふさわしい。

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

本研究では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、合体、降雨は考えない。浮力はブシネスク近似により扱うので Navier-Stokes 方程式、連続の式、熱と水蒸気のスカラー輸送方程式は

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + B \mathbf{e}_z + \mathbf{f} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla T = \kappa \nabla^2 T + \frac{L}{c_p} C_d \quad (3)$$

$$\frac{\partial q_v}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla q_v = \kappa_v \nabla^2 q_v - C_d \quad (4)$$

$$B = g \left(\frac{T - T_0}{T_0} + \epsilon (q_v - q_{v0}) - q_l \right) \quad (5)$$

$$q_l = \frac{4\pi\rho_l}{3\rho_0\Delta^3} \sum_{j=1}^{N_\Delta} R_j^3 \quad (6)$$

で与えられるとする. ここで, B :浮力, f :外力, T :温度, q_v :水蒸気混合比, q_1 :水分混合比, κ :熱伝導率, κ_v :水蒸気拡散係数, L :潜熱, c_p :定圧比熱, C_d :凝縮率, (T_0, ρ_0, q_{v0}) :乾燥空気の基準温度, 基準密度, 水蒸気基準混合比, $\varepsilon=0.622$, Δ :計算格子幅, g :重力加速度である. また, j 番目の雲粒子は半径 $R_j(t)$ の球であると仮定し位置 $X_j(t)$ に速度 $V_j(t)$ で運動しているとする. と方程式は次式で与えられる.

$$\frac{dX_j}{dt} = V_j(t) \quad (7)$$

$$\frac{dV_j}{dt} = \frac{1}{\tau_j(t)} (u(X_j(t), t) - V_j(t)) - g e_3 \quad (8)$$

$$R_j(t) \frac{dR_j(t)}{dt} = KS(X_j(t), t) \quad (9)$$

$$C_d(x, t) \equiv \frac{1}{m_{air}} \frac{dm_l(x, t)}{dt} \quad (10)$$

$$= \frac{4\pi r_l K}{\rho_0 \Delta^3} \sum_{k=1}^{N_\Delta} R(X_j, t) S(X_j(t), t) \quad (11)$$

$$\tau_j(t) = \frac{2}{9\nu} \frac{\rho_l}{\rho_0} R_j^2(t) \quad (12)$$

ここで, $\tau_j(t)$ は j 番目の粒子の緩和時間であり, N_Δ は計算格子内に含まれる雲粒子数, S は水蒸気過飽和比であり K は雲粒子表面での水蒸気拡散係数に相当する因子で,

$$S = \frac{q_v}{q_{vs}(T)} - 1, \quad (13)$$

$$K^{-1} = \frac{q_l R_v T}{D_v e_{sat}(T)} + \frac{\rho_l L}{\kappa_a T} \left(\frac{L}{R_v T} - 1 \right) \quad (14)$$

で与えられる. ここで, R_v は水蒸気の気体定数である. 雲粒子の衝突は当面ないと仮定する.

[1] 乱流スカラー方程式のハイブリッドコードの改良と精度検証

水蒸気などの乱流スカラー輸送方程式の数値計算においては非圧縮速度場にはスペクトル法を, スカラー方程式には並列化結合コンパクト差分法 (CCD と略記) を用いるハイブリッド乱流スカラーコードを H22 年度から継続して改良した.

H23 年度前半では FFT と CCD を温度場などのスカラーの乱流混合方程式に実装し, 徹底した精度検証を行った. 方程式系は (1) 式で浮力項 B を 0 とし, (2) 式はそのまま, (3) 式で潜熱 L を 0 としたものである. FFT では 2 次元分割, CCD

表 1: 乱流スカラーハイブリッドソルバーの計算効率. スペクトル法に対して $Sc=1$, 50 の時にそれぞれ約 30%, 約 4 倍の高速化が図られた.

