

結晶形状に準拠した座標系による氷晶成長の 2次元数値シミュレーション

川上貴士 板野稔久

平成29年9月

結晶形状に準拠した座標系による氷晶成長の2次元数値シミュレーション

(遠峰 菊郎 教授に捧ぐ)

川上 貴士* 板野 稔久**

(平成29年3月31日受付：平成29年6月9日受理)

Two Dimensional Numerical Simulation of Ice Crystal Growth in a Surface-Following Coordinate System (Dedicated to Professor Kikuro TOMINE)

By Takashi KAWAKAMI* and Toshihisa ITANO**

Ice crystal growth by diffusion of water vapor from supercooled liquid water is simulated with equations written in a surface-following coordinate system. This two-dimensional system, similar to “terrain-following coordinate system” used in meteorology and oceanography, consists of the one axis pointing vertical and the other following the crystal geometry. It facilitates the introduction of the boundary condition on the surface of ice crystal so that simplifies the algorithm for computer programming. By introducing the system, the growth of one branch of snow crystal is simulated smoothly in contrast to the previous simulations adopting the ordinary rectangular coordinate system where it becomes bumpy. Also, while the rectangular coordinate system shows different growth rate and shape of ice crystal with grid resolution, those obtained from the surface-following coordinate system depend little on grid resolution.

Keywords: Ice crystal, Diffusion, Sublimation, Snow, Terrain-following coordinate system

1. 緒言

中谷宇吉郎は1936年、長い円筒形の筒の下に置かれたビーカー内の水を温めることで筒内の空気を対流させるとともに水蒸気を供給する仕組みの実験装置を用い、世界初となる人工的な雪結晶の生成に成功した^{1),2)}。その後、この「対流型」の実験装置を用いてさまざまな条件下でおこなわれた実験結果は「中谷ダイヤグラム」として知られる図表にまとめられ、雪の結晶形が「温度」と「過飽和度」という2つの要素で決定されることがつきとめられた。「雪の結晶は天から送られた手紙である」³⁾とは、高層観測が難しかった当時、雪の結晶形をみることが上空の大気の状態を知る重要

な手がかりになりうることを示した彼の有名な言葉である。

1946年には、これとは対照的な「拡散型」と呼ばれる実験装置がSchaeferによって発表された⁴⁾。長方形の容器の下半分をドライアイスで冷やす一方、天頂部に設けた濡れたガーゼをヒーターで暖めることで水蒸気を供給する仕組みのものである。下側を冷やして上側を暖めるため対流はおこらず、水蒸気は上から下へと拡散過程によって輸送される。定常状態に達したあと、核となる糸や針金を容器内に吊り下げると、容器内の「温度」と「過飽和度」に応じた結晶が付着する。

駒林は、このような拡散過程で水蒸気が供給されて氷晶が成長するようすを簡単な枠組みで定式化し、数値的に再現する試みに初めて成功した^{4),5)}。それは水蒸気拡散によって支配される氷晶成長について、表面張

* 防衛大学校 本科 (第47期)

** 防衛大学校 応用科学群 地球海洋学科 准教授

力に基づく飽和蒸気圧変化を考慮する一方で、熱力学的効果および結晶学的異方性を除いた2次元の数値計算である。駒林の計算は、極座標を用いて六方対称な雪結晶全体の形を再現するものであったが、斎藤は問題をより簡略化し、中心から放射状に延びる樹枝の1本のみを計算することを試みている^⑩。但し、斎藤は正方形の格子を用い、計算領域を分割して水蒸気場を計算しているため、本来は滑らかな氷晶表面との境界が階段状に近似されており、これによって誤差が発生している可能性が懸念される。そこで本研究では、斎藤と同じ問題を違う座標系を用いて計算することを試みた。氷晶表面に沿った方向に x^* 座標を設定する一方、計算領域の下端(氷晶表面)と上端(過冷却水の表面)の間を上端で1となるように比例配分して規格化した無次元の長さを y^* 座標とする、一般に「地形準拠座標系」^⑦と呼ばれるものに似た座標系である。この座標系の導入により、氷晶表面の形を滑らかに表現することができ、容易に境界条件を取り込むことも可能となる。

その後、氷晶成長の数値計算の研究は、結晶表面上の微物理過程を取り入れたより複雑な方向へと進展していき^{⑧,⑨}、座標系の問題は未解決のままである。

2. 定式化

2.1 計算概要

基本的に斎藤のモデル^⑩を踏襲した計算を実施する。図1のように過冷却水と氷晶が共存する氷点下の環境で、過冷却水から氷晶へと水蒸気が拡散し、氷晶表面に供給された水蒸気が昇華することで氷晶が成長するようすを考える。領域の大きさは $42 \times 26 \mu\text{m}$ 、温度は全相にわたり -15°C の等温とする。したがって、水蒸気濃度は、過冷却水と水蒸気の境界では、水の飽和水蒸気濃度 $C_L (=1.14 \times 10^{-6} \text{g/cm}^3)$ 、氷晶表面においては、氷の飽和水蒸気濃度 C_S となる。但し、後者は氷晶表面の曲率によって変化し、平面に対する氷の飽和水蒸気濃度 $C_0 (=1.03 \times 10^{-6} \text{g/cm}^3)$ とは違った値をとることに注意が必要である。氷晶表面は平面とするが、中央部に有限振幅の初期擾乱を与えるものとする。座標は、氷晶の基底の向きを x 軸、それに直交する方向を y 軸とした。

2.2 基本方程式

本研究で使用する式は、「水蒸気の拡散を予測する式」と「氷晶の成長を予測する式」の二本立てである。拡散現象は一般に「拡散方程式」で予測されるが、氷

晶の成長と較べた場合、水蒸気は瞬間的に拡散し「定常拡散」とみなせるため、前者の式は「ラプラスの式」:

