

jh150012-NA09

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。潜熱の開放による上昇気流で移動するパセル内で初期平均半径 $10\mu\text{m}$ の雲粒子集団が、乱流混合と凝結・衝突・併合により約 7 分で最大粒子半径 $50\mu\text{m}$ 超を含む平均半径約 $20\mu\text{m}$ の雲粒子集団にまで成長する連続的計算に成功した。雲粒径分布関数の右側は指数関数的に減衰し、時間と共に急速に裾野が広がることがわかった。雲乱流中のスカラー輸送の大規模計算を行い、揺らぎのモーメントのべき指数に対数補正が入るという驚くべき事実を見出した。異なる粒径をもつ水滴の 2 体衝突・合併を気液二相系格子ボルツマン法により計算し多様な衝突現象を見出した。また、弾性乱流シミュレーションを実験により近い状況で行い、鎖状高分子による流れ場の変形を解析した。さらに、有機物を含む不純物分子が氷晶生成メカニズムに与える効果を解析するためのシミュレーションコードを開発し高速化を行った。

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雲マイクロ物理シミュレータ (Cloud Microphysics Simulator CMPS) 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。

雲粒子成長とこれに関わる乱流輸送の揺らぎ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、観測や実験では得られなかった雲内部のデータ(衝突確率、雲粒径分布)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高精度化に大変役に立つ。また、鎖状高分子と乱流との相互作用が第 1 原理

的に計算できれば乱流抵抗低減の詳しいメカニズムが解明され、新しい制御法を生み出す基礎となりエネルギー有効利用につながるなど、広範な分野への応用の可能性を秘めている。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

複数の分野の研究者がそれぞれの問題と計算技術を持ち寄り、共同研究を通してマイクロスケール粒子の持つ自由度の動力学と乱流というマクロ自由度の動力学との相互作用を第 1 原理的に解析する計算手法が確立される。これにより、これらのマルチスケール・マルチフィジックス現象の解明に大きく貢献できるという意義がある。さらにはこれらの手法の産業への応用も期待できる。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

【1】雲粒子成長と衝突および雲乱流混合輸送

雲中を上昇気流により移動するパーセルを導入し、雲粒子が凝結により $30\mu\text{m}$ 程度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。ハワイ沖で観測された温度と水蒸気混合比の鉛直分布を参照し、初期に 500m の高さにあるパーセル内 (1 辺 25.6cm) の雲粒子の成長をシミュレートした。パーセルは最大 $8[\text{m/s}]$ の速度で約 2300m まで急速に上昇し、雲粒子平均半径は $10\mu\text{m}$ から約 $24\mu\text{m}$ まで成長し、その後、高度の上下動とともに約 300 秒の周期で変動するという妥当な結果が得られた。これは 2015 年 3 月の国際ワークショップ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数 $100\mu\text{m}$ 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

雲乱流中の水蒸気、温度などの微細スケールでの揺らぎの統計法則の解明を進めた。同一の乱流により混合される 2 つのスカラー場 (低波数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) の揺らぎの差分のモーメント

$$S_q^n(r) = \langle |q(x+r) - q(x)|^n \rangle \propto r^{\xi_n} \quad \text{と}$$

$S_\theta^n(r) = \langle |\theta(x+r) - \theta(x)|^n \rangle \propto r^{\zeta_n}$ のスケーリング指数 ζ_n と ξ_n を解析した。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 $d \log S_q^n(r) / d \log r$ は両者で異なり、普遍性が成り立たないことを見出した。

【3】空気中の水滴の衝突解析

雲粒子の衝突挙動を解析するために、粒径、相対衝突速度、表面張力などをパラメータとして二相系格子ボルツマン法 (二相系 LBM) による計算を行った。5 程度の密度比とオフセット (二液滴の中心線のずれ)、レイノルズ数 Re (慣性力/粘性力)、ウェーバー数 We (慣性力/表面張力) などのパラメータ空間を探索し、実験とも整合性のとれた衝突ダイアグラムを得た。

