

## 2次元モデルによる氷晶成長の数値計算\*

齋 藤 優\*\*

### 要 旨

水蒸気拡散によって支配される氷晶の成長の、表面張力に基づく蒸気圧変化を考慮した、2次元数値計算を試みた。熱効果及び結晶学的異方性は除いた。

グリッド間隔は1ミクロン、時間ステップは1秒とした。水蒸気場を求めるラプラスアン境界は、氷表面に最近接するグリッドを用いた。氷表面は、グリッドの間にある場合でも、連続的に表示した。

平面氷の表面の一部に、正弦波状の初期じょう乱を与え、数例の計算を試みた結果、安定な計算が遂行できることがわかった。

### 1. ま え が き

成長しつづつある結晶の形状については、それが成長していく気体の種類、気圧、気温によって著しく異なることが知られてきた。

Mullins and Sekerka (1963) は、成長しつづつある金属結晶の形状の安定、不安定に関する理論を開発した。それは、まず結晶の基本形に無限小の摂動を与え、この摂動の振幅が時間的に増大するか否かで、形状の安定、不安定を論じたものであった。

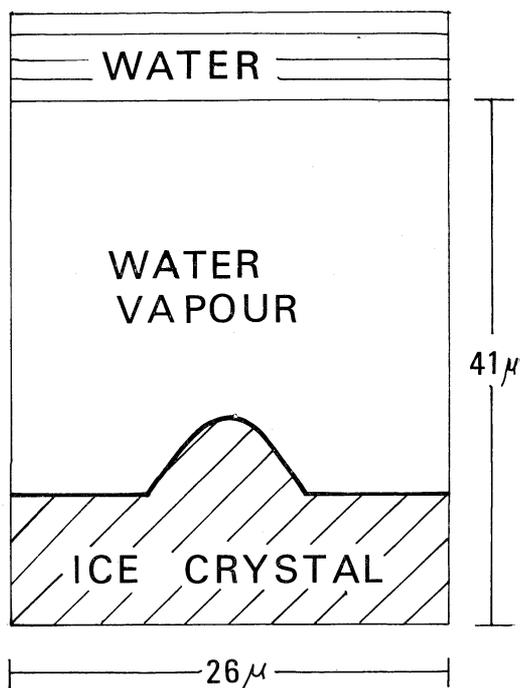
もし、表面張力の効果を考えなければ、結晶表面での蒸気濃度は等しくなり、ラプラスアンで定める蒸気場は、その蒸気流線を凸の部分に集中させる。そのため凸の部分はますます凸になり、凹の部分はますます凹になり結晶の成長を形態的に不安定化させる。一方、結晶表面での表面張力の効果を考えると、凸の部分はその曲率に応じて飽和蒸気濃度が高くなり、凹の部分は低くなる。そのため凸の部分に集中する蒸気流線を減らし、凹の部分に流線を集めることになり、結晶の形状を安定にする。このように、蒸気拡散によって支配される結晶の成長では、その形状を不安定とさせる要因は蒸気濃度の勾配であり、安定にする要因は表面張力である。

Komabayasi (1970) は、Mullins and Sekerka (1963) によって開発されたこの無限小摂動による手法を、氷晶の成長に適用し、その解析解を求め、実験結果と比較した。

ここでは筆著は、有限摂動の場合の、2次元数値計算を報告する。

### 2. モデル

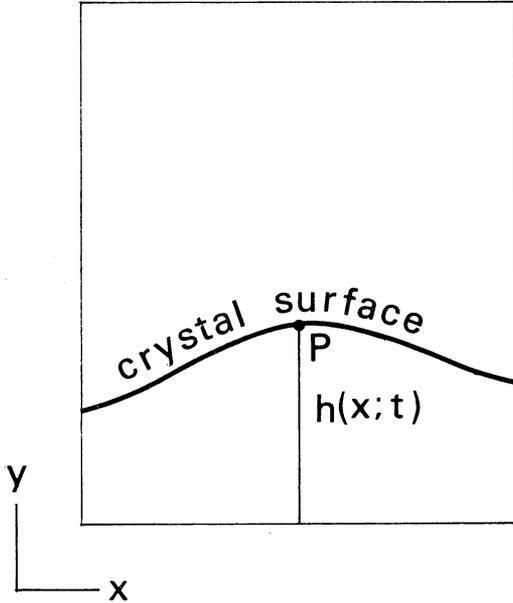
図1のように、水蒸気が過冷却水から拡散によって氷晶に供給され、氷晶が成長していくモデルを考えた。氷晶基本形は平面とし、その中央に正弦波状のじょう乱を与えて、初期形状とした。氷晶表面の水蒸気濃度は、表