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} = 0 \quad (1)$$

となる。ここで $C(x, y)$ は水蒸気濃度である。

一方、後者の「氷晶の成長を予測する式」は、 x, y 座標を採用した場合、

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{D}{\rho} \left(\left. \frac{\partial C}{\partial y} \right|_{y=h} - \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{y=h} \frac{\partial h}{\partial x} \right) \quad (2)$$

で与えられる^⑩。但し、 t は時間、 $h(x, t)$ は氷晶の基底からの高さ、 $D (=0.2 \text{cm}^2/\text{s})$ は拡散定数、 $\rho (=0.9 \text{g/cm}^3)$ は氷晶の密度である。

2.3 境界条件

過冷却水と接した上側の境界条件は、

$$C = C_L \text{ at } y = H \quad (3)$$

となる。ここで $H (=42 \mu\text{m})$ は計算領域上端の高さである。一方、氷晶表面と接した下側の境界条件は、

$$C = C_S [=C_0(1 - \Gamma_D K)] \text{ at } y = h(x, t) \quad (4)$$

となる。ここで $\Gamma_D (=10^{-7} \text{cm})$ は毛細管定数であり、 K は結晶表面の凹凸を表す曲率である。 x, y 座標を用いた場合、曲率 K は、

$$K \equiv \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} / \left\{ 1 + \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 \right\}^{3/2} \quad (5)$$

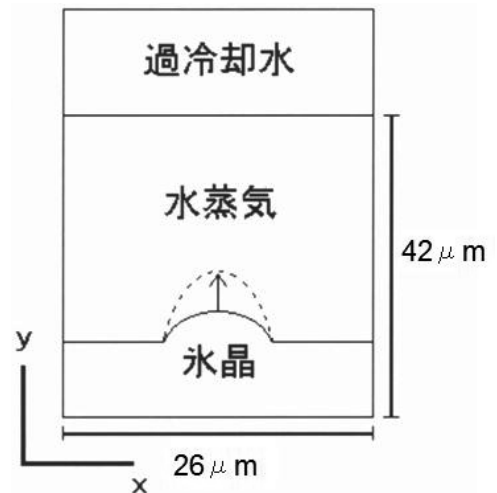


図1 氷晶の昇華拡散成長

Fig. 1 Growth of ice crystal by diffusion of water vapor from supercooled liquid water.

で与えられる。なお(4)式は、氷晶面が曲率を持った場合、凸部（凹部）においては平面の時と較べて飽和水蒸気濃度が高く（低く）なることを示している。

左右の境界条件については、斎藤⁹⁾にならない C_L と C_S を上下境界の間に線形補間したものを与えることとした。

3. 座標変換

3.1 氷晶表面に沿う座標系

斎藤⁹⁾は、ラプラスの式を解いて水蒸気分布を求める際、計算領域を幅が $1\ \mu\text{m}$ の正方形のグリッドで分割して計算を実施している（図2上）。この場合、領域の下端となる氷晶表面の形状を階段状でしか表現できず、実際の氷晶表面と計算上定義された境界との間にずれが生じる。また、氷晶の成長も $1\ \mu\text{m}$ 単位でしか表現できないため、実際には連続的な成長をしているにもかかわらず、水蒸気場の計算上では間欠的な成長としか認識されない。このような欠点を解決するため、計算領域の上端と下端、すなわち、過冷却水面と

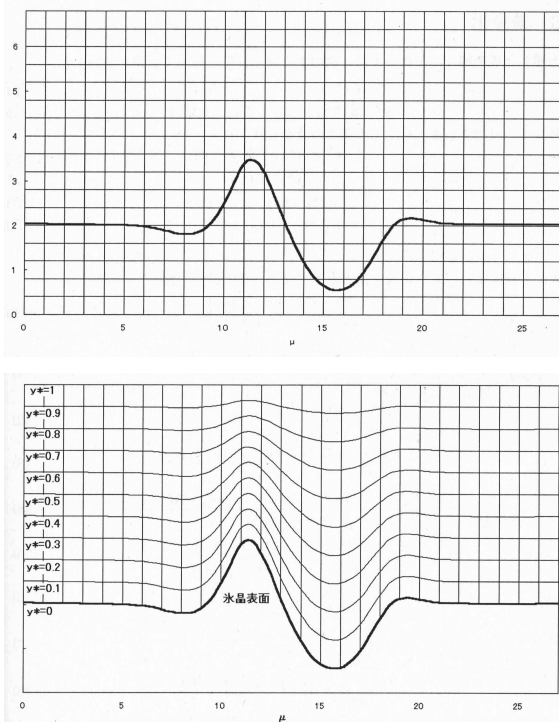


図2 （上）矩形の直交座標系と（下）氷晶表面に沿う座標系

Fig. 2 (Top) the rectangular coordinate system, and (Bottom) the surface-following coordinate system adopting normalized height.

の境界と氷晶表面との間で y 軸を比例配分した x^*, y^* 座標を設定した（図2下）。この場合、計算領域の下端においては結晶表面に沿った方向が x^* 軸となる。

x, y 座標と x^*, y^* 座標は以下の式で関係づけられる：

$$\begin{aligned} x^* &= x \\ y^* &= (y - h) / (H - h) \end{aligned} \quad (6)$$

3.2 x^*-y^* 座標系で記述した基本方程式

ここで、2章で紹介した基本方程式の x^*, y^* 座標系への座標変換を実施する。(6)式より、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial x^*}{\partial x} & \frac{\partial y^*}{\partial x} \\ \frac{\partial x^*}{\partial y} & \frac{\partial y^*}{\partial y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x^*} \\ \frac{\partial}{\partial y^*} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & G \\ 0 & F \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x^*} \\ \frac{\partial}{\partial y^*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x^*} + G \frac{\partial}{\partial y^*} \\ F \frac{\partial}{\partial y^*} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (7)$$

が得られる。但し、

$$\begin{aligned} G (= \frac{\partial y^*}{\partial x}) &\equiv \frac{y^* - 1}{H - h} \frac{\partial h}{\partial x^*} \\ F (= \frac{\partial y^*}{\partial y}) &\equiv \frac{1}{H - h} \end{aligned} \quad (8)$$