	$N_{velocity}$	N_{scalar}	Sc	Cores	計算時間(sec/step)
Spectral	1024	1024	1	4096	6.78
Hybrid	256	50	50		4.85
					1.60

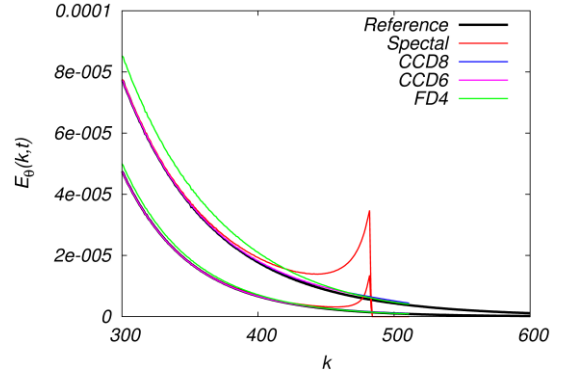
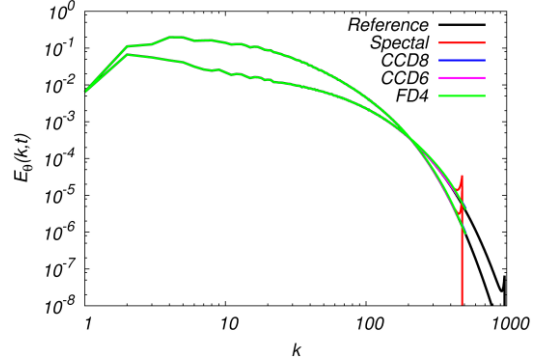


図 1: スペクトル法とハイブリッド法 (8 次と 6 次の結合コンパクト差分) および 4 次の中心差分について 2 つの時刻でのスペクトルの比較. 上図はスペクトル全体. 下図は切断波数近傍での拡大図. ハイブリッド法によるスペクトルは格子点数 2048³ の基準場のそれとよく重なっている.

においては 3 次元分割による混合型並列化を導入した. 表 1 はシュミット数 ($Sc=v/\kappa$ =粘性係数/拡散係数) が 1 と 50 におけるスペクトル法とハイブリッド計算による計算時間の比較である. $Sc=1$ の時には, 約 30% の加速が得られた. 速度場の計算にはスペクトル法を用いているので, ハイブリッド法によるスカラー部分の計算に限れば約 50% の加速に相当する.

この計算手法の精度検証は重要である. ハイブリッド法による乱流スカラー場の空間精度を解析するために揺らぎスペクトル, スカラー場の空間微分の確率密度関数, スカラー場の振幅などをスペクトル法, CCD6 (6 次精度), CCD8 (8 次精度), FD4 (4 次精度中心差分) の各スキームで 1024³ の格子点上で計算した結果を比較した. さらに

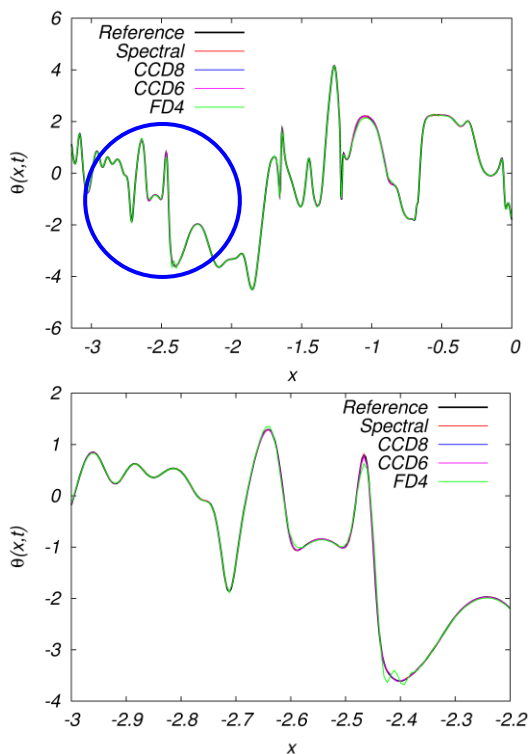


図 2：各計算スキームによるスカラー場の 1 次元プロットにおける比較。上図の円内を拡大したものを下図に示した。結合コンパクト差分は基準場とよく一致し、4 次中心差分は急激な変化 ($x = -2.4$ 近傍) を再現できない。