【4】高分子と流れ場との相互作用

レイノルズ数が 1 より十分小さい流れは一般に層流状態にあるが、ある定常な層流に高分子鎖を添加すると流れ場はどのように変調されるかについて調べた。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 Wi (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や速度揺らぎのパワースペクトルが弾性乱流に特徴的な冪的減衰を示すことを見出した。さらに、弾性乱流のマイクロ流路内における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。その結果、速度や圧力変動の非定常性や複雑な流れパターンへの遷移を示すことが分かった。

【5】水分子クラスターの分子動力学

融点より 1K だけ低い温度の微小氷の表面では、平坦な表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、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。また、微小氷の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んだ。不凍タン

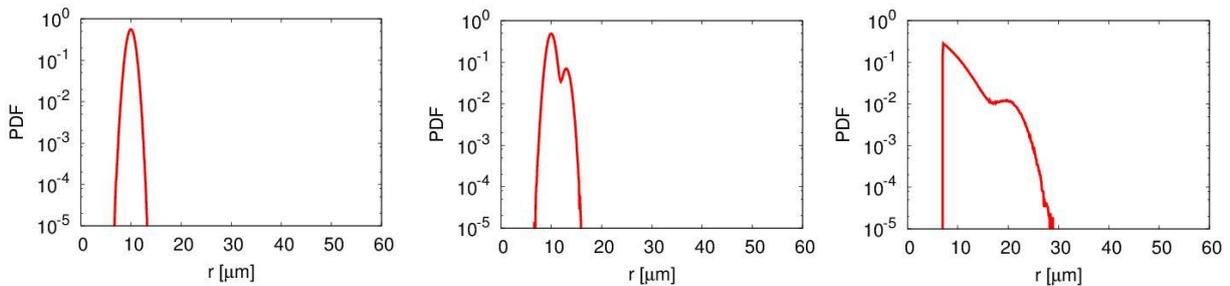


図 1 初期雲粒径分布. 平均半径 $10 \mu\text{m}$. (左) Run E, (中) Run F, (右) Run G (観測でよく見出される分布)

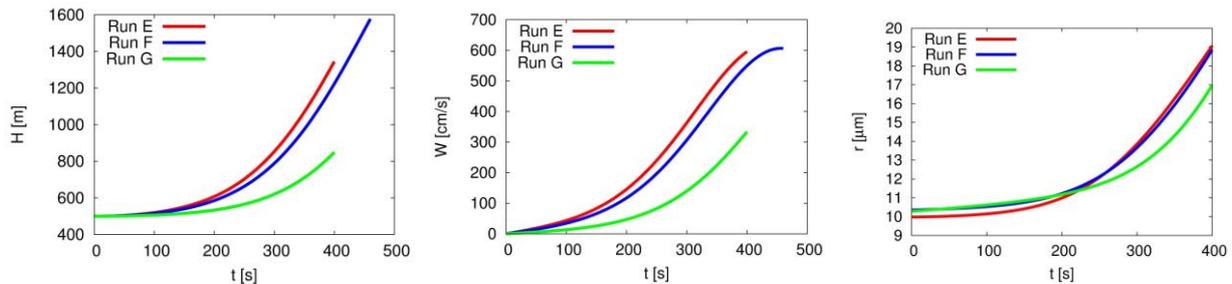


図 2 パーセル特性の時間発展. (左) 高度, (中) 上昇気流速度, (右) 平均雲粒子半径

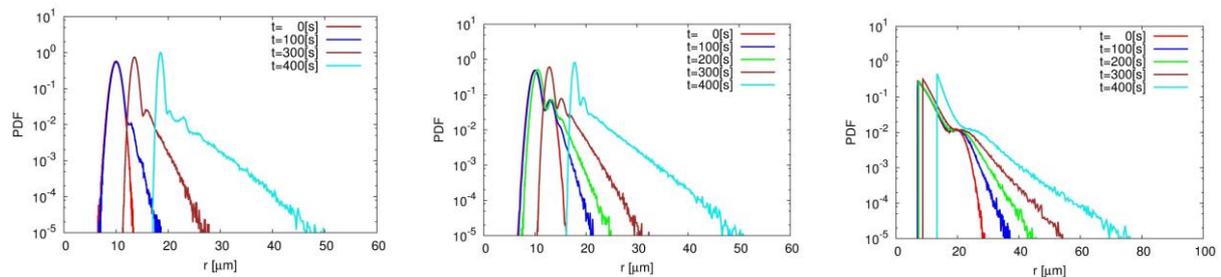


図 3 雲粒径分布関数の時間発展. (左) Run E, (中) Run F, (右) Run G.