である。ラプラシアン ∇^2 は

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix}$$

と書けるため、ラプラスの式 [(1)式] を x^*, y^* 座標で記述すると、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x^*} + G \frac{\partial}{\partial y^*} \\ F \frac{\partial}{\partial y^*} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x^*} + G \frac{\partial}{\partial y^*} \\ F \frac{\partial}{\partial y^*} \end{pmatrix} C &= 0 \\ \therefore \frac{\partial^2 C}{\partial x^{*2}} + \left(\frac{\partial G}{\partial x^*} + G \frac{\partial G}{\partial y^*} \right) \frac{\partial C}{\partial y^*} + 2G \frac{\partial^2 C}{\partial x^* \partial y^*} &+ (G^2 + F^2) \frac{\partial^2 C}{\partial y^{*2}} = 0 \end{aligned} \quad (9)$$

となる。

一方、氷晶の成長を予測する(2)式の $x^* \cdot y^*$ 座標への変換は、 $h = h(x, t) = h(x^*, t)$ であることに注意すると、

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{D}{\rho} \left[(F - G \frac{\partial h}{\partial x^*}) \frac{\partial C}{\partial y^*} \Big|_{y^*=0} - \frac{\partial h}{\partial x^*} \frac{\partial C}{\partial x^*} \Big|_{y^*=0} \right] \quad (10)$$

となることがわかる。

最後に、曲率 K については $\partial h / \partial x = \partial h / \partial x^*$ であるため、(5)式と同じ形の式

$$K = \frac{\partial^2 h}{\partial x^{*2}} / \{1 + (\frac{\partial h}{\partial x^*})^2\}^{3/2} \quad (11)$$

が得られる。

なお、 $x^* \cdot y^*$ 座標で記述された方程式系への座標変換の手続きに関しては、吉崎⁹⁾も参照して頂きたい。

4. 差分化

4.1 差分方程式

前章で導出した式を解くにあたり、

$$\begin{aligned} x^* &= \Delta x^* \cdot i & (i = 0, 1, \dots, I_{\max}) \\ y^* &= \Delta y^* \cdot j & (j = 0, 1, \dots, J_{\max}) \\ t^* &= \Delta t^* \cdot n & (n = 0, 1, \dots, N_{\max}) \end{aligned} \quad (12)$$

のような独立変数の離散化をおこなった。対応する各格子点上における従属変数の値は、

$$\begin{aligned} C_{i,j} &\equiv C(x^*, y^*) \\ h_i^n &\equiv h(x^*, t) \end{aligned} \quad (13)$$

と置く。ここで、空間微分を中央差分で近似すると、(9)式は、

$$\begin{aligned} C_{i,j} &= \frac{\Delta x^{*2} \Delta y^{*2}}{2\Delta y^{*2} + 2\Delta x^{*2} \{(G_{i,j})^2 + (F_i)^2\}} \\ &\times \left[\frac{C_{i+1,j} + C_{i-1,j}}{\Delta x^{*2}} + \frac{C_{i,j+1} - C_{i,j-1}}{2\Delta y^*} \right. \\ &\times \left(\frac{G_{i+1,j} - G_{i-1,j}}{2\Delta x^*} + G_{i,j} \frac{G_{i,j+1} - G_{i,j-1}}{2\Delta y^*} \right) \\ &+ 2G_{i,j} \frac{C_{i+1,j+1} - C_{i+1,j-1} - C_{i-1,j+1} + C_{i-1,j-1}}{4\Delta x^* \Delta y^*} \\ &\left. + \{(G_{i,j})^2 + (F_i)^2\} \frac{C_{i,j+1} + C_{i,j-1}}{\Delta y^{*2}} \right] \quad (14) \end{aligned}$$

となる。但し、

$$\begin{aligned} G_{i,j} &= \frac{\Delta y^* \cdot j - 1}{H - h_i^n} \frac{h_{i+1}^n - h_{i-1}^n}{2\Delta x^*} \\ F_i &= \frac{1}{H - h_i^n} \end{aligned} \quad (15)$$

である。

一方、氷晶の成長を予測する(10)式の差分化は、空間微分を x^* 方向については中央差分、 y^* 方向については前方差分とし、時間微分についても前方差分を採用して実施した：

$$\begin{aligned} h_i^{n+1} &= h_i^n + \frac{D}{\rho} \left[(F_i - G_{i,0}) \frac{h_{i+1}^n - h_{i-1}^n}{2\Delta x^*} \frac{C_{i,1} - C_{i,0}}{\Delta y^*} \right. \\ &\quad \left. - \frac{h_{i+1}^n - h_{i-1}^n}{2\Delta x^*} \frac{C_{i+1,0} - C_{i-1,0}}{2\Delta x^*} \right] \Delta t \end{aligned} \quad (16)$$

最後に曲率 K については、中央差分を用いて

$$K_i = \frac{h_{i+1}^n + h_{i-1}^n - 2h_i^n}{\Delta x^{*2}} / \{1 + (\frac{h_{i+1}^n - h_{i-1}^n}{2\Delta x^*})^2\}^{3/2} \quad (17)$$

と近似した。

4.2 計算手順

氷晶成長の計算は、ラプラスの式を反復法で解くことから開始する。具体的には、まず最初に氷晶の初期形状 h_i^0 を与え、これから G_{ij} および F_i の分布と、表面の凸凹に応じた曲率 K_i を求める。その後 C の適当な初期値 $C^{(0)}_{ij}$ を(14)式の右辺に代入して第1推定値 $C^{(1)}_{ij}$ を計算する。次にこの第1推定値 $C^{(1)}_{ij}$ を(14)式の右辺に再度代入することで、第2推定値 $C^{(2)}_{ij}$ を導出する。以下、同様の手続きを(14)式の両辺が等しくなるまで繰り返す。この手続きは、一般に第 k 推定値を $C^{(k)}_{ij}$ で表すと、

