

jh130010-NA06

## 雲マイクロ物理過程と乱流混合輸送との相互作用

後藤俊幸（名古屋工業大学）

**概要** 雲マイクロ物理過程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。雲粒子の衝突過程の計算を高速化することに成功した。約  $1\text{m}^3$  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、初期半径が  $50\mu\text{m}$  の雲粒子は空間的に強く非一様に分布しフラクタル的階層構造をとることが見出された。乱流輸送されるスカラーの微細スケールでの異常揺らぎを世界最大の大規模計算で解析し、高次モーメントのスケールリング指数の非普遍性を見出した。高層にみられる雲を構成するサブ  $\mu\text{m}$  の氷結晶の表面融解現象に関する大規模な分子動力学 (MD) シミュレーションを行った。表面疑似液体層は温度上昇と共に氷を構成する分子層単位で液体厚が増大すること、熱揺らぎにより表面では局所的に融解と再結晶化を時間経過と共に繰り返すこと等を発見した。空気中における数  $100\mu\text{m}$  サイズの液滴の衝突を解析するために、気液 2 相系の格子ボルツマン法を開発し衝突・合体過程のシミュレーションを行い、実験との一致を確認した。

### 1. 研究の目的と意義

#### 目的

雲の分布は地球のアルベドを変え地球の熱収支に影響を与えることからわかるように、雲は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る。しかし、その重要さにも関わらず雲は多くの謎に包まれており、雲の発生、成長、移動、降雨、消滅などの基本的なふるまいの理解は十分ではない。本研究においては、(1) 雲発生と成長の初期過程を解明するために必要な雲マイクロ物理過程と乱流混合をとりこんだ雲乱流シミュレーションコードを大規模計算に向けてさらに効率の良いものにする、(2) これにより雲粒子の成長の速さや粒径分布、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、乱流への影響などを調べることを目的とする。すべてを解明するには大きな困難を伴うので、雲中の約  $1\text{m}^3$  程度の領域を念頭におき、乾燥空気と湿潤空気が乱流によってどのように混合され強い揺らぎを生成するのか、ゆらぎの中にあって凝結・蒸発・衝突により雲粒子半径と空間分布がどのように雲の成長を促進するのか、また雲粒子の成長がどのように乱流に影響を与えるのかを大規模並列計算によって明らかにする。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 (数  $100\mu\text{m}$ )

までを解析するオイラー的数値計算と、 $10\sim 100\mu\text{m}$  の雲粒子衝突を解析するマイクロ流体力学コードの開発、 $10^9$  個以上の雲粒子運動を追跡するラグランジュ的数値計算が要求される。これらの数値計算をペタスケールコンピューティングを念頭においた大規模並列計算機上で、効率よく実行するための計算技術を開発する必要がある。流体方程式専用の 3 次元 FFT や高精度差分計算法、 $10\sim 100\mu\text{m}$  の雲粒子衝突計算を高速に実行する高効率な並列化アルゴリズム、衝突・合併過程の詳細な解析のための格子ボルツマンコードの開発、(サブ)  $\mu\text{m}$  スケールの結晶氷融解過程解明のための水分子動力学計算における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アーキテクチャの詳細まで考慮に入れて開発し、雲マイクロ物理過程と乱流混合輸送の相互作用解明にあたる。

### 2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

数  $\mu\text{m}$  から数  $\text{m}$  程度までの雲マイクロ物理過程をできるだけ忠実に再現できる雲乱流シミュレータを構築し計算機内に雲を作り出す。雲発生の詳細とそれに関わる乱流輸送の特性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。また、鎖状高分子のような内部自由度を持った粒子系と乱流との相互作用の問題にも応用が期待できる。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）が同時に動くことになり、きわめて多数のノードを持つ計算機の効率的な利用法が求められる。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、スケーラビリティのよいコードを開発することは大変重要である。格子ボルツマン法によるマイクロ流体力学解析コードはマイクロマシンにおける流体輸送解析など応用分野が極めて広い。質点ではなく構造を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、微細結晶氷融解の分子レベルからの解明をはじめとする、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。

(1) 共同研究を実施した拠点名および役割分担

拠点名 名古屋大学  
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、乱流混合の解析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	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の開発と弾性乱流への応用
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コード開発
三浦英昭	核融合科学研究所 へリカル研究部	乱流混合の統計解析と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雲粒子衝突解析