2048³ の格子点上でのスペクトル法による計算結果を正確な基準場 (Reference) としてこれに対するの相対評価も行った。

図 1 では 2 つの時刻におけるスカラー揺らぎ分散のスペクトルについて、波数全体と切断波数近傍でのスペクトルを比較したものである。各スキームとも全体的には基準場のそれとよく重なっている。しかし、切断波数近傍での振る舞いをよく見ると、スペクトル法(格子点数 1024³) は切断波数近傍で特徴的な上昇がみられ、4 次精度の差分では基準場より大きいスペクトルになっている。この波数領域でのスペクトル誤差を問題にするのは以下の理由による。雲粒子は数 10 ミクロンから数 100 ミクロン程度であり、このスケールにおける水蒸気混合比や温度ゆらぎに応じて雲粒子半径が変化する。このスケールに対応する波数は図中のスペクトルの右端領域かそれ以上であるので、高波数領域での温度や水蒸気混合比の高精度な計算が重要となるのである。同様に、温度場などの空間変化も重要である。図 2 は、各計算スキームによるスカラー場を x 軸方向に沿ってプロット

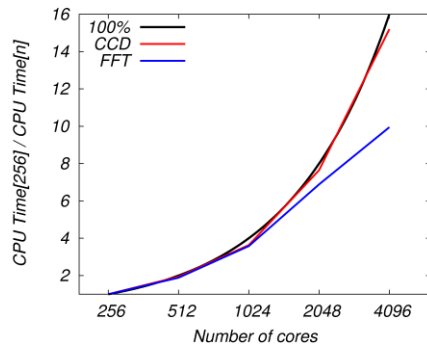


図 3 FFT と CCD のスケーラビリティ。256 コアの時の CPU 時間を n コアの時の CPU 時間で割ったもの。赤線：CCD, 青線：FFT, 黒線：理想的スケーラビリティ。

したものである。上図には全体を、上図中の円内にある部分を拡大したものを下図に示した。ハイブリッド法による曲線は基準場によく追従しているが、4 次精度差分では急激な変化に追従できていないことが見て取れる。

全領域における計算精度を知るためにスカラー勾配 $\partial \theta / \partial x$ の確率密度関数(PDF)も調べた。よく知られているように、この PDF は非正規性が強く広い裾野を持っている。ハイブリッド法による PDF はスペクトル法と同一の結果を出しているが、FD4 による PDF の裾野はより低くなっていることがわかった。これは、スカラー場の急激な変化を追跡できていないことによる。

本年度後半では FFT と CCD のスケーラビリティの詳しいデータをまず採取した。試験関数 $\sin x \sin y \sin z$ の空間微分を 1024³ の空間格子点数でコア数を 4096 まで変化させて計算して計測した。256 コアの時の計算時間を n コアの時の計算時間で除したものを図 3 に示す。コア数 2048 までは両者とも理想的なスケーラビリティを示すが、FFT はそれ以上のコア数では伸び悩む一方、CCD は完全なスケーラビリティを示す。また、両者のスパコンのピーク性能に対する性能評価を行い、FFT は約 2%程度であるが、CCD は 10%以上の性能をだすことが分かった。

つぎに、ハイブリッド法による乱流スカラーソルバーを高シュミット数の場合に拡張した。この場合には、速度場がスカラー場に比べて空間的に十分滑らかであるという物理的根拠に基づき、速度場の格子点数をスカラー場に対して相対的に減

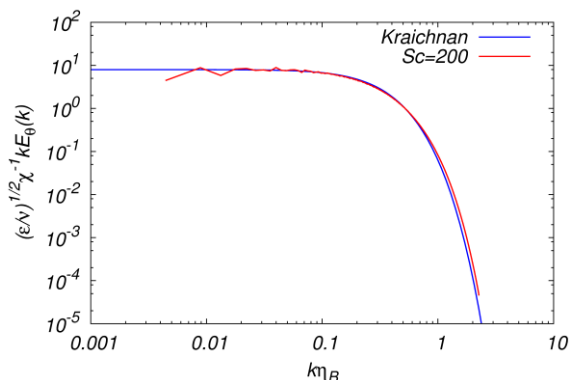


図5 Sc=200 における波数 k をかけた定常スカラースペクトル $kE_\theta(k)$. 赤: ハイブリッドスキームによる DNS, 青: Kraichnan による理論. 水平部分が k^{-1} の普遍平衡部分に相当する. C_B は約 5 と求められた.