$$\begin{aligned} C_{i,j}^{(k+1)} &= \frac{\Delta x^{*2} \Delta y^{*2}}{2\Delta y^{*2} + 2\Delta x^{*2} \{(G_{i,j})^2 + (F_i)^2\}} \\ &\times \left[\frac{C_{i+1,j}^{(k)} + C_{i-1,j}^{(k)}}{\Delta x^{*2}} + \frac{C_{i,j+1}^{(k)} - C_{i,j-1}^{(k)}}{2\Delta y^*} \right. \\ &\times \left(\frac{G_{i+1,j} - G_{i-1,j}}{2\Delta x^*} + G_{i,j} \frac{G_{i,j+1} - G_{i,j-1}}{2\Delta y^*} \right) \end{aligned} \quad (18)$$

$$+ 2G_{i,j} \frac{C_{i+1,j+1}^{(k)} - C_{i+1,j-1}^{(k)} - C_{i-1,j+1}^{(k)} + C_{i-1,j-1}^{(k)}}{4\Delta x^* \Delta y^*} \\ + \{(G_{i,j})^2 + (F_i)^2\} \frac{C_{i,j+1}^{(k)} + C_{i,j-1}^{(k)}}{\Delta y^{*2}}]$$

と書くことができる。但し、厳密に $C^{(k+1)}_{i,j} = C^{(k)}_{i,j}$ を成立させることは不可能なので、あらかじめ指定しておいた微小量 ε に対して不等式

$$\sum_{i,j} |C^{(k+1)}_{i,j} - C^{(k)}_{i,j}| \leq \varepsilon \quad (19)$$

が成立した際に、 $C^{(k+1)}_{i,j}$ (あるいは $C^{(k)}_{i,j}$) を解とみなすことになる。なお、上下の境界条件

$$C^{(k)}_{i,j_{\max}} = C_L \\ C^{(k)}_{i,0} = C_0 (1 - \Gamma_D K_i)] \quad (20)$$

および、左右の境界条件

$$C^{(k)}_{0,j} = C_L + (C_L - C_0)j/J_{\max} \\ C^{(k)}_{J_{\max},j} = C_L + (C_L - C_0)j/J_{\max} \quad (21)$$

は、この繰り返し計算を実施する際に組み込まれる。

ラプラスの式の解が求まると、(16)式を用いて結晶の成長を計算する。その後、求めた h_i の分布をもとに、 $G_{i,j}$ と F_i および曲率 K_i を計算し、以降は同じ手続きを繰り返す。

計算するにあたっては、 x^* 方向の格子間隔を $\Delta x^* = 1 \mu\text{m}$ 、 y^* 方向の格子間隔を $\Delta y^* = 1/42$ (ほぼ $1 \mu\text{m}$ に相当)、時間間隔を $\Delta t = 1\text{s}$ としたものを基本設定した。その後、これらの値を $1/2 \sim 1/5$ 倍まで細かくした計算も実施した。

5. 結果

初期条件として半波長が $7 \mu\text{m}$ で振幅が $2 \mu\text{m}$ の正弦波状の突起を与え、氷晶が 1 分間成長する様子を計算した。結果を図 3 に示す。各図は、それぞれ格子間隔を $\Delta x^* = 1 \mu\text{m}/N_{\text{res}}$ 、 $\Delta y^* = 1/(42 \times N_{\text{res}})$ 、時間間隔を $\Delta t = 1\text{sec}/N_{\text{res}}$ として計算した結果である。なお、ラプラスの式を反復法で解く際の判定値 ε の値 [(19)式] については、 $N_{\text{res}} = 1 \sim 5$ の各解像度に対してそれぞれ $\varepsilon = 1.0 \times 10^{-22}$ 、 $\varepsilon = 5.0 \times 10^{-22}$ 、 $\varepsilon = 8.0 \times 10^{-22}$ 、 $\varepsilon = 5.0 \times 10^{-21}$ 、 $\varepsilon = 8.0 \times 10^{-21}$ に設定した。図 3 をみると、基本的に突起の部分が時間とともに著しく成長し、逆に突起の付け根部分の成長が遅い様子が計算されている。これは、本来この部分の成長に使われるはずの水蒸気が、突起部の成長で消費されたためであると思

われる。一方、初期に平らであった部分は、付け根部分のへこみが拡大してくるまでは、ほぼ一様に成長している。結果として、初期に突起の付け根であった場所に極小値が形成されている。

ここで解像度の違いによる結果の依存性をみてみると、解像度 1 ($N_{\text{res}} = 1$) のときはより細かい解像度の結果と比較して突起が膨らむ傾向があり、また突起の成長が一番高く ($\sim 8 \mu\text{m}$) 計算されている。解像度を 2 以上にあげると、突起の頂部で多少ばらつきがあるものの、その他の部分の結果はほとんど同じであり、解像度 4 ($N_{\text{res}} = 4$) 以上になると、突起部も含めてほぼ全域で一致している。これより、解像度をあげることで計算が収束する様子が確認できる。

次に、図 3 の各時刻における $h(x)$ の分布 ($N_{\text{res}} = 4$) から初期の分布を差し引くことで、氷晶の成長量の分布を導出してみた (図 4)。これより、初期形状で凸の部分がその後も一番成長し、成長量が $5.6 \mu\text{m}$ 程度に達していることがわかる。これは原点付近に見られる平均的な成長量 ($\sim 3.6 \mu\text{m}$) のほぼ 5 割増しの値である。逆にへこんだ部分の成長は鈍く、最も成長が遅い部分の成長量は、成長の最も早い突起先端部の $1/3$ 程度であることがわかる。これは、先に述べた通り水蒸気が突起部に集中した結果、本来凹部に供給されるはずの水蒸気量が減少したためである。なお、凹部の中にあたる $x = 9$ および $18 \mu\text{m}$ に小さな極大値がみられるが、これは初期条件として与えた正弦波擾乱の左右で微分が不連続であったことによる影響であると思われる。