山本一夫	名古屋工業大学 創成シミュレーション工学専攻	雲乱流コード(スペクトル法)による大規模計算データ解析
市川智也	名古屋工業大学 創成シミュレーション工学専攻	雲マイクロ物理における衝突モデルの開発と実装、大規模計算とデータ解析
末廣保	名古屋工業大学 創成シミュレーション工学専攻	雲輸送コード(ハイブリッド法)の高速化と大規模計算のデータ解析

(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、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の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（水滴、氷晶）形成のMDシミュレーション、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。

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

今年度前半までの成果に加えて、主に4つの進展があった。第1は、雲粒子の衝突過程のアルゴリズムをさらに改良し、格別の高速化が図られたこと、温度場と水蒸気場のような2種類のスカラー乱流を世界最大の解像度で解析し、揺らぎのスペクトルと高次モーメントの普遍性の強度を解析したことである。第2は、雲乱流シミュレータで開発された計算手法を乱流中における鎖状高分子の問題に応用し、弾性乱流の興味深い振る舞い

が見いだされたことである。第 3 は、高層にみられる雲を構成するナノスケールの氷結晶の融解現象の MD 計算が進展し、微小結晶氷上の疑似液体相のより詳細な姿が見いだされたことである。第 4 には、空気中における微細な水滴の衝突を格子ボルツマン法で解析し、実験との一致を確認し、衝突・合併ダイアグラムが得られたことである。

### 【1】 雲粒子衝突と乱流混合輸送

[1-1] 雲粒子成長における凝結過程維持機構の導入と衝突計算の高速化

雲粒子の成長には大きく分けて 3 つの段階がある。第 1 は、雲粒子核に水分子が結合してできるサブミクロンから 1 ミクロンスケールでの超微細雲粒子生成、第 2 は凝結過程による数ミクロンから 30 ミクロン程度までの成長過程、そして第 3 は雲粒子同士の衝突・合併による数 100 ミクロンからそれ以上の雨粒子形成過程である。これまでの計算は、初期に与えた過飽和水蒸気が凝結して雲粒子が成長するというものであり、水蒸気過飽和分がすべて凝結してしまうと雲粒子の成長は止まり 30  $\mu\text{m}$  まで成長できない。今年度後半では、雲中の上昇気流により系が一定の速度で鉛直上方に上昇する影響を取り込み、過飽和度を長時間維持する機構を導入した。その結果、雲粒子半径が毎分 1~2  $\mu\text{m}$  程度で持続的に成長させることができるようになった。この成長速度は系の上昇速度に比例して大きくなることが分かった (図 1 参照)。

雲粒子半径が 30  $\mu\text{m}$  以上になると雲粒子が流体から受ける抵抗による特性時間 ( $\tau_p$ ) が最小の乱流

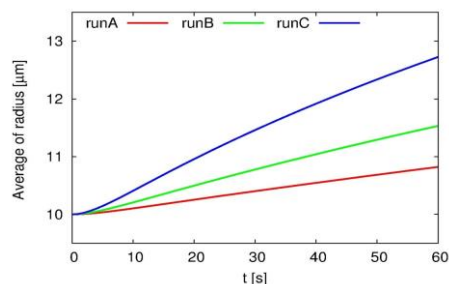


図 1 平均雲粒子半径の上昇速度依存性. Run A, B, C はそれぞれ 125, 250, 500 [cm/s].

渦の特性時間 ( $\tau_\eta$ ) と同程度かそれ以上 (ストークス数  $St = \tau_p / \tau_\eta > 1$ ) になる。すると、雲粒子は乱流運動に追従しなくなる傾向が強くなり、空間的に非一様に分布するようになって衝突頻度が高くなる。雲粒子の空間分布を解析するために、約 1  $\text{m}^3$  の中に初期半径 50  $\mu\text{m}$  の雲粒子を約 1 億 3 千万個分散させ、動径分布関数  $g(r)$  を計算した。図 2 (a) (b) では初期半径が 20  $\mu\text{m}$  の時と 50  $\mu\text{m}$  の時の同じ時刻における雲粒子分布を比較したものである。50  $\mu\text{m}$  の時のほうが、雲粒子の空間分布により強い非均一性がみられる。図 2 (c) にみるように、50  $\mu\text{m}$  の時、直線の勾配は 20  $\mu\text{m}$  の時よりも大きくなっており、空間分布はフラクタル的であることを示している。2 つのべき分布に従う領域が存在すること、傾きの大きさなどは室内実験で得られた値とほぼ一致することが分かった。