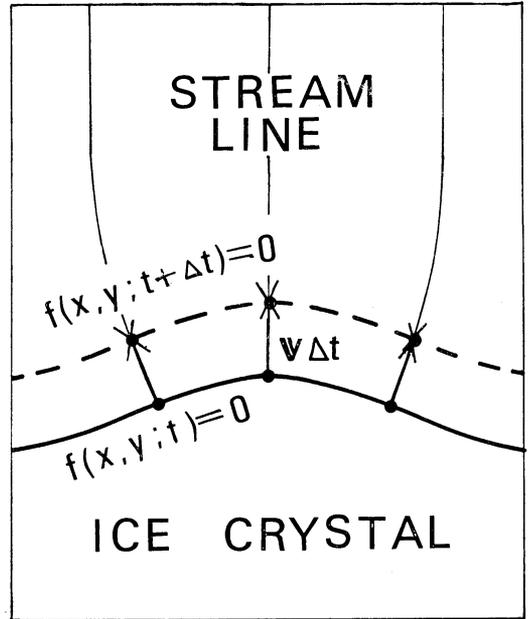
第1図 モデル図

\* Numerical Experiment of Growth of Ice Crystals by two Dimensional Model.

\*\* M. Saito: 網走地方気象台  
—1971年9月27日受理—



第2図 氷晶表面の表示方法



第3図 成長する氷晶表面の表示方法

面の凹凸を考慮した氷飽和蒸気濃度，水と水蒸気の境界は，水の飽和蒸気濃度とした．モデル全系は $-15^{\circ}\text{C}$ の等温とした．領域の大きさは $26\mu\times 41\mu$ とした．

3. 基礎方程式

図2のように，氷晶の基底を， $x-y$  直角座標における  $x$  軸とする．氷晶の基底から表面までの高さを，

$$y=h(x;t) \tag{1}$$

とする．氷晶表面の曲率  $K$  は，

$$K=-\left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}\right)\left\{1+\left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2\right\}^{-\frac{3}{2}} \tag{2}$$

水蒸気の場合は，瞬間的に定常拡散とみて，

$$\nabla^2 C=0 \tag{3}$$

ただし， $C$ ：水蒸気濃度

$$\nabla^2: \text{演算子}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)$$

氷晶表面での水蒸気濃度は，曲率を有する氷面の局所飽和濃度に等しいとして，

$$C_s=C_0(1+\Gamma_b K) \tag{4}$$

ただし， $C_s$ ：氷晶面（曲面）に対する飽和水蒸気濃度

$C_0$ ：氷晶面（平面）に対する飽和水蒸気濃度

$\Gamma_b$ ：毛細管定数（ $\approx 10^{-7}\text{cm}$ ）

$K$ ：氷晶面の曲率

水蒸気拡散で成長するから，氷晶面上にとった点  $P$

の成長速度  $v(u,v)$  は，

$$v=-\frac{D}{\rho} \nabla C \tag{5}$$

ただし， $v(u,v)$ ：氷晶面上の点の成長速度

$D$ ：拡散係数（ $\approx 0.2\text{cm}^2/\text{sec}$ ）

$\rho$ ：氷晶密度（ $\approx 0.9\text{g}/\text{cm}^3$ ）

$$\nabla: \text{演算子}\left(-\frac{\partial}{\partial x}\mathbf{i}+\frac{\partial}{\partial y}\mathbf{j}\right)$$

氷晶表面では，(1) より，

$$f(x,y;t)=y-h(x;t)=0 \tag{6}$$

が成り立つ．図3のように，時刻  $t$  において氷晶表面にあった点が成長速度  $v(u,v)$  で動いて，時刻  $t+\Delta t$  の氷晶表面をつくると考えると，