最後に、代表的な場所における氷晶の成長量の時間変化を図 5 に示す。曲線の傾きが成長速度を表すことに注意すると、成長量の最も大きい突起の先端部 ($x = 13.5 \mu\text{m}$) における成長速度が、全期間にわたって最も大きいことがわかる。但し、その成長速度には 40 秒を過ぎたあたりから陰りがみられる。一方、成長量・成長速度が最も小さいのは、 $h(x)$ の極小値が形成される $x = 8.75$ ではなく、初期に突起の中腹であった $x = 10.25 \mu\text{m}$ においてであった。また、成長量が最も小さい $x = 10.25 \mu\text{m}$ より外側では、成長量・成長速度とも外側へいくほど大きくなっている。但し、成長速度は、突起の付け根付近 ($x = 8.75, 9 \mu\text{m}$) では時間とともに遅くなっているが、その外側 ($x = 0, 4 \mu\text{m}$) では逆の傾向がみられる。図 3 において成長量の小さな極大がみられた $x = 9 \mu\text{m}$ における時間変化は、成長量が最も小さい $x = 8.75 \mu\text{m}$ におけるものとほぼ同じであった。

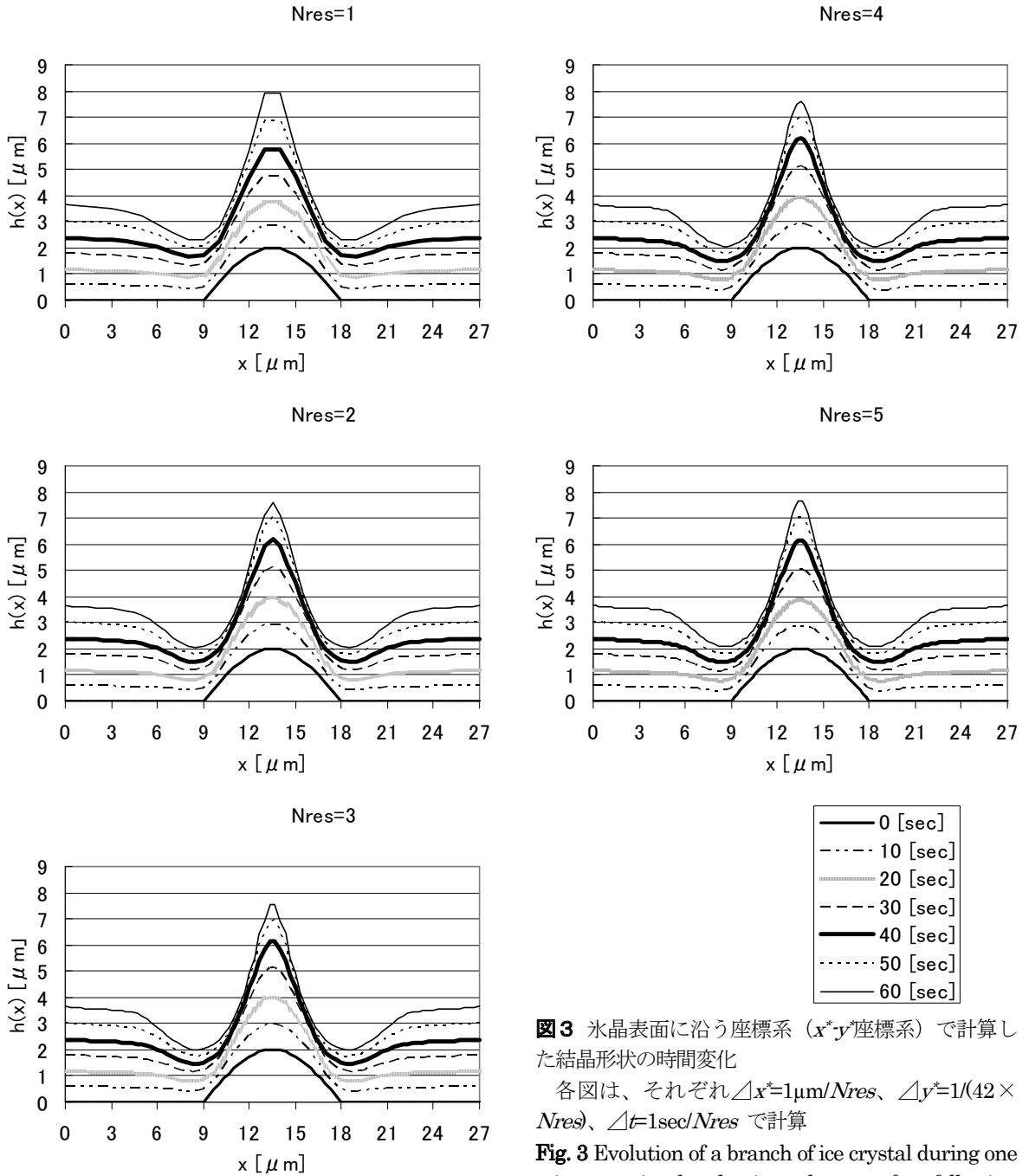


図3 氷晶表面に沿う座標系 (x^* - y^* 座標系) で計算した結晶形状の時間変化

各図は、それぞれ $\Delta x^* = 1\mu\text{m}/N_{\text{res}}$ 、 $\Delta y^* = 1/(42 \times N_{\text{res}})$ 、 $\Delta t = 1\text{sec}/N_{\text{res}}$ で計算

Fig. 3 Evolution of a branch of ice crystal during one minute simulated in the surface-following coordinate system adopting normalized height. [$\Delta x^* = 1\mu\text{m}/N_{\text{res}}$, $\Delta y^* = 1/(42 \times N_{\text{res}})$, $\Delta t = 1\text{sec}/N_{\text{res}}$]

6. 議論

6.1 直交座標系との比較

本節では、矩形の直交座標系を採用しておこなわれた計算結果との比較を試みる。図6に示した通り、そのような矩形の直交座標系で氷晶の形状を表現すると階段状になってしまうのが不可避であり、明らかに結