今年度後半、衝突・合体過程のさらなる高速化を行った。各プロセスに空間分割された領域内をさらに (Mx, My, Mz) のセルに分割し、粒子位置に応じて粒子番号とセル番号を与え、粒子番号の付け替えをセル番号に応じて行う。また衝突判定を当該セルと隣接セルだけで行う。前半で行った粒子

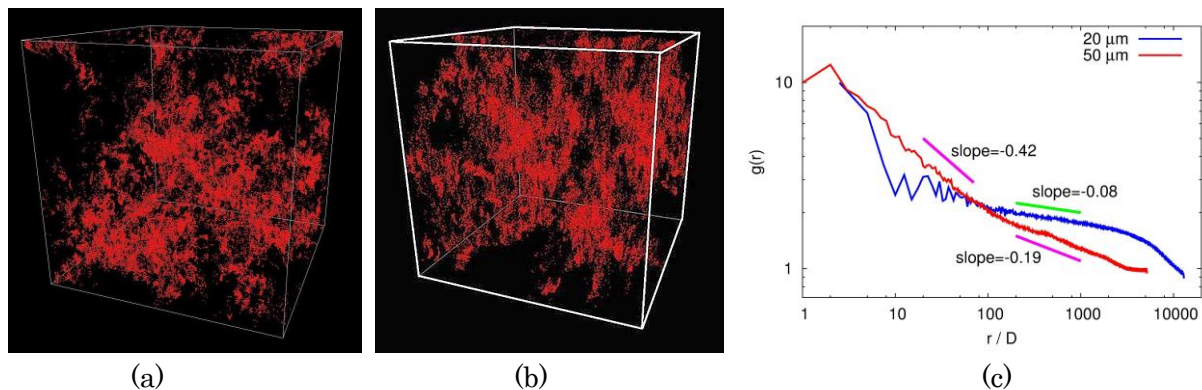


図 2. 雲粒子分散開始より 2 秒後の雲粒子分布と動径分布関数 (a) 初期雲粒子半径 20  $\mu\text{m}$ , (b) 初期雲粒子半径 50  $\mu\text{m}$ , (c) 動径分布関数  $D=2R(t=0)$ . 2 つのスケール領域が存在し、50  $\mu\text{m}$  のほうが大きな傾きを持つ。

計算時間 (sec/step)	
総当たり	41.50
relabelling + quick sort	0.37

表 1 空間格子数  $128^3$ , 粒子数  $2^{21}$  (約 200 万個), 32 プロセスでの雲粒子衝突計算時間の比較.

粒子数(個)	$2^{17}$	$2^{18}$	$2^{19}$	$2^{20}$	$2^{21}$
粒子密度(個/cm <sup>3</sup> )	62	125	250	500	1000
プロセス当たりの粒子数(個)	$2^{12}$	$2^{13}$	$2^{14}$	$2^{15}$	$2^{16}$
計算時間(sec)					
セルの個数 $4 \times 4 \times 32$	0.017	0.033	0.068	0.15	0.37
$2 \times 2 \times 16$	0.022	0.034	0.068	0.15	0.37

表 2 粒子数と分割セル数に対する雲粒子衝突計算時間の比較 (32 プロセス).

番号の付け替えは今一つ効率的ではなかったため、これを quicksort を用いた方法に変えた。空間格子数  $128^3$  の乱流中に粒子数  $2^{21}$  (約 200 万個) を空間全体にランダムに分布させ、32 プロセスで計算し粒子を追跡した。表 1 は、1 ステップあたりの衝突部分の計算時間を総当たりで計算した場合と比べたものである。約 100 倍以上の目覚ましい高速化が達成できた。表 2 では、粒子数密度と、1 プロセス内の分割セル数を変えたときの計算時間を比べている。実際の雲では平均粒子数密度は多いものでも  $500 \text{ 個/cm}^3$  を超えない程度であること、セル分割の仕方にもほとんど依存しないことから、この高速化は十分実用的であると考えている。これで、雲粒子成長において重要な要因となる凝結過程、粒子の慣性と乱流混合による非均一分布、雲粒子の衝突・合併過程の全てがおおむね妥当に計算できるという確かな感触が得られ、雲乱流コードがほぼ完成したと考えている。

### [1-2] 乱流とスカラーの揺らぎ

雲粒子成長には、雲粒子だけでなく周囲の温度や水蒸気の揺らぎ、そして乱流速度場の構造も極めて重要である。乱流混合においては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。