$$f(x,y;t+\Delta t)=0$$

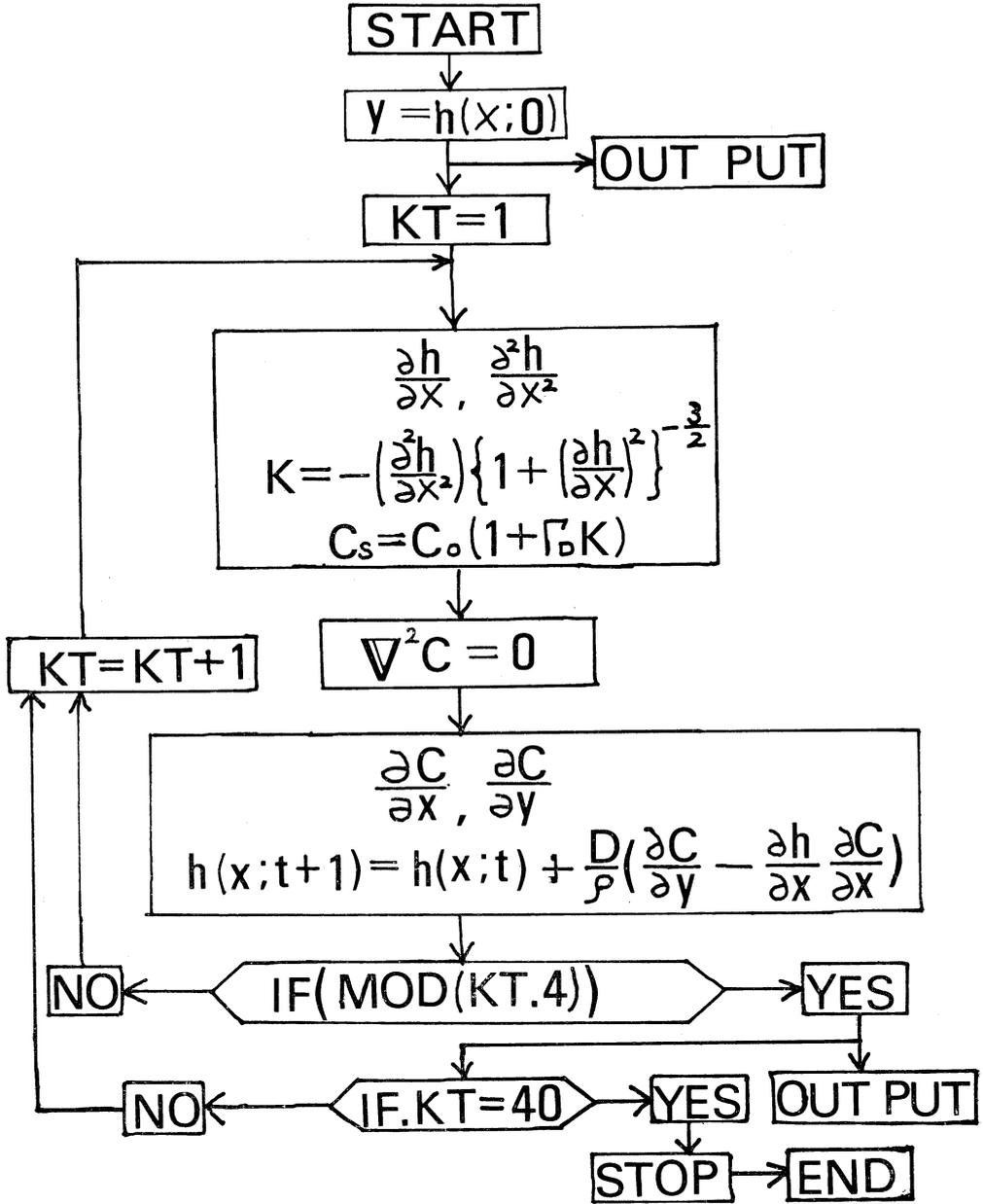
が成り立ち，(6) 式は氷晶表面では常に保存される．したがって，

$$\frac{df}{dt}=-\frac{\partial f}{\partial t}-u\frac{\partial f}{\partial x}+v\frac{\partial f}{\partial y}=0 \tag{7}$$

ただし， $u, v$  は (5) より

$$u=\frac{D}{\rho} \frac{\partial C}{\partial x} \tag{8}$$

$$v=\frac{D}{\rho} \frac{\partial C}{\partial y} \tag{9}$$



第4図 フローチャート

(6), (8), (9) を (7) に代入して整理すると,

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{D}{\rho} \left( \frac{\partial C}{\partial y} - \frac{\partial C}{\partial x} \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) \quad (10)$$

したがって  $\Delta t$  後の氷晶面は,

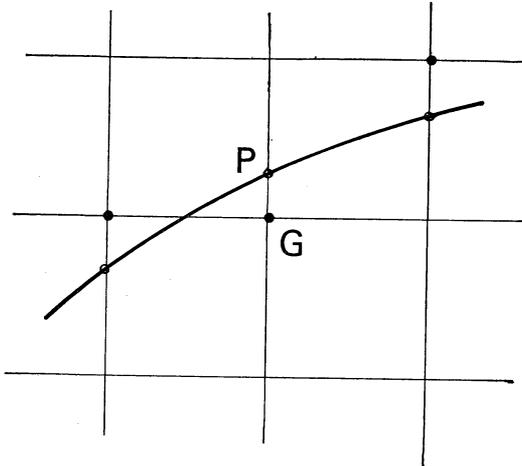
$$y = h(x; t + \Delta t) = h(x; t)$$

$$+ \frac{D}{\rho} \left( \frac{\partial C}{\partial y} - \frac{\partial C}{\partial x} \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) \Delta t \quad (11)$$