らすことができる. これを利用して $Sc=50$ の場合に計算を行った. 表 1 下段に示すように, 約 4 倍という劇的な加速が得られた. また, $Sc=1$ の時と同様の空間精度の検証を行い, スペクトル法と同等の精度が得られることを確認した(論文[1]).

この高精度高効率なハイブリッドコードを高シミュット数の乱流スカラー揺らぎのスペクトル解析に応用した. $Sc \gg 1$ の場合には粘性-移流領域 (viscous-convective range) と呼ばれる普遍平衡領域が存在し, スカラースペクトルは

$$E_\theta(k) = C_B (\nu/\epsilon)^{1/2} \chi k^{-1}$$

と理論的には予測されている. ここで C_B は普遍定数, ϵ と χ はそれぞれ乱流エネルギー及びスカラー分散の散逸率である. 実験や直接数値計算 (DNS) では上記のスペクトルの十分な確認はできてはいない. スカラー乱流輸送方程式の DNS を空間格子 2048^3 で 4096 コアを用いて解析した. 図 4 は $Sc=200$ における $kE_\theta(k)$ を波数についてプロットしたものである. 確かに k^{-1} の漸近的スペクトルが存在することが確認され, 普遍定数 $C_B=5$ と求められた. 理論曲線との一致は申し分ない.

以上の比較から, 乱流スカラーハイブリッドソルバーの精度はスペクトル法と同等でかつ高速であることが示せたと同時に, 乱流スカラー輸送の計算にハイブリッド法を用いる基礎ができた.

[2] 乱流による雲粒子輸送シミュレーションコードの開発

今年度の前半では, 上記方程式のうち温度場と

表 2 : 計算パラメータおよび乱流統計量
上: 数値計算パラメータ, 下: 乱流諸量

格子点数:	N^3	256^3	雲粒子数:	N_p^3	128^3
時間刻み幅:	Δt	5.0×10^{-4} s	初期粒子半径:	$r(0)$	20 μm
乱流 Reynolds 数:	Re_τ	268	初期緩和時間:	$\tau_p(0)$	1.40×10^{-3} s
Kolmogorov 時間:	τ_K	4.11×10^{-2} s	初期 Stokes 数: $St = \tau_p/\tau_K$	$St(0)$	1.36×10^{-2}
力を入れる波数領域	$1 \leq k \leq 2$				
Taylor micro scale Re 数: Re_λ	98	Taylor micro scale:	λ	1.53 cm	
解像度条件:	$k_{max} \eta$	2.28	積分長:	L	5.06 cm
運動エネルギー:	E	139 cm^2/s^2	Kolmogorov 長:	η	7.85×10^{-1} cm
エネルギー散逸率:	ϵ	89.4 cm^2/s^3	Root mean squared velocity: u_{rms}	9.60 cm/s	
縦速度微分のひずみ度: S	-0.525	渦回転時間:	T_{eddy}	0.527 s	

浮力項を無視し, 雲粒子半径の変化に伴う粒子特性時間は変化しないとした系で解析を行った. 今年度後半では方程式(1)から(14)まですべての方程式を取り込んだプログラムを作成して, 乱流と雲粒子系のフルシミュレーションを行った.