雲粒子 (約  $10 \mu\text{m}$ ) の集団分布を粗視化された

物質濃度として表現するとその分子拡散係数  $D$  は極めて小さく、流体から見た場合には高シュミット数 ( $Sc=D/\nu$ ,  $\nu$  は分子動粘性率) のスカラーとなる。  $Sc \gg 1$  の時のスカラー量の揺らぎの分散のスペクトル  $E_\theta(k)$  を解析した。特に、乱流ストレーン場  $S = \nabla u + (\nabla u)^t$  の強い揺らぎが  $E_\theta(k)$  に及ぼす影響を理論および数値計算データを駆使して解析し、理論解析による  $E_\theta(k)$  と DNS により得られたスペクトルはよく一致していることを確認した。

雲や大気乱流の場合における乱流レイノルズ数は極めて高い。これにより輸送されるスカラー揺らぎの統計法則は速度場と比べると不明な点が多い。揺らぎは構造関数と呼ばれる距離  $r$  離れた 2 点におけるスカラー差分の高次モーメント  $S_q(r) = \langle |\theta(x+r) - \theta(x)|^q \rangle$  で調べられる。構造関数はべき法則に従い、スケーリング指数  $d \log S_q(r) / d \log r = \zeta_q$  は乱流のタイプには左右されず普遍的と考えられているが、著者らはこの普遍性を疑問視している。この問題をより詳しく解析するために、同一の速度場により輸送される温度場と水蒸気場について、前者には鉛直方向に一樣な平均温度勾配を印加しこれにより温度揺らぎを励起し、水蒸気場に相当するスカラー場には低波数側でランダムに揺らぎを注入して、両者の構造関数を解析した。今年度後半では、前半で得られた計算を世界最大の格子点数  $4096^3$  ( $8192$  並列) の大規模シミュレーションに拡大し、2 種類のスカラー場の構造関数を大渦回転時間で 3 回転以上の長時間積分を行った。揺らぎのスペクトル ( $q=2$  次) および高次モーメント ( $q=4, 6, 8, 10$ ) について

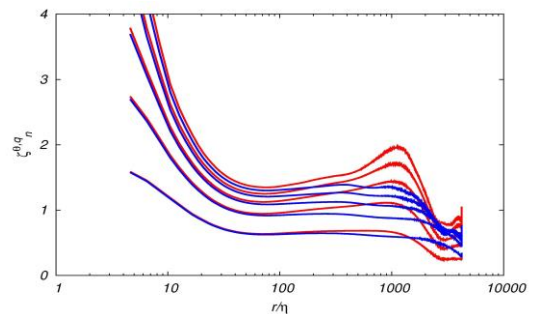


図 3 同一の乱流場により混合されかつ異なる揺らぎの注入方法により励起される 2 つのスカラー場の局所スケールリング指数の比較。赤：正規乱数による励起、青：一樣な平均スカラー勾配による励起。両者は  $r/\eta > 60$  の慣性移流領域では一致しない。解像度  $4096^3$ ,  $R_\lambda = 810$ .

解析を行い、スケーリング指数の振る舞いが明らかに異なること（図 3）を見出した。これの意味するところは、スカラー乱流の統計法則にはごく限られた意味でしか普遍性がないということであり、スカラー乱流の統計理論やモデリングに大きな影響をもたらすと考えられている。

### [1-3] 雲乱流コードの弾性乱流への応用

高分子溶液の低レイノルズ数流れにおいて、高分子の弾性的な性質が卓越すると流れ場は不安定化しマクロな乱流状態に遷移する。これは弾性乱流と呼ばれ近年注目されている。雲乱流コードでは、乱流と粒子追跡および粒子動力学を扱うので、これを乱流中の高分子鎖の粒子モデルに応用することは比較的容易である。大規模並列計算を実行し、弾性乱流の発生とその統計性について明らかにした。定常な渦流れに、大多数の伸張性の高い高分子（ダンベルモデル）を分散させると流れ場は非定常運動し、乱流に遷移することがわかった。また揺らぎの統計性は実験で得られた弾性乱流のものと同様であることがわかった。

### 【2】 微小氷結晶の表面に生じる疑似液体層

高層にみられる雲を構成するサブマイクロメートル規模の氷結晶の表面融解現象に関する大規模な分子動力学(MD)シミュレーションを行った。その結果、微小結晶氷が有する疑似液体層は、温度上昇と共に氷を構成する分子層単位で液体厚が増大すること、また熱揺らぎにより表面では局所的に融解と再結晶化を時間経過と共に繰り返すこと等を発見した。特に、微小氷表面での融解と再結晶化の繰り返しは、乱流混合により空気中に浮遊している様々な分子を、微小氷の表面から内部に速やかに取り込む過程の存在を示唆しており、大気汚染と降雨との関連で大変興味深い。