となる。

#### 4. 数値計算

計算順序としては、図4のように、まず氷晶の初期形



第5図 氷晶表面の取り扱い

- : 氷晶面の座標  $P(i, h_i)$
- : 最近接の格子点  $G(i, ju(i))$ . 点  $P$  での水蒸気濃度  $C_S(i)$  は, 格子点  $G$  にくり入れられる.

状を与え, (2) によりその形の凹凸に応じた曲率  $K$  を求め, (4) により氷晶と接する水蒸気濃度  $C_S$  を求め, これを境界条件としてラプラシアンで定まる水蒸気場  $C$  を求め, (5) により氷晶の成長速度  $v$  を求め, (11) により1ステップ後の氷晶の形を求め, 以下これを繰り返すという順序である.

氷晶表面の形を与える式,

$$y = h(x; t)$$

は,

$$y = h_i (i = 1, 2, \dots, 27)$$

で表わす.

格子間隔は1ミクロンとしたから, 1ミクロンを長さの単位として表現すると,

$$\left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)_i = \left(\frac{h_{i+1} - h_{i-1}}{2}\right)$$

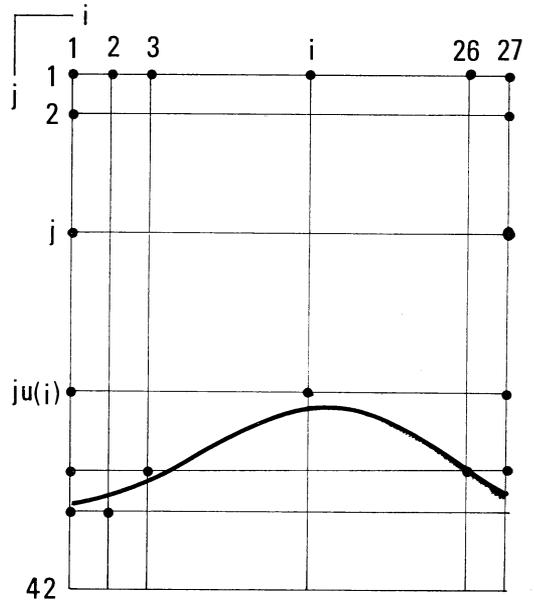
$$\left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}\right)_i = h_{i+1} + h_{i-1} - 2h_i$$

これを用いて, 氷晶表面  $(i, h_i)$  での水蒸気濃度  $C_S(i)$  を求めた.

氷晶表面の座標  $(i, h_i)$  は, 格子点上にあるとは限らないので, 水蒸気濃度をラプラシアンを解いて求める境界をあたえる場合に限り,

$$ju(i) = 42 - [h_i + 0.5]$$

[ ] : ガウス記号



第6図 ラプラシアンの緩和の境界. ●印の格子が境界となる.

によって, 図5のように, 氷晶面  $P$  の座標  $(i, h_i)$  を最近接の格子  $G$  の座標  $(i, ju(i))$  で代表させた.

ラプラシアンの緩和の境界は図6のようになり, 境界条件は次のようにとった. まず, 水と水蒸気の境界  $(i, 1)$  ( $i = 1, 2, \dots, 27$ ) での境界値としては,  $-15^\circ\text{C}$  の水飽和水蒸気濃度  $C_L \approx 1.14 \times 10^{-6} \text{ g/cm}^3$  を与えた. また, 氷晶と水蒸気の境界  $(i, ju(i))$  での境界値としては,  $-15^\circ\text{C}$  の氷飽和水蒸気濃度  $C_S(i)$  を与えた. なお,  $C_0 \approx 1.03 \times 10^{-6} \text{ g/cm}^3$  とした. モデルの左右両端の境界  $(1, j)$  ( $j = 1, 2, \dots, ju(1)$ ),  $(27, j)$  ( $j = 1, 2, \dots, ju(27)$ ) での境界値としては, それぞれ  $C_L$  と  $C_S(1)$ ,  $C_L$  と  $C_S(27)$  との  $j$  方向の線形補間で求めた.