果が悪くなることが予測される。そこでまず斎藤⁹⁾を参考にして、前章で解いたのと同じ問題を正方形の直交座標系 (x - y 座標系) を用いて計算してみた。結果

を図7に示す。但し、ラプラスの式を反復法で解く際に現れる判定値 ε については基本的に x^*-y^* 座標系の計算と同じ値を採用したが、(19)式の判定式にかかわらず、最低1,000回の繰り返し計算を課すこととした。このように多めの繰り返し計算を課したのは、氷晶形状が時間とともに変化するにつれて判定値 ε の値も変化することが考えられたためである。この対処により、反復法の計算については、結果が収束する (i.e. これ以上繰り返し回数を増やしても結果が変わらない) ことが確認できている。それにもかかわらず、解像度1では、30秒後を過ぎたあたりで計算が破綻した。これはちょうど、氷晶形状の勾配 $\partial h / \partial x$ が大きくなり過ぎ、計算領域の下端における隣り合う格子間の段差が $2\Delta y$ 以上 (i.e. $|h(n+1)\Delta x - h(n)\Delta x| > 1.5\Delta y$) となった時点であった。

x^*-y^* 座標系を用いた結果 (図3) と比較すると、 $x-y$ 座標系では結果が解像度によって大きく違っている。例えば、左右の境界付近の成長量は解像度にあまり依存していないものの、突起頂点部の高さをみると、1分後の高さが解像度2から5の間で6.56, 6.13, 5.94, 5.83 μm となり、解像度が上がるにつれて低くなる傾向がみられる。同時に、突起の付け根あたりにみられる窪みも、解像度とともにはっきりしなくなってくる。これは、解像度をあげても計算結果が一定の分布へ収束しないことを示しており、矩形の直交座標系が致命的な欠点を持っていることを示唆している。

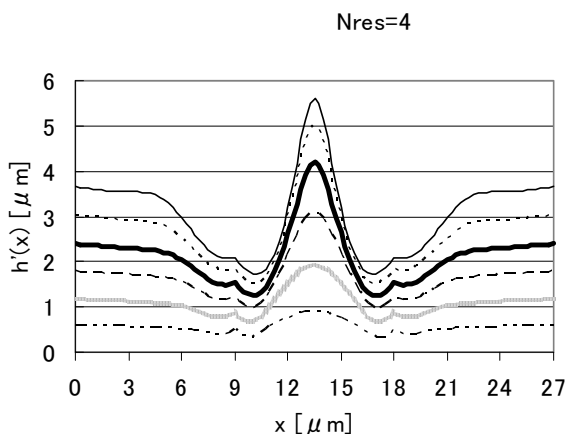


図4 氷晶成長量の分布

各時刻における $h(x)$ の分布 [図3 ($N_{res}=4$)] から初期形状を差し引いたもの (各線の割り当ては図3と同じ)

Fig. 4 Distributions of growth amount over a branch of ice crystal (Lines are allocated in the same way as Fig. 3).

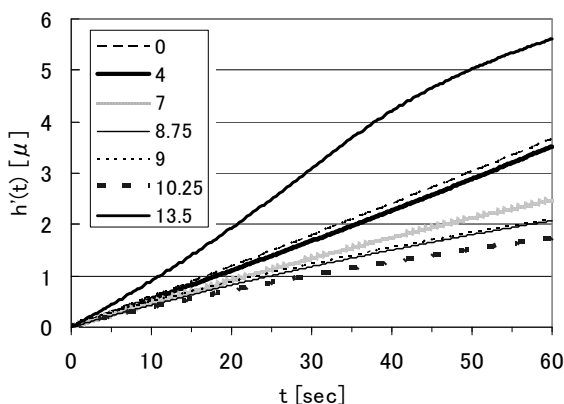


図5 代表的な場所における氷晶の成長量の時間変化 ($x=0, 4, 7, 8.75, 9, 10.25, 13.5 \mu\text{m}$) ($N_{res}=4$)

Fig. 5 Time series of ice crystal growth at selected locations ($x=0, 4, 7, 8.75, 9, 10.25$, and $13.5 \mu\text{m}$).

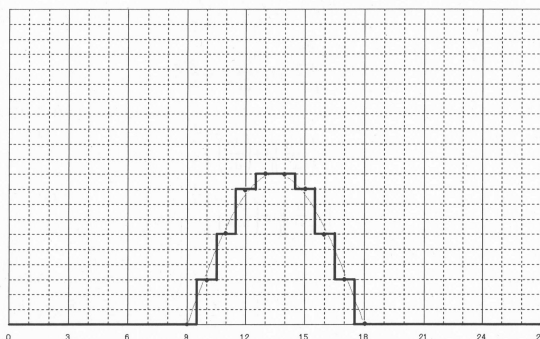


図6 矩形の直交座標系で表現した氷晶の形状

Fig. 6 Geometry of ice crystal represented by rectangular coordinate system.

その一方で、二軸が直交しない x^*-y^* 座標系では、たとえ計算が破綻することなく実施され、滑らかな計算結果が得られたとしても、表面の傾きが大きくなると誤差が真値よりも大きくなるという欠点が指摘されている¹¹⁾。しかし、より複雑な支配方程式を用いた気象の数値実験に関しては、非静力学の圧縮性方程式をもとに開発された3種類の領域気象モデルを比較した結果から、45度を超えるような急勾配であっても精度よく孤立した山岳上の流れを再現できているとの結論が導かれている¹²⁾。このため、急勾配によって生じる誤差については常に気を付けておく必要があるものの、ある程度の勾配までは、 x^*-y^* 座標系で氷晶の成長が正しく計算できるとみなして良いものと推測される。