#### [2-1] 熱ゆらぎによる氷表面の局所的な融解と再結晶化の繰り返し過程

サブマイクロメートル規模の超微細氷粒子(六角柱形状, 132 万個の水分子系, 最大幅  $0.06 \mu\text{m}$ ,

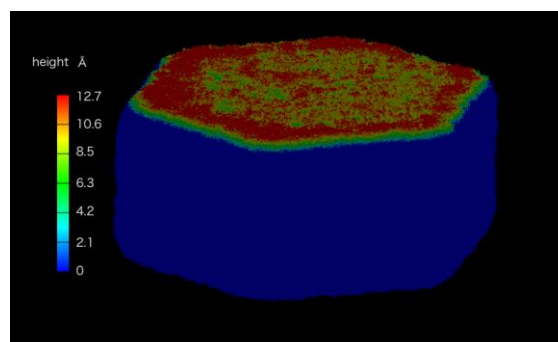


図 4. バルク融解温度より 1K 低い温度での微小氷表面の様子. 上下方向の高度差に応じて色をつけてある. 疑似液体層が  $10 \text{ \AA}$  程度の凹凸を伴って生じている.

ice-Ih 相の氷)の表面融解・表面物性などを調べる目的で、大規模 MD シミュレーションを行った。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。シミュレーションでの温度は、TIP4P を用いた場合のバルク氷の融点温度 ( $T_m$ ) よりも、23K, 13K, および 1K 低い値に制御した。なお、Ice-Ih 相の氷の基底(0001)面では、分子はバイレイヤーと呼ばれるジグザグ状シートを成し、そのバイレイヤーが約  $3 \text{ \AA}$  の間隔で積層している。MD シミュレーションコードは我々が昨年度に提案済みの時間反転対称性があり既存アルゴリズムにくらべて計算ステップ数が少ない剛体分子動力学アルゴリズムである Fast Time-reversible (FT) 法と、長距離に及ぶクーロン力をオーダー  $N$  で計算する高速多重展開法とを組み合わせることで新たに開発した。並列化の為に、対象系を仮想的に 512 から 2048 程度に空間分割し、Fujitsu FX10 スパコン等を用いた。MD シミュレーションの結果、3 つの温度ケースの全てにおいて、疑似液体層が生じることが分かった（図 4 参照）。基底面(0001)上の液体層は凹凸状になっており、個々の凸部の高度と幅は温度と共に増大する傾向があった。また、凸部は時間経過と共に消滅と生成をランダムに様々な場所で繰り返していた。比較的低温の  $T_m-23\text{K}$  と  $T_m-13\text{K}$  の場合では、氷表面の最外バイレイヤーが融解し、凸部を形成していた。 $T_m-1\text{K}$  の場合は、凸部の下に一樣に、液体シートが新たに生じていた。バイレイヤー単位での表面融解の中間的状況に相当する  $T_m-13\text{K}$  においては、薄い凸部の下に位置する場所

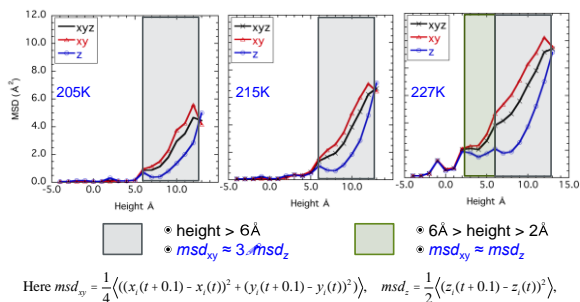


図 5. 微小結晶氷の表面近傍における，分子の平均二乗変位の高さ依存性

ではバイレイヤーが融解し，逆に厚い凸部の下に位置する場所ではバイレイヤーが再結晶化する傾向があることを見いだした．凸部は時間経過と共に位置が変化するため，（部分的に融解している）最外から 2 つ目のバイレイヤーについては，そのバイレイヤーの固体部分に凸部から移動して取り込まれる分子の割合が時間に比例して高まっていた．この事実は，氷の内部に環境から速やかに不純物分子が取り込まれるプロセスが存在することを示唆している．なお，同様の融解-再結晶化は， $T_m-1K$  の場合においては，最外から 3 つ目のバイレイヤーにおいて確認できた．