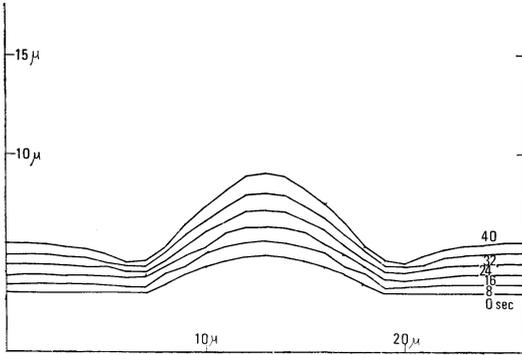
今回用いた緩和法は, S-O-R 法 (逐次加速緩和法) である. これは, 格子点  $(i, j)$  での  $C$  の値  $C_{i,j}$  を,

$$C_{i,j}^{(k+1)} = C_{i,j}^{(k)} + \frac{\omega}{4} (C_{i+1,j}^{(k)} + C_{i-1,j}^{(k)} + C_{i,j+1}^{(k)} + C_{i,j-1}^{(k)} - 4C_{i,j}^{(k)})$$

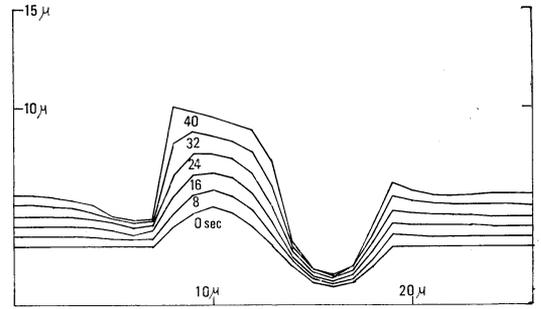
に従って逐次に修正していき ( $k$ : タイムステップ,  $\omega$ : 加速係数), あらかじめ与えた小さな値  $\epsilon$  に対して,

$$\sum_{i,j} |C_{i,j}^{(k+1)} - C_{i,j}^{(k)}| \leq \epsilon$$

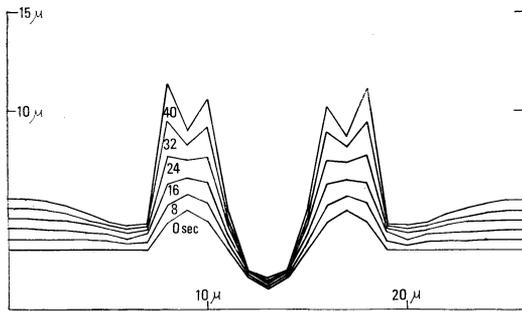
が成り立つようになったら, 収束したものとみて計算を打ち切るという方法である. 今回は  $\omega = 1.7$  とした.



第7図 正弦波波長24ミクロンの場合の計算結果



第8図 正弦波波長12ミクロンの場合の計算結果



第9図 正弦波波長8ミクロンの場合の計算結果

水蒸気濃度勾配  $\partial C/\partial x$ ,  $\partial C/\partial y$  については、次のように計算した。

$$\left(\frac{\partial C}{\partial y}\right)_i = C_{i, ju(i)-1} - C_{i, ju(i)}$$

$h_{i-1} < h_i < h_{i+1}$  のとき、

$$\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_i = C_{i, ju(i)} - C_{i-1, ju(i)}$$

$h_{i-1} < h_i > h_{i+1}$  のとき、

$$\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_i = -\frac{1}{2} \{C_{i+1, ju(i)} - C_{i-1, ju(i)}\}$$

$h_{i-1} > h_i > h_{i+1}$  のとき、

$$\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_i = C_{i+1, ju(i)} - C_{i, ju(i)}$$

$h_{i-1} \geq h_i \leq h_{i+1}$  のとき、

$$\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_i = 0$$

### 5. 計算結果

正弦波の波長24, 12, 8ミクロンについての40ステップまでの計算結果は、それぞれ、図7, 図8, 図9に示したように、安定な計算が得られた。

今後の問題としては、結晶学的異方性、熱効果を取り入れた2次元、3次元モデルが考えられる。

### 6. あとがき

この報告は、昭和45年度気象大学卒業研究を整理したものである。終始御指導いただいた駒林教授、数値計算についてのアドバイスをいただいた荒川博士に深く感謝致します。この計算には気象庁の HITAC 5020 F を使用しました。大滝俊夫博士をはじめ電計室の方々に深く感謝致します。

### 参考文献

- 1) Makoto Komabayasi, 1970: Shape instability of crystals of ice, carbon dioxide and ammonia grown in a cold chamber. J. Met. Soc. Japan, 48, 270~286.
- 2) Mullins, W.W. and R.F. Sekerka, 1963: Morphological stability of a particle growing by diffusion or heat flow. J. Appl. Phys, 34, 323~329.