1 辺の長さを 25.6 cm に設定した立方体内で, 周期境界条件を仮定し, 乱流場と水蒸気場についてはスペクトル法を用い, 雲粒子と流体とのやり取りは PIC を用いた. 粒子位置における速度ベクトルと水蒸気は周囲の格子点から 2 次補間により求め, また凝縮率 C_d の流体格子点への分配は重み関数を用いて行っている. 雲粒子の乱流への作用は, 雲粒子に働く流体抵抗の反作用として流体に作用する寄与と, 潜熱の出入りに伴う浮力として流体に作用する分があるが, 本研究では後者のみを考えている. これは雲粒子密度が小さいことと関連している. 雲粒子と乱流との相互作用を見るために, 2 種類の計算を行った.

定常乱流を生成し, ある時刻 (この時刻を時間の原点にとる) で雲粒子を導入し, 外力を取り去り乱流を自由減衰させる. (1) 式において

Case A: 浮力項 B を取りさる (乾燥乱流)

Case B: 浮力項 B をつけ加える (湿潤乱流)

の 2 つの場合である. 高度 1500m, 地上温度 10°C での状況を想定して $K=5 \times 10^{-11}$ [m^2/sec] に設定した. 鉛直方向の中央を挟む厚さ 25/8[cm] の水平領域に半径 20 μm の雲粒子をランダムに配置し, 同時にこの部分での水蒸気過飽和度を最大 2%, 界面では滑らかにかつ急速に -10% 程度まで減少するように設定し, 温度ゆらぎは 0 とした. その他の計算パラメータと乱流特性値は表 2 に示した. 格子点数は 256^3 , 粒子数 128^3 とさほど大きくは

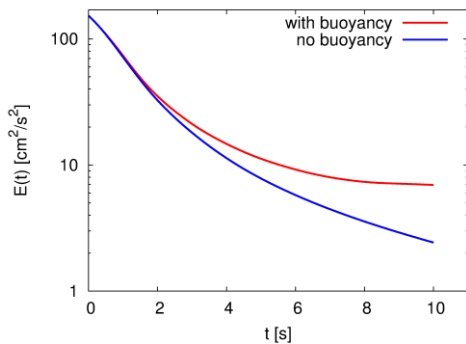


図 6 乱流運動エネルギーの時間発展 青：浮力項なし，赤：浮力項あり

ない。計算は 16 ノード 64 プロセスで Flat MPI 並列計算を名古屋大学の FX1 を用いて行われた。

Siebert (J. Atmos. Sci. 2010)らは観測機器を 140m のケーブルでヘリコプターからつり上げ、厚さ約 200m の層雲の雲上、雲中での乱流特性を観測した。それによると $R_\lambda \sim 5000$ ，平均乱流エネルギー散逸率 $\varepsilon = 2 \sim 3 [\text{cm}^2/\text{sec}^3]$ ，コルモゴロフ長さ $\eta = 1.8 [\text{mm}]$ ，平均雲粒子密度 $N_d = 200 [\text{cm}^{-3}]$ の値を得た。またコルモゴロフスペクトル $E(k) \propto k^{-5/3}$ を観測し雲中の乱流はこれまで実験室で解析されてきた乱流と同様の特性を持っていることがわかってきた。一方，本数値計算による定常乱流の統計的特性量は $R_\lambda = 98$ ， $u_{\text{rms}} = 9.6 [\text{cm}/\text{sec}]$ ， $\varepsilon = 89 [\text{cm}^2/\text{sec}^3]$ ， $\eta = 0.79 [\text{mm}]$ ， $N_d = 125 [\text{cm}^{-3}]$ である。雲粒子半径が $10 \mu\text{m}$ 程度なのでストークスの線形な抵抗法則を用いることができ，重力による終端速度はこのサイズでは約 $1 [\text{cm}/\text{sec}]$ で u_{rms} の 10% である。DNS の規模が小さいのでレイノルズ数は 2 桁小さく，平均エネルギー散逸率は過大評価され，コルモゴロフ長さは約半分になっている。一方，雲粒子を含まない世界最大規模（格子点数 2048^3 ）の乱流スカラー輸送計算では， $R_\lambda \sim 688$ でコルモゴロフスペクトルを係数まで計算し実験値とよい一致を得ている(論文[2])。