最後に、矩形の直交座標系では、 x^*-y^* 座標系で解く場合よりも支配方程式が簡単であるものの、逆に計算アルゴリズムは格段に複雑となり、また反復法の計算

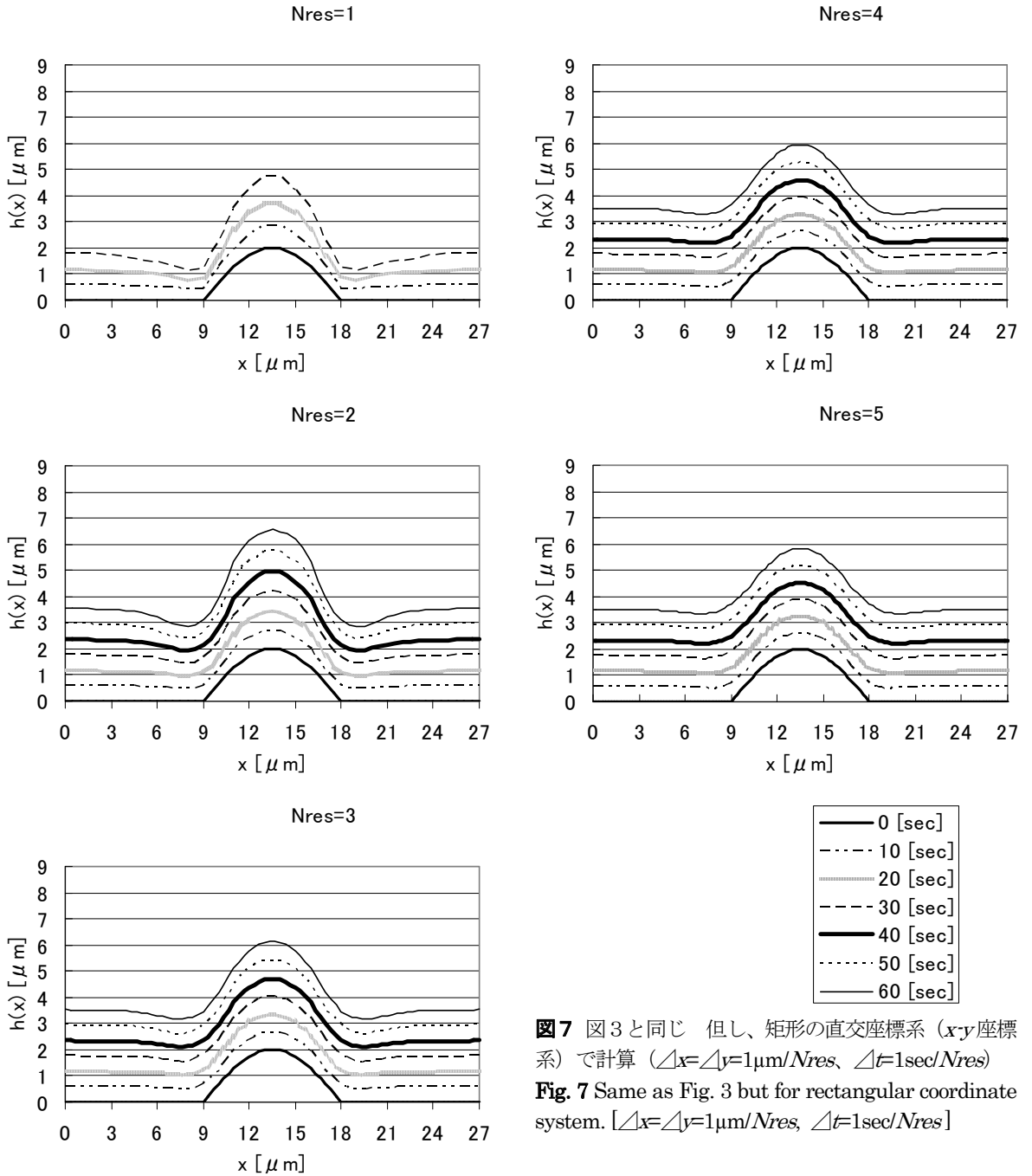


図7 図3と同じ 但し、矩形の直交座標系 (x - y 座標系) で計算 ($\Delta x = \Delta y = 1\mu\text{m}/N_{\text{res}}$, $\Delta t = 1\text{sec}/N_{\text{res}}$)
Fig. 7 Same as Fig. 3 but for rectangular coordinate system. [$\Delta x = \Delta y = 1\mu\text{m}/N_{\text{res}}$, $\Delta t = 1\text{sec}/N_{\text{res}}$]

において収束させるまでにより多くの繰り返し計算が必要とされることも付記しておく。

6.2 初期条件に対する依存性

次に、初期条件に対する依存性を調べてみた。図8は、中央の9 μm の区間に振幅が2 μm の正弦波を1波長あるいは1.5波長与えた場合の計算結果である。

前章と同様に、反復法の計算では ε の値に関わらず1,000回 (図8上)、あるいは2,000回 (図8下) の繰り返し計算を課した。これにより、計算がほぼ収束することが確認できている。

図8上をみると、基本的には凸の部分がより先鋭化する一方でその付け根部分の成長が抑制されるというこれまで通り傾向がみられる。この特徴に加えて、凹

部の成長が最も遅いようすが明らかである。しかしながら、成長量を詳しくみると、突起部よりも周辺部の方が成長量が大きく、結果として1分後の周辺部の高さは突起頂部の高さと同程度になっていることがわかる。興味深いことに、1分後に最も高くなったのは、突起部でも周辺部でもなく、初期に窪みの右側であった場所であった。これは、本来であれば凹部へ供給されるはずの水蒸気が、そこでの成長が抑制された分だけその部分へ回ったためであると推測される。

初期に1.5波長分の正弦波を与えた場合では、前節で述べた傾向がより顕著な形で表れている(図8下)。すなわち、凹部の成長が極端に抑制される一方で、周

辺部の成長量が大きく、突起部の成長をも追い越している。最も成長したのは、初期に正弦波擾乱の外側にあった部分である。1波長を与えた場合と同様に、凹部へ供給されるはずの水蒸気がその部分へ回ったためであると推測される。また詳しくみていくと、正弦波擾乱の凹部の側面にあたる部分では、時間とともに $h(x)$ が減少している箇所が認められる。これは、素直に氷晶が融解していると解釈することもできるが、 $h(x)$ の勾配が大きくなところで誤差が大きくなる x^*y^* 座標系を採用したことによる人為的なものである可能性も考えられる。現段階では理由は不明である。