$T_m-1K$  で見られた疑似液体層は，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．この 2 種類の水（平坦，凸凹）は，その物性に違いがあるはずであり，平均二乗変位と分子間距離を調べてみた．凸凹部分の疑似液体相の平均二乗変位は，面に平行方向の変位が垂直方向の変位の 3 倍以上あり，平坦部分では全ての方向で同程度であった（図 5 参照）．また，近接 4 酸素間の平均距離（約 3.2 Å の距離に 4 つ以上酸素を持つ酸素に限る）も，凸凹部分と平坦部分では違いがあり，平坦部の酸素間距離は，氷の酸素間距離と凸凹部の酸素間距離の中間ほどであった．

### [2-2] 独立に行われた実験結果との関連

本シミュレーションに先立ち，約 1 年前に北大低温研のグループが，疑似液体層に関連して興味深い実験結果を出していた．それによると，疑似液体層には 2 種類あり低温で現れる水滴状の  $\alpha$ -

QLL (quasi-liquid layer) と，高温で  $\alpha$ -QLL の下に現れる平面状の  $\beta$ -QLL があるとされる．この実験は飽和蒸気中で行われ氷は成長し続けていた．またサイズも 2 桁大きい氷を扱っていたこと等は，我々の設定と異なっている．しかし，融点直下で平坦な液体層が現れること，液体層は凸凹を持ち広い範囲の温度で現れることなどの類似点があり，我々のシミュレーション結果と実験結果とは関連があると思われる．実験では調べる事の難しい疑似液体層の平均二乗変位や酸素分子間距離などを調べる事が出来たことは， $\alpha$ -QLL， $\beta$ -QLL の物性を探る上で重要な情報を与えるものと考えている．

### 【3】 空気中の微小水滴の衝突・合体

雲粒子から雨粒子への成長には，空気中での微小水滴同士の衝突解析と衝突断面積の評価が欠かせない．今年度から，二相系格子ボルツマン法（二相系 LBM）による解析を始めた．前半では，レイノルズ数  $Re = \rho_L DV / \mu = 5.26$  およびウェーバー数  $We = \rho_L DV^2 / \sigma = 4.84$  で液滴の衝突挙動の計算を行ったが，実現象を再現しているかどうかは未検証であった．そこで後半では，Ashgriz and Poo によって行われた  $100\mu m \sim 500\mu m$  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． $Re$  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）とウェーバ数に対する衝突・合体の依存性を解析した．その結果，衝突挙動の 3 パターン，合体 (coalescence)，反射分離 (reflexive separation)，伸縮分離 (stretching separation 図 6 参照) の挙動が確認できた．得られた結果は図 7 の衝突・合併ダイアグラムにまとめてあり，Ashgriz and Poo による 3 パターンへの分類と一致することから，二相系 LBM 計算の妥当性が確認できた．

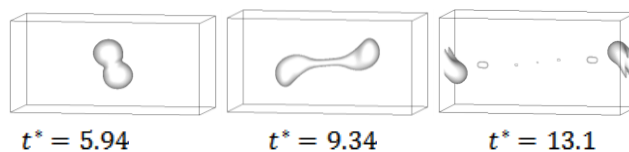


図 6  $B=0.5$ ,  $We=79.6$  における伸縮分離衝突 ( $t^* = tV/D$ ) .

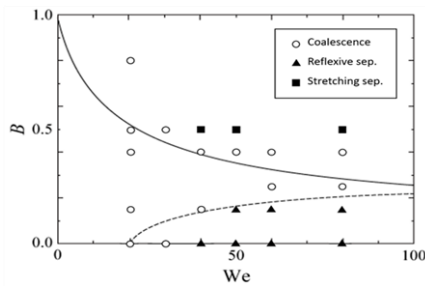


図 7. 二相系 LBM による衝突・合併ダイアグラム.  $B$ ,  $We$  はそれぞれ衝突オフセット, ウェーバ数.