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の開発を進めた。

5. 今年度の研究成果の詳細

【1】雲粒子成長

2つの進展があった。第1は、約20分間にわたる凝結過程のみによる雲粒子成長の連続計算の結果を *New J. Phys.* に発表した[1]。出版直後から海外からの問い合わせがあり、手ごたえを感じている。第2の進展は大きなものである。これまで開発してきた計算要素すべてを雲マイクロ物理シミュレータに統合することにより、初期に平均半径 $10 \mu\text{m}$ の雲粒子集団が凝結過程とそれに引き続く衝突・併合過程によって、約7分程度の間平均半径約 $20 \mu\text{m}$ 最大半径約 $50 \mu\text{m}$ にまで成長する過程の連続的計算に成功した。本研究の目的達成に向けての大きな進展であり、重要な橋頭保を確保できた。統合した要素は、まず、これまでに本

研究で開発された計算技術として、(1) 乱流計算に特化した3次元FFTと温度・水蒸気の輸送計算のための結合コンパクト差分を組み合わせたハイブリッド法、(2) 上昇気流と共に移動する系の導入、(3) 粒子ラベリングとクイックソート、(4) 粒子衝突・併合、(5) 粒子追跡および粒子属性の格子点への分配 (PIC法) があげられる。さらに本年度後半において(6) 雲粒子レイノルズに依存する非線形な流体抵抗、(7) 時間刻み幅によらない衝突判定法、(8) 雲凝結核 (CCN) の粒径分布の導入である。以下の条件で計算を行った。ハワイ沖上空 500m にパーセルを置き、内部温度を $293.25[\text{K}]$ 、雲粒子数約200万個 (平均雲粒子数密度 $n=125[\text{cm}^{-3}]$) を分散させた。乱流計算は空間格子点数 128^3 で行い、運動エネルギー散逸率 $\epsilon=36[\text{cm}^2/\text{s}^3]$ 、乱流レイノルズ数 $R_\lambda=83$ である。図1には3種類の初期雲粒径分布を示した。Run E, F, Gは初期分布がそれぞれ、単峰、2峰、そして観測

表 1 雲マイクロ物理シミュレータの効率化による各サブルーチンの経過時間 (sec) の加速

	非線形項	衝突	粒子情報交換	線形内挿	全体
改善前	1.74E-1	2.2032	4.31E-2	5.99E-2	2.5738
改善後	1.63E-1	4.16E-1	1.94E-2	5.07E-2	6.83E-1

表 2 MPI+OpenMP による各サブルーチンの経過時間 (sec) とスケーラビリティ

スレッド数	非線形項	衝突	粒子情報交換	線形内挿	全体	加速率
1	1.63E-1	4.16E-1	1.94E-2	5.07E-2	6.83E-1	1.00
2	1.16E-1	2.14E-1	1.42E-2	2.96E-2	3.93E-1	1.74
4	7.05E-2	1.10E-1	6.97E-3	2.03E-2	2.21E-1	3.09
8	4.41E-2	5.79E-2	3.75E-3	1.56E-2	1.30E-1	5.23

データによるものであり、いずれも平均半径は 10 μm である。図 2 から、約 400 秒の間に各パーセルは 500m から約 1600 [m] にまで上昇し、上昇気流速度は最大約 6[m/s]、平均半径は約 20 μm 弱にまで成長することがわかる。雲粒径分布の成長における共通する特徴は、[1] 分布のピーク近傍の幅は時間経過とともに右に平行移動しかつ狭くなること、[2] 分布の左側はより急峻になること、そして [3] 分布の右側は指数関数的に減衰し、時間とともに急速に裾野が広がることである。また、分布関数の時間変化をアニメーションにして観察すると、分布の変化は、計算の後半になるほど大きくかつ速くなることがわかった。[1] と [2] は凝結過程の特徴を反映したもので、上昇による過飽和蒸気圧がパーセル全体で減少することと、分布関数のピークの左側の雲粒子は右側にあるそれよりも粒子成長の速度が速いためである。一方、[3] は衝突・併合過程によるものであることはいうまでもない。粒径分布の指数的減衰の理論的説明は可能であろうと推測している。上の計算は、雲粒子衝突・併合は 2 粒子が少しでも重なれば併合するという非常に単純化した仮定のもので行なわれた。今後、格子ボルツマン法により得られた衝突ダイアグラムを導入して行なう予定である。