図 6 は 2 つの場合における乱流運動エネルギーの時間変化である。注目すべきは，初期には 2 つの場合とも乱流エネルギーは減衰していくものの，Case B では後時刻で乱流の減衰が見られないことである。エネルギースペクトル (図 7) を見ると，Case B では高波数側でスペクトルの飽和が起こっている。時間経過とともにこの飽和は低波数側へ

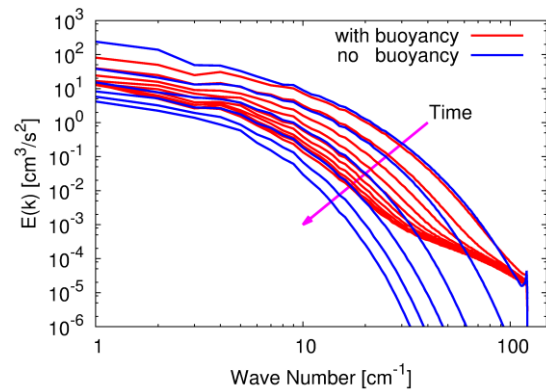


図 7 乱流運動エネルギースペクトルの時間発展 青：浮力項なし，赤：浮力項あり

と伝搬していき，やがて全波数領域でエネルギースペクトルの減衰が遅延している。詳細は今後の解析を待たないといけないが，この事実は，浮力項を通して雲粒子から乱流場へのエネルギー注入が高波数側で起こり，それが低波数側へ輸送されていることを強く示唆している。従来の乱流理論では低波数側でエネルギーが注入され，エネルギーカスケードにより高波数側へ輸送されるという描像であったが，この DNS の結果はこの描像とは大きく異なるものであり，大変興味深い。

図 8 では，初期時刻から 0.6 秒後での温度ゆらぎ，水蒸気混合比，雲粒子位置を示したものである。今回の初期条件の設定では，立方体内の全水蒸気量が小さいので，十分時間がたつと系全体では未飽和となり雲粒子はすべて蒸発する。従って，平均雲粒子半径は時間とともに小さくなり，雲粒子半径の確率密度分布の幅は拡大し非対称になる結果を得た。そして，蒸発により潜熱を吸収し，周囲の空気は冷やされ重くなるので下降するようになる。これが乱流の運動エネルギーの飽和メカニズムであろうと推測している。この推測を裏付ける解析が今後必要であるが，雲中の乱流の維持機構についての大きなヒントを示唆している。

[3] 水分子集団の動力学コード

上のシミュレーションでは，雲粒子は初めから存在することを前提としている。しかし，雲マイクロ物理過程の解明においては水蒸気中でどのようにして雲粒子が形成されるかの基本プロセスの解明も重要である。そこで，分子動力学手法を用

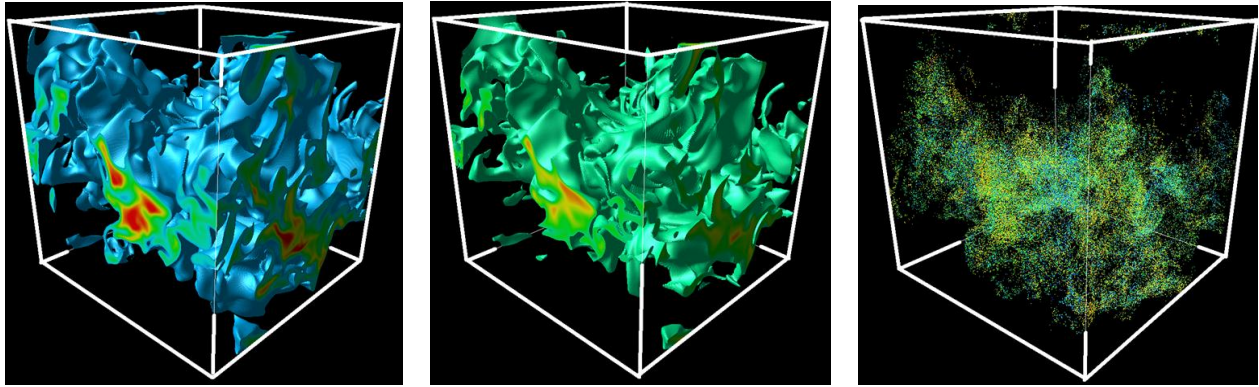


図8 t=0.6 sec での温度ゆらぎ ($T>0$, 左図), 水蒸気混合比 (過飽和領域, 中図), 雲粒子分布 (右図). 雲粒子半径は赤から青になるにしたがって減少する.