## (2) 当初計画の達成状況について

【1】雲粒子から雨粒子成長過程の計算における最大の関門であった雲粒子の衝突・合体計算の高効率化が紆余曲折を経てようやく達成できた。また、上昇気流の効果を適切に取り入れる機構の数値的実装もうまくいっている。さらに、乱流混合の大規模数値計算ではシュミット数が 1 程度と 1000 の場合において当初の予定を超えて空間格子点数が 4096<sup>3</sup> の世界最大規模の長時間積分を行うことができ十分な進展があった。また、雲乱流で開発されたコードを弾性乱流の問題に応用した。低レイノルズ数にもかかわらず流れは乱流になり、弾性乱流の実験と同様な興味ある現象を見出し、新しい展開を見せている。

【2】当初計画では、雲の中低層にみられる微小液体同士の衝突過程について様々な設定でシミュレートする予定であった。実際、典型的な設定で MD シミュレーションを幾例か行ったが、いずれの場合も液滴同士は単純に融合するのみであった。そこで、高層にみられる微小氷結晶の MD シミュレーションを行った。その結果、表面液体層の局所的な再結晶化と融解の繰り返し過程という、予期もしていなかったユニークな過程の発見に至った。

【3】当初、2 つの微小水滴の衝突・合体を二相系 LBM で計算し既存の実験結果との比較によって検証を行うことを計画していた。後半では実験結果がおおよそ再現でき、その傾向も一致していることが確認された。計画通り順調に進んでいる。

以上のことから、研究全体の達成度は 100/100 である。

## 4. 今後の展望

【1】雲粒子の衝突・合体過程の高速化が実用になった。実際の雲粒子密度(約 100~300 個/cm<sup>3</sup>)での計算では衝突計算に余裕ができるので、二相系 LBM で開発中の衝突・合併のより詳しいモデルを導入してもさほど計算負荷はかからないとみている。また、上昇気流による持続的な凝結過程も導入でき、乱流混合の直接数値計算も順調である。今後は、これらを 1 つにまとめて、なおかつ計算時間の短縮化(4 次のルンゲクッタを 2 次にするなど)を実行して、現在は数十秒にとどまっている計算を数分にまで延長することを目指す。雲粒子が 10  $\mu\text{m}$  から 100  $\mu\text{m}$  まで成長する過程を連続的に計算で追跡することを目指す。また、乱流スカラー揺らぎのスペクトルや構造関数、確率分布関数などにおける普遍法則の追及を進める。また、弾性乱流の発生のメカニズムとその統計性質の解明や、高分子溶液のレオロジーとの関連性について引き続き研究を進めていく。

【2】現在、六角柱型氷に螺旋転位および刃状転位を入れたものを用意し、それらに対し上記と同様のシミュレーションをおこなっている。これは疑似液体層の生成に、氷表面の緊張が大きな役割を果たすと考えられている事から、その事実が  $\alpha$ ,  $\beta$ -QLL に対してどのような影響を与えるかを明らかにするためである。また転位と同時にさらに大規模なシミュレーション、さらに不純物が溶け込んだ液体層を扱うシミュレーションに向けての準備もおこなっている。

【3】各パラメータを雲粒子のものと合わせて計算を行うことで、実際の雲粒子のスケール(数 10  $\mu\text{m}$  程度)で液滴衝突の解析を進めていく。また、乱流中を想定し、速度場に外乱がある場合における衝突・合体プロセスの解析も視野に入れている。

## 5. 研究成果リスト

(1) 学術論文(投稿中のものは「投稿中」と明記)

[1] T. Gotoh, Y. Suzuki, and Y. Kozaki, "Turbulence and cloud droplets", Submitted to J. Fluid. Mech. (2014).

[2] T. Gotoh, T. Watanabe, and H. Miura, "Spectrum of passive scalar at very high Schmidt number in turbulence", Plasma and Fusion Research **9**, 3401019 (4 pages) (2014).

[3] T. Watanabe and T. Gotoh, "Power-law spectra formed by stretching polymers in decaying isotropic turbulence", Phys. Fluids **26**, 035110 (2014).

[4] 三浦英昭, 藤堂泰, 後藤俊幸, 「MHD シミュレーションのコーディング技法」J. Plasma Fusion Res. **89**, 119-127 (2013).

[5] 渡邊威, 後藤俊幸, "Taylor-Green 流れにおける弾性乱流" ながれ 第 32 卷 No.6, 441-448 (2013).

[6] 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究録 No.1882, p.55 (2014).

[7] Y. Kajima, S. Ogata, R. Kobayashi, M. Hiyama, and T. Tamura, "Fluctuating Local Recrystallization of Quasi-Liquid Layer of Sub-micrometer-scaled Ice: A molecular Dynamics Study," submitted to J. Phys. Soc. Jpn. (Letter) (2014).

## (2) 国際会議プロシーディングス

[1] T. Watanabe and T. Gotoh, "Kinetic energy spectrum of low-Reynolds-number turbulence with polymer additives", J. Phys.: Conf. Ser. **454** 012007 (2013).