計算効率についても大きな進展がみられた。上述の計算のうち、Run E, F は 64 ノード、512 コア、1 プロセスあたり 4 スレッド並列で行い、Run G は 128 ノード、1024 コアを用いた。どれもおおむね 1 週間程度の計算時間を要していたので、高速化する必要があった。そこで、以下のような改善を

行った。(1) 3 次元 FFT における通信の隠ぺいを行ったこと、(2) 各粒子にセルインデックスを割り当て、衝突計算におけるラベリング、ソーティング、衝突判定をセルインデックスに基づいて行うようにしたこと、(3) 不要な初期化やメモリー割り当てを廃止したこと、(4) 粒子位置探索とプロセス間通信の組み合わせを工夫し、粒子情報の交換と線形補間に必要な通信回数を最小限にとどめたことなどである。これらにより表 1 のような加速を得た。さらに、粒子計算部分について徹底した Open MP 化を行った。表 2 に見るようにストロングスケーリングになってはいないものの、かなり並列化効率を高めることができ、その結果、上述の計算が 24 時間ジョブで完了するようになった。

【2】雲乱流混合輸送

同じ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 と鉛直方向に一樣な平均温度勾配により励起された温度 θ ）の揺らぎモーメント $S_q^n(r) = \langle |q(x+r) - q(x)|^n \rangle$ と $S_\theta^n(r) = \langle |\theta(x+r) - \theta(x)|^n \rangle$ のスケーリングの探求を引き続き進めた。 $S_q^n(r)$ の局所スケーリング指数には $d \log S_q^n(r) / d \log r = \xi_n + \beta_n \ln(r/r_*)$ という対数補正が入るというこれまでの乱流統計理論を覆す新たな発見をした。この結果は乱流混合の世界最大規模かつ長時間にわたる計算により初めて見いだされたものであり、Phys. Rev. Lett. (2015) [2] に発表された。

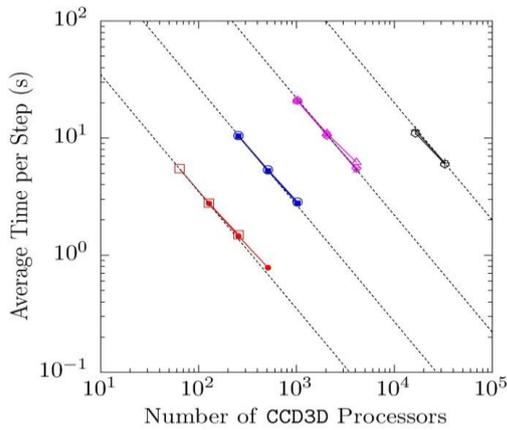


図4 Blue Waters 上でのハイブリッド法による高シュミット数のスカラー乱流混合計算. 速度場の格子点数を $N=256^3$ に固定し, スカラー場の格子点数を (左から) $N=512^3, 1024^3, 2048^3, 4096^3$ と変化させた計算のストロングスケーリング.

さらに, スケーリング指数の違いの物理的理由を探るために, スカラー揺らぎの注入方法に変更を加えた. すなわち, q へのランダム揺らぎには有限の時間相関を持たせた. θ の揺らぎは, 鉛直方向速度 $u_3(k)$ に比例して全波数で注入されていたが, その注入する波数領域を q と同じ低波数領域に限定した. 両者は同程度の時間相関を持つ. その結果, スケーリング指数の違いは, スカラー揺らぎの注入する波数領域によることが分かった. しかし, なぜ対数補正が入るのかは未だ明らかではなく, 今後の重要な問題である.