いたコード開発の準備も少しずつ行ってきた. 雲粒子における原子から構成された水分子等について, その集合体の大規模構造や蒸発・凝集過程 (気液共存) をシミュレーションする際には, 個々の分子を剛体として扱うことが良く行われている. このような系を扱うシミュレーションアルゴリズムには時間反転対称性を持たせることが, その長時間安定性のために必要である. しかし, 剛体系では, 分子の角運動量の時間反転対称性を満たすアルゴリズムを作ることは容易でない.

今年度後半では, 分子動力学グループにより時間反転対称性を 1 タイムステップの前後で数値的に厳密に満たすように角運動量を繰り返し法で補正する方法が新たに考案され, 小規模 (数百分子) 水分子系の動的シミュレーションに適用し, 既存のアルゴリズムに匹敵する長時間安定性を持つことを確認した (論文[3]). さらに計算時間がかかる繰り返し法を使わないで厳密に時間反転対称性を満たすように改良しており, ベンチマークテストにより既存の諸アルゴリズムと比較して最も高速なアルゴリズムであることを実証した (論文[4]).

(2) 当初計画の達成状況について

この研究の数値計算上のポイントは, [1] 高速で高効率な乱流スカラーソルバーの開発とそれによる乱流混合輸送のシミュレーション, [2] 雲粒子コードの開発とモデルの検証と高速化, [3] 雲粒子コードの乱流スカラーソルバーへの実装, [4] 雲粒子形成の分子動力学コード開発, である.

[1] については

- (1) 高効率 3 次元 FFT の開発と実装
 - (2) 並列化結合コンパクト差分スキームの開発
 - (3) 両者を組み合わせた乱流スカラーハイブリッドソルバーの作成, 効率化と精度検証
- を行ってきた. (1), (2) は H22 でほぼ完成し, (3) も今年度で達成できたと考えている. これらの成果は論文として J. Comp. Phys. に投稿中 (論文[1]) である. 更に進んで, 並列化結合コンパクトスキームの非圧縮流体乱流ソルバーへの試験的な応用も行い, 空間精度を減ることなく計算時間の面で改良が期待できることがわかった. また, 乱流スカラーハイブリッドソルバーの高シュミット数の乱流スカラー輸送への応用が行われ, 十分な時間平均のもとで安定した統計状態での普遍平衡領域の k^{-1} スペクトルや普遍定数 C_B が求められたことはコードの高並列性と高速性の成果である.

[2] と [3] については,

- (1) 雲粒子と水蒸気および温度との結合, そして浮力との結合
 - (2) 雲粒子の特性時間の半径依存性
- すべてを取り入れたコードが完成し, 乱流場, 温度および水蒸気と雲粒子全体のシミュレーションが実行できるようになった. 雲粒子の空間分布や粒径分布, 温度や水蒸気の混合, 凝結・蒸発, 浮力を通しての乱流と雲粒子との相互作用についての解析が行えるようになったので, 当初の目的を達成できたと考えている. スペクトル法による乱流スカラーソルバーへの雲粒子コード実装はほぼ

完成したが、更に高速高効率化を進めるため、乱流スカラーハイブリッドソルバーに雲粒子コードを移植する作業を進めている。

[4]については、雲粒子核とその周囲の水蒸気雰囲気からどのように雲粒子が形成されるかについてのよりミクロなシミュレーションの可能性が期待できるところに来た。特に角運動量計算における時間反転対称性を満たす改良された高速アルゴリズムを用いて大規模な水分子系のためのコードの開発を現在進めている。

