

剛体粒子による渦のシミュレーション Simulating the Motion of Vortices using Hard Disk Particles

伊藤純至 Junshi ITO*, 島田尚 Takashi SIMADA and 伊藤伸泰 Nobuyasu ITO

東京大学工学系研究科物理工学専攻

Department of Applied Physics, School of Engineering, University of Tokyo

剛体粒子を利用した粘性流体のシミュレーションに関する研究を行った。このシミュレーションでは完全剛体を利用して Event-Driven 型アルゴリズムを用いている。まず流体の最も基本的な構成要素である渦の、粘性流体中での減衰をみた。また高いレイノルズ数でのシミュレーションを効率的に行う手法として、新たに回転自由度の導入したモデルを提案する。

分子動力学法 (MD) モデルによる流体シミュレーションが最近行われるようになってきている。例えば、カルマン渦¹⁻⁴、レイリー・ベナード対流^{5,6}、テイラー渦⁷、またその他の問題⁸⁻¹⁰などに利用されている例があり、このような流体の典型的な挙動について粒子モデルが適用できると結論付けている。そのような問題に対しては従来より有限差分法や有限要素法といった手法が広く利用されている。しかし、どの手法を利用したとしても離散化誤差を完全に無くすことはできないので、一部の問題については、それらが利用できないという場合もある。それを解決する手段として、根本的に流体を分子から構成し直してしまう手法が考えられる。MD によるシミュレーションの最大の利点は、メッシュを必要としないことにある。また支配方程式は流体方程式よりさらに一般的なニュートン方程式なので、通常、流体方程式が扱えない状況のシミュレーションも可能である。流体方程式それ自体が現象論的に導かれたものであることを考慮すれば、これは大きな利点である。また境界の設定がしやすいという利点もある。

この研究の目的は、ナビエストークス流の問題に対する MD モデルの有効性をさらに開拓することにある。そのためまず、単一渦糸の粘性流体中での減衰をみた。MD モデルのシミュレーション結果とナビエストークス方程式の解析解の比較を示し、さらに、高レイノルズ数の流体シミュレーションを効率よく行うための手法として、回転自由度の導入を提案する。

ここでは MD モデルの一つ一つの粒子を単一分子とするのではなく、流体要素と考えると、スケールにおいて現実的な問題との対応が付きやすい。MD モデルでの流体シミュレーション手法は以下ようになる。最初に、問題の初期条件となる、速度場のような物理量の場をもとめる。次にそれぞれの粒子に各座標での対応する場の物理量をもたせる。その初期配置から MD シミュレーションを実行する。そしてシミュレーション結果をいくつかの粒子について平均化し、マクロな物理量として取り出す、という手順である。

今回は二次元の剛体粒子による MD シミュレーションを行った。多くの剛体粒子 (二次元では剛体ディスクとした方がわかりやすい) が系の中に配置されており、真円で質量 1、半径を

*E-mail address: junshi@serow.t.u-tokyo.ac.jp

1 としている。粒子間の相互ポテンシャルは持っていない。数値計算においては Event-Driven 型 MD アルゴリズム^{11,12}が利用される。様々な MD モデルの中で、剛体粒子を特に用いる利点としては以下のような事項が挙げられる。場を空間に離散化した影響が、より長い距離での相互作用を持つモデルと比べて少なく、より少ない粒子数で流体の再現ができると考えられること、次にすべり境界やすべりなし境界といったよく流体力学的な記述で利用される境界条件の設定が簡単に真似ることが可能であり、また状態方程式が簡単になることである。

系は渦糸の減衰を見やすいよう意図したものを用いた。半径が R である円周境界を設定している。粒子が境界に触れたとき、粒子は境界と鉛直の速度を忘れ、温度 T でのマクスウェル分布に従う速度分布 $f(v)$ によって新たな速度が設定され反射される。 $f(v)$ は以下のようになり、

$$f(v_{\perp}) = \frac{1}{T} (2\pi T)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{v_{\perp}^2}{2T}\right) \quad (1)$$

$v_{\perp}$ は境界に対して鉛直方向の速度である。境界が接線方向速度をそのまま返す場合、境界はすべり境界に相当し、また接線方向速度が同様にマクスウェル分布で返される場合はすべりなし境界に相当する。

初期条件として、単一の渦糸が系の中心に配置されている。渦糸の速度分布は

$$u_{\phi} = \frac{\Gamma}{2\pi r}, \quad u_r = 0 \quad (2)$$

であり、 u_{ϕ} は動径方向の速度、 u_r は接線方向の速度、 r は動径、 Γ は渦糸の渦度である。二次元での渦点の記述によれば¹³、すべり境界は渦点の鏡像を作る。複素座標で z に位置する渦点の鏡像は、円周境界により R/z に作られる。ここで $z = 0$ での渦点の鏡像は無限遠に飛ぶので、この系では境界の影響は無視することができ、粘性により渦度があまり拡散しない時間の範囲内では無限遠中にある渦糸の減衰と対応させることができる。ナビエストークス