雲凝結核 (CCN) はその大きさが $1\mu\text{m}$ 以下の微小な固体粒子である. この空間分布を連続体近似すると高シュミット数 ($Sc = \nu/\kappa = \text{分子粘性}/\text{分子拡散}$) のスカラーとなる. この場合, 分子拡散が支配的になる長さは分子粘性による特徴的長さよりもはるかに小さいため, 速度場はスカラー場に比べて滑らかである. そこで, 速度場は粗い空間格子上でスペクトル法により計算し, スカラー場は微細格子上で結合コンパクト差分法で計算するという Dual grid 上でのハイブリッド法を開発してきた. 米国 Georgia 工科大学の Yeung 教授から本ハイブリッド法を利用したいとの申し出があったので, これを譲渡し併せてさらなる高効率化を目指す共同研究 (“Petascale computation of turbulence using a hybrid pseudo-spectral and compact finite difference approach”, P.I. : Prof. P.K. Yeung (Georgia Institute

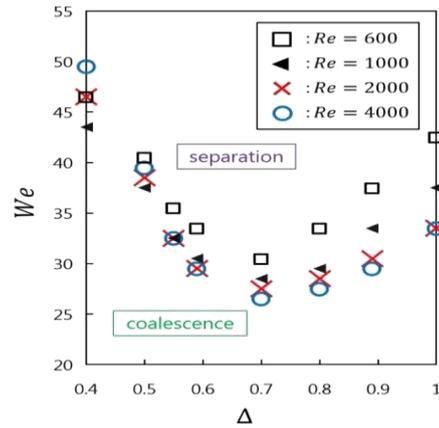


図5 直径比と臨界ウェーバー数の関係.

of Technology). supported by the National Science Foundation (via subcontract from University of Illinois, Urbana-Champaign. Period: 12/15 - 08/16.) に発展した. 2016年3月, Yeung 教授に招かれ, Georgia Tech に2週間滞在してコードの改良を行った. 具体的には, 速度とスカラーの計算を異なる communicator で行い, 速度場とスカラー場の計算の overlap と通信の隠ぺいを行った. コードは Blue Waters に移植され, 徹底したチューニングを行った. 共同研究は始まったばかりであるが, ハイブリッドコードの性能試験を行ったところ, 図4に示すように, ハイブリッド法は優れた strong scaling 特性を示すことが見いだされ, 今後の計算に大きな期待をしている.

【3】空気中の水滴の衝突解析

大小異なる直径の液滴同士の衝突挙動を調べるために, 両者の直径径比 $\Delta = D_s/D_l$ (D_s : 小液滴の直径, D_l : 大液滴の直径) を変化させて計算を行った. $0.4 \leq \Delta \leq 1.0$, $600 \leq Re = \rho_L D_s V / \mu_L \leq 4000$, $20 \leq We = \rho_L D_s V^2 / \sigma \leq 80$ の条件のもとで, 各レイノルズ数に対して得られた直径比と臨界ウェーバー数 (衝突後の形態が合体から分離に遷移する最小のウェーバー数) の関係を図5に示す. いずれのレイノルズ数においても $\Delta = 0.7$ のときに臨界ウェーバー数は最小となることがわかった. これより, 直径比に対する臨界ウェーバー数の依存性はどのレイノルズ数に対しても同じであることがわかった. $0.6 \leq \Delta \leq 1.0$ では, レイノルズ数が小さいほど臨界ウェーバー数は増加しており,

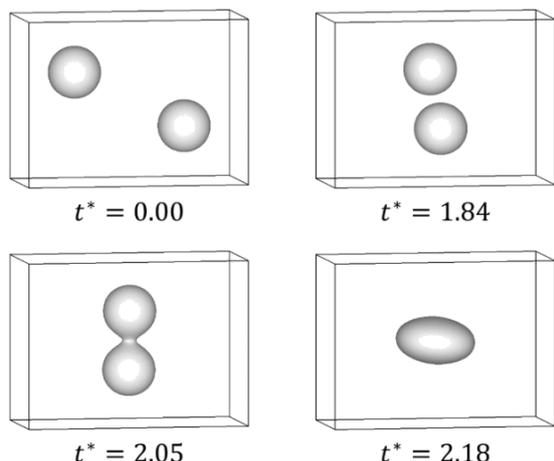


図 6 直径 $5\mu\text{m}$ 、衝突パラメータ $B=1$ 、密度比 800 における液滴衝突の時間変化 ($t^*=tVD$)