7. 結論

過冷却水から蒸発した水蒸気の昇華拡散成長によって氷晶が成長するようすについて、2次元の数値計算を実施した。同様の計算をおこなった斎藤⁹⁾が正方形の直交座標系を採用したのに対して、本研究では規格化された鉛直座標を持ち、最下層の氷晶表面ではその形状に沿うような座標系を新たに導入した。この座標系では氷晶表面を滑らかに表現することができ、境界条件を簡単に取り込むことが可能である。また、支配方程式が若干複雑になるものの、数値計算をするためのプログラミングは逆に容易になるという利点も持っている。この「氷晶表面に沿う座標系」を採用した場合、解像度をあげると計算結果が収束するため、解が正しく計算されていることが推測された。その一方で、矩形の直交座標系を採用した場合には、氷晶突起頂部の高さが解像度とともに低くなる傾向がみられ、解像度をあげても結果が収束しないことが確認された。

氷晶成長の特徴としては、初期に凸部であった部分がその後も早く成長する一方、その周囲の成長が抑制される傾向がみられた。しかし、初期の氷晶表面に凹部があった場合にはもう少し複雑な特徴が現れ、凹部の成長が極端に抑制される一方、凸部の成長よりも周辺部の成長量の方が大きくなるという傾向がみられた。

氷晶や雪結晶の形態形成に関しては、その後結晶の分子構造を考慮したパラメタリゼーションを含んだ計算がなされるようになったが^{8),9)}、その場合でも本研究で提案したような座標系を採用することが有効であると思われる。特に今回は2次元の計算であったが、容易に3次元の計算へと拡張することも可能であり、矩形の格子を採用することによる誤差は3次元の計算の方がより大きいことが明らかなので、今回提案した座標系を採用することの優位性がよりはっきりするであろう。

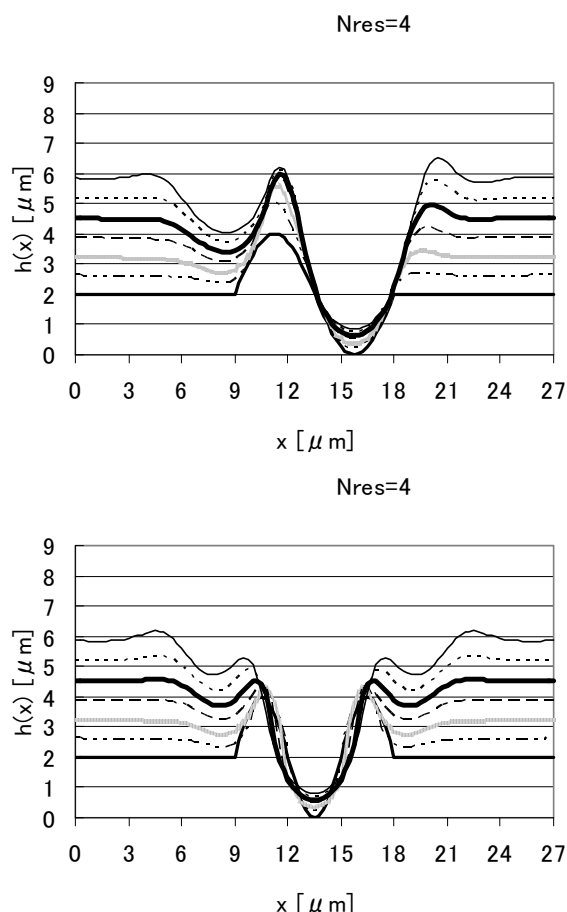


図8 氷晶表面に沿う座標系(x^*y^* 座標系)で初期条件を変えた場合の結晶成長のようす($Nres=4$)

(上) 1波長、(下) 1.5波長

Fig. 8 Same as Fig.3 but for different initial conditions. Top and bottom calculations start from one and one-and-half wavelength sinusoidal waves, respectively.

参考文献

- 1) 中谷宇吉郎：「雪」，岩波書店，東京（1938）.
- 2) U. Nakaya： *Snow Crystals: Natural and Artificial*, Harvard University Press. Cambridge, Massachusetts (1954).
- 3) V. J. Schaefer： “The production of ice crystals in a cloud of supercooled water droplets” , *Science*, **104** (1946), pp.457-459.
- 4) M. Komabayasi： “Two dimensional computation of shape of anisotropic ice crystal growing in air ” , *J. de Recherches Atmospheriques*, **6** (1972), pp.307-328.
- 5) 駒林 誠：雪結晶の形を表現する微分方程式，気象研究ノート，第123号（1974），pp.885-921.
- 6) 斎藤 優： 2次元モデルによる氷晶成長の数値計算，天気，第19巻第6号（1972），pp.293-297.
- 7) N. A. Phillips： “A coordinate system having some special advantages for numerical forecasting” , *J. Meteor.*, **14**(1957), pp.184-185.
- 8) 黒田登志雄，横山悦郎：雪結晶の形態形成シミュレーション，天気，第35巻第3号（1988），pp.207-210.
- 9) E. Yokoyama and T. Kuroda： “ Pattern formation in growth of snow crystals occurring in the surface kinetic process and the diffusion process” , *Phys. Rev.*, **A41**(1990), pp.2038-2049.
- 10) 吉崎正憲：地形に沿う座標系における支配方程式，気象研究ノート，第196号（1999），pp.37-43.
- 11) H. Yamazaki and T. Satomura： “Nonhydrostatic atmospheric modeling using a combined Cartesian grid” , *Mon. Wea. Rev.*, **138** (2010), pp.3932-3945.
- 12) T. Satomura, T. Iwasaki, K. Saito, C. Muroi and K. Tsuboki： “Accuracy of terrain following coordinates over isolated mountain: steep mountain model intercomparison project (St-MIP)” , *Annals Disast. Prev. Res. Inst., Kyoto Univ.*, **46B** (2003), pp.337-346.