4. 今後の展望

雲マイクロ物理過程解析のための基本コードはほぼ完成したと考えているが、まだ計算サイズがそれほど大きくないので今後は大規模計算に向けての改良が必要である。ポイントは

- (1) 雲粒子コードの最適化と高速化
- (2) ハイブリッド法を乱流速度場とスカラー場に拡張し、雲粒子コードをこれに実装して高並列化を行うこと
- (3) 雲マイクロ物理における素過程の解析

である。(1)においては、時間発展ステップの適切な間隔ごとに各プロセス内での粒子番号の付けかえを行うことにより、雲粒子位置における乱流場の補間に伴うメモリーのランダムアクセスにかかる時間を削減することを考えている。(2)については、圧力に対するポアソン方程式のみにスペクトル法を用いことでFFTの使用回数を極力減らすことにより連続体コードの計算時間の削減と高並列化を達成できると考えている。2次元および3次元の2種の領域分割を用いているためコードが複雑になり開発に時間がかかると予測している。(3)については、雲粒子核形成プロセスのMDによる解明、乱流と雲粒子との相互作用、雲粒子の粒径分布、平均成長速度、密度分布などを詳細に解析し雲発生の初期過程の解明を目指す。

5. 研究成果リスト

[1] T.Gotoh, S. Hatanaka, and H. Miura, "Spectral

compact difference hybrid computation of passive scalar in isotropic turbulence, J. Comp. Phys. (submitted) (2012).

[2] T. Gotoh, T. Watanabe, and Y. Suzuki, "Universality and anisotropy in passive scalar fluctuations in turbulence with uniform mean gradient", J. of Turbulence, **12**, pp.1-27, (2011)

[3] Y. Kajima, H. Hiyama, S. Ogata, and T. Tamura: Exactly Time-Reversible Molecular Dynamics Algorithm for Rigid-Body Systems, J. Phys. Soc. Jpn **80** (2011) 114002-1-7.

[4] 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., (submitted) 2012.

(2) 国際会議プロシーディングス

(3) 国際会議発表

T. Gotoh, "Passive scalar fluctuations in homogeneous turbulence", 6th AIAA Theoretical Fluid Mechanics Conference, Honolulu, Hawaii, USA, June 28, 2011.

T. Gotoh and T. Watanabe, "Universality of passive scalar fluctuations at small scales in homogeneous turbulence", Turbulence Colloquium Marseille 2011, Marseille, France, Israel, Sept.29, 2011.

T. Gotoh, "Physics of Hydrodynamic Turbulence and Passive Scalar Transfer", 6th Korean Astrophysics Workshop on Fundamental Process of Astrophysical Turbulence, Pohang, Korea, 16 -- 19 November, 2011

(4) 国内会議発表

- ・畑中祥吾, 渡邊威, 後藤俊幸:「乱流スカラー輸送の統計のシュミット数依存性」, 2011年9月(富山大学)

- ・和田恭志, 渡邊威, 後藤俊幸:「乱流により輸送されるパッシブスカラーの確率密度関数について」, 日本物理学会, 2011年9月(富山大学)

- ・畑中祥吾, 後藤俊幸, 三浦英昭:「スペクトル・結合コンパクトハイブリッドコードによる乱流混合解析」, プラズマシミュレータシンポジウム 2011年9月(核融合科学研究所)

- ・鈴木祐有紀, 渡邊威, 後藤俊幸:「乱流中における雲粒子の運動」, 計算力学講演会, 2011年10月(岡山大学)

- ・杉本大輝, 渡邊威, 後藤俊幸:「多数の高分子モデルが分散した一様乱流の統計性」, 計算力学講演会, 2011年10月(岡山大学)

- ・小崎友裕, 鈴木祐有紀, 渡邊威, 後藤俊幸:「乱流混合と雲マイクロ物理過程」, 京大数理解析研 「乱流の普遍性と個別性」 共同研究集会 2012年1月(京都大学)

(5) その他(特許, プレス発表, 著書等)