この範囲の直径比ではレイノルズ数が小さいほど合体しやすい傾向にあることがわかった。

次に、CSF (Continuum Surface Force) モデルに基づく新しい気液二相系 LBM (改良二相系 LBM) を導入し、雲粒子を想定した微小水滴の衝突計算を行った。実際の雲粒子 (直径 $\hat{D} = 5\mu\text{m}$ 、衝突速度 $\hat{V} = 0.5\text{m/s}$) に対し、気相と液相の密度比を 800、粘度比を 55、レイノルズ数 $Re=2.50$ 、ウェーバー数 $We=1.71 \times 10^{-2}$ の条件で安定に計算できたことから、改良二相系 LBM を用いることで雲粒子を想定したパラメータでも計算が可能であることがわかった。また、衝突パラメータ B (液滴直径に対する無次元オフセット量) が $0 \leq B \leq 1$ のいずれにおいても合体する結果が得られた。一例として、 $B = 1$ における計算結果を図 6 に示す。

【4】高分子と流れ場との相互作用

前年度に引き続き、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き、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。前年度では計算の実行可能性を優先したパラメータの設定を行っていたが、実験研究の状況を念頭において、より現実状況に近いパラメータに変更して計算を再度試みた。計算には 2 種類の異なる角柱列の配置で計算を実施し、ワイゼンベルグ数 Wi を変化させた際、層流から非定常流れへの遷移過程を調べた。その結果、図 7 に見

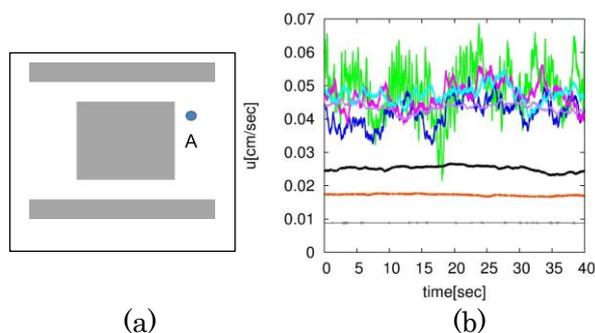


図 7 (a) 周期的な角柱配置 (PAS 構造) の単位胞. (b) A 点で計算された流れ方向速度成分の時間変化. 各曲線は下から上の順に Wi 数が増加.

るように、ある Wi の値 ($Wi=1\sim 2$) で流れは非定常化し、速度の時間変動は不規則な乱流揺らぎを示すようになること、揺らぎの大きさは Wi 数の増加とともに増大することが確認できた。またこの揺らぎのパワースペクトルは弾性乱流に特徴的なべき則減衰を示すことがわかった。

【5】高分子付着氷晶核シミュレーションプログラムの作成

雲凝集核生成には様々な条件が必要であると考えられている。例えば埃、火山灰、硫酸塩、有機物などの空気中に漂う超微粒子の存在が必要とされている。そしてこれらの存在は凝集核の生成にとどまらず、凝固点降下など氷の性質、氷晶成長に様々な影響をもたらすと予想されているが、その影響は単純ではない。たとえば、低温環境に耐える生物が持つ不凍タンパクについて、その凝固点降下作用は単純なモル凝固点効果では説明できない。別種のタンパクの存在は凝固点上昇をもたらすこともある。どちらの場合も、凝固点の変化は不純物として含まれる高分子の特異な分子構造に起因すると考えられる。

様々な高分子の付着が氷晶の生成メカニズムに与える効果とそのメカニズムを解明することは、雲生成はもちろん、多くの凝固・融解現象の理解につながる。しかし、長時間かつ大規模な分子シミュレーションを行う必要があるため、そのような目的で行われたシミュレーションはほとんど存在しない。この現象解明のため、比較的大きな不純物分子 (有機物を含む) を含んだ水を扱うこと