## (3) 国際会議発表

[1] T. Gotoh, T. Watanabe, Y. Kozaki, and Y. Suzuki, "Interaction between cloud droplets and decaying turbulence, European Turbulence Conference, Lyon, Sept. 1, (2013).

[2] T. Gotoh, T. Watanabe, Y. Kozaki, and Y. Suzuki, "Numerical study of turbulent mixing in clouds", Ilmenau Univ. (Germany) Sept. 12, (2013) (Invited).

[3] T. Gotoh, "Velocity intermittency and Lagrangian correlation for scalar spectrum at high Schmidt number", Workshop on Turbulence and Amorphous Materials, Eilat (Israel) Nov. 13, (2013) (Invited).

[4] T. Gotoh, "Spectrum and intermittency of passive scalar in turbulence", The 2nd international workshop on Mathematical Theory of Turbulence via Harmonic Analysis and Computational Fluid Dynamics in 2014, Nara, Japan, March 3, (2014) (Invited).

[5] T. Gotoh, T. Watanabe, Y. Kozaki, Y. Suzuki, and K. Yamamoto, "Turbulence and cloud droplet interaction", Workshop on Fundamental

Aspects of Geophysical Turbulence, Nagoya Japan, March 10, (2014) (Invited).

[6] Y. Kajima, S. Ogata, R. Kobayashi, T. Tamura, Y. Niwa, "Large-Scale MD Simulation of Quasi Liquid Layer of Ice with Dislocation": 3rd International Conference on Molecular Simulation (ICMS2013) Nov. 20, Kobe (2013).

## (4) 国内会議発表

[1] 渡邊威, 後藤俊幸, 「Taylor-Green 流れにおける弾性乱流」, 日本流体力学会年会, 東京農工大学, 9 月 12 日 (2013).

[2] 後藤俊幸, 渡邊威, 「パッシブスカラーの慣性移流領域における普遍性」, 日本物理学会, 徳島大学, 9 月 25 日 (2013).

[3] 後藤俊幸, 渡邊威, 小崎友裕, 鈴木祐有紀, 「雲マイクロ物理過程と乱流混合との相互作用」 第 7 回 NIT-NIFS 共同セミナー, 名工大, 10 月 11 日 (2013).

[4] 山本一夫, 後藤俊幸, 小崎友裕, 「雲乱流中における雲粒子の空間分布」日本機械学会 第 26 回計算力学講演会, 佐賀大学, 11 月 2 日 (2013).

[5] 西岡優樹, 渡邊威, 後藤俊幸, 「希薄高分子溶液における乱流のハイブリッドシミュレーション」, 日本機械学会第 26 回計算力学部門講演会, 佐賀大学, 11 月 2 日 (2013).

[6] 丹羽洋平, 尾形修司, 鍛島康裕, 小林亮, 田村友幸, 「荷電状態に依存した大規模水分子クラスターの動的挙動に関する分子動力学シミュレーション」, 日本機械学会 第 26 回計算力学講演, 11 月 3 日 (2013).

[7] 鍛島康裕, 尾形修司, 小林亮, 田村友幸, 丹羽洋平, 「転位を持つ氷の表層水の大規模 MD シミュレーション」, 日本機械学会 第 26 回計算力学講演, 11 月 3 日 (2013).

[8] 塩津直哉, 渡邊威, 後藤俊幸, 「直接数値計算による乱流中の粒子間衝突頻度の解析」, 第 11 回日本流体力学会中部支部講演会, 名古屋大学, 12 月 6 日 (2013).

[9] 柴田純一, 渡邊威, 後藤俊幸, 「パッシブスカラー乱流におけるスカラー勾配場の構造とその統計性」, 第 11 回日本流体力学会中部支部講演会, 名古屋大学, 12 月 6 日 (2013).

[10] 渡邊威, 後藤俊幸, 「Taylor-Green 流れにおける弾性乱流の性質」, 日本物理学会年会 2014, 東海大学湘南キャンパス, 3 月 28 日 (2014).

[11] 後藤俊幸, 渡邊威, 「パッシブスカラー乱流の統計理論と普遍性」(京大 数理研研究集会「大スケール流体運動と乱流揺らぎ」1 月 9 日 (2014) (招待講演)

## (5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

後藤俊幸 「雲マイクロ物理シミュレータ」(スパコンの中の風と雲, 雨粒成長過程解明へ) 中部経済新聞 1 月 9 日 (2014).