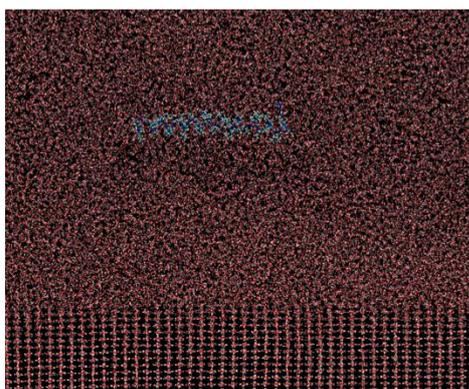


図 8. 新たに開発したプログラムコードで得た氷（下部）と水（上部）との境界付近に存在する不凍タンパク質(1j5b)の様子。不凍タンパク質は青色表示。

ができるシミュレーションプログラムを作成した。様々な有機分子も扱うことができるように、世界最大のタンパク質分子構造データベースである Protein Data Bank のデータを読み込むことができるようにした。また、有機分子用の分子動力学ポテンシャルポテンシャルとして定評がある AMBER potential を、その複雑な topology ファイルを解読することで、そのまま利用することができるようにした。計算時間を短くするために、不純物分子周辺は短いタイムステップでシミュレーションし、不純物分子から離れた部分では比較的長いタイムステップで時間発展させることにする。系全体の大半を占める個々の水分子は剛体として扱い、長いタイムステップで計算可能となる。他方、不純物分子はフレキシブルな分子モデルとして扱い、その周辺を含めて短いタイムステップで、高物理精度で計算している。その結果、高い信頼性を確保しつつ、高速計算が可能となった。

このシミュレーションプログラムを用いて幾つかの不純物存在下での氷生成シミュレーションを行った。特に不凍タンパクを用いたシミュレーションを重点的に行っている（図 8 参照）。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

雲粒子が凝結・衝突・併合により半径 $10 \mu\text{m}$ から $50 \mu\text{m}$ 超までの連続的成長の計算が可能になったことは大きな進展である。これまで、各要素計算は行われていたが、これらを統合しかつ高度な並列化を達成したことにより、現在では約 $100 \mu\text{m}$

程度の雨粒子形成までの計算が 1 日で完了できるまでに進展した。今後は、雲粒子衝突ダイアグラムを導入して雲粒子のマイクロ属性、初期雲粒径分布、エントレインメント（周囲の乾燥空気の巻き込み）、さらにはレイノルズ数などの影響などを調べ、雨粒子形成までの全貌の解明に進む。さらに、雲乱流中におけるスカラー揺らぎの統計法則の非普遍性の解明にむけて、巨視的条件の微細スケールへの影響と揺らぎの空間構造などを調べていく。高シュミット数スカラーの乱流輸送問題については、今後 Yeung 教授と共同してハイブリッド法をさらに改良し、格子点数 8192^3 の計算のための準備を進める。また、ハイブリッド法は高磁気プラントル数のホール磁気流体乱流 (Hall MHD) にも有効であることがわかり、コード開発を始めた。

雲粒子の衝突において様々なケースを考える上で、異なる液滴直径同士の衝突の解析は極めて重要である。今年度はまず、従来の二相系 LBM により異径液滴の衝突挙動解析を行い直径比およびレイノルズ数が衝突挙動に与える影響を明らかにした。さらには、改良二相系 LBM を導入し、雲粒子を想定した微小水滴の衝突挙動計算を行った。従来の LBM では数値安定性の理由により、ウェーバー数やレイノルズ数が実際の値よりもかなり高い領域の計算にとどまっていたが、この手法の導入により、従来よりも高密度、低ウェーバー数においても非物理的な流速が抑制されており、実際の雲粒子を想定したパラメータでも計算できることが確認できた。今後は改良二相系 LBM を用いて、実際の雲粒子を想定したパラメータにおける異径液滴の衝突や、衝突パラメータおよび重力の影響について調べる予定である。

室内実験における弾性不安定性の検証実験や弾性乱流の実験と同様の条件下において、遅い流れの高分子による乱流化現象を数値シミュレーションにより再現することが可能になった。実用上有益なのはこれを利用した物質混合への応用である。物質混合の評価が不十分であるので、今後はこの評価と弾性乱流の乱れ具合を特徴づける代表的パラメータの探索を行う。

不凍タンパクの氷成長阻害シミュレーションはまだ完了しておらず、今後はこれを完了させたい。これにより不凍タンパクが氷成長を阻害する様子をシミュレーションにより初めて実証することができる。そしてその結果として不凍効果をもたらす原因を確定できると考えている。また、多くの不凍タンパクを同時にさまざまな向き、位置に置いて行うシミュレーションであるので、いまだはつきりしていない不凍タンパクと氷界面との吸着に関しても新たな知見が得られると考えている。

全体として研究は順調に進展し、新たな展開の段階に入ったと考えている。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

[1] T. Gotoh, T. Suehiro, and I. Saito : “Continuous growth of cloud droplets in cumulus cloud”, *New J. Phys.* **18**, 043042 (2016).

[2] T. Gotoh and T. Watanabe: “Power and non-power laws of passive scalar moments convected by isotropic turbulence”, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 114502 (2015).

(2) 国際会議プロシーディングス

Y. Kajima and S. Ogata: Improved Fast Time Reversible Algorithm and Its Applications to Large-Scale Simulation of Ice, MSAM (2015), pp. 205-208, Thailand.

(3) 国際会議発表

[1] T. Gotoh and T. Watanabe, “Power and non-power laws of passive scalar moments in isotropic turbulence at very high Reynolds numbers”, Japan-Russia Workshop, Dec. Nagoya, (2015).

[2] T. Gotoh and T. Watanabe, “On the power law of passive scalars in turbulence”, Nov. APS, Boston, USA, (2015).

[3] Y. Kajima and S. Ogata: “Improved Fast Time Reversible Algorithm and Its Applications to Large-Scale Simulation of Ice, Aug. 24th, 2015, Thailand, MSAM (2015).

(4) 国内会議発表

[1] 渡邊威 「ながれと微小粒子集団の相互作用に関する大規模シミュレーション」 第 34 回名古屋

駅前イノベーションハブ技術シーズ発表会, 愛知県産業労働センター, 3 月 (2016).

[2] 後藤俊幸, 永井一輝, 杉浦究, 渡邊威 「上昇気流を伴った雲乱流中における雲粒子の連続的成長過程」日本物理学会, 東北学院大学, 仙台, 3 月 (2016).

[3] 石川直樹, 渡邊威, 後藤俊幸 「等方乱流中の有限サイズ粒子の挙動とその統計性」日本物理学会, 東北学院大学, 仙台, 3 月 (2016).

[4] 小島旭人, 渡邊威, 後藤俊幸 「透過壁を用いたチャンネル乱流の直接数値計算」日本物理学会, 東北学院大学, 仙台, 3 月 (2016).

[5] 永井一輝, 渡邊威, 後藤俊幸 「積雲中の雲粒子の成長」第 13 回 日本流体力学会 中部支部講演会, 富山大学, 11 月 (2015).

[6] 杉浦究, 渡邊威, 後藤俊幸 「雲マイクロ物理シミュレータによる粒子衝突計算」 第 13 回 日本流体力学会 中部支部講演会, 富山大学, 11 月 (2015).

[7] 松田和幸, 後藤俊幸 「積雲乱流中のラグレンジュ統計」 第 13 回 日本流体力学会 中部支部講演会, 富山大学, 11 月 (2015).

[8] 原沙也加, 後藤俊幸 「プランクトンの生態分布における乱流の効果」第 13 回 日本流体力学会 中部支部講演会, 富山大学, 11 月 (2015).

[9] 渡邊威 「乱流と微小粒子群の相互作用に関するシミュレーション研究」京都大学数理解析研究所研究集会「乱流を介在した流体现象の数理」, 京大, 7 月 (2015).

[10] 後藤俊幸, 渡邊威 「Anomalous scaling and non-power law of passive scalar convected by turbulence」, プラズマシミュレータシンポジウム, 核融合科学研究所, 土岐, 9 月 (2015).

[11] 後藤俊幸, 渡邊威 「雲乱流中における温度と水蒸気揺らぎの異常スケーリング」日本物理学会年秋季大会, 関西大学, 9 月 (2015).

[12] 澤田純平, 吉野正人, 鈴木康祐 「二相系格子ボルツマン法による異径液滴の衝突挙動解析」日本機械学会北陸信越支部 第 53 期総会・講演会, 信州大学, 3 月 (2016).

[13] 中村泰人, 吉野正人, 鈴木康祐 「CSF モデルを用いた改良二相系格子ボルツマン法による微小水滴の衝突挙動解析」第 29 回数値流体力学シンポジウム, 九州大学, 12 月 (2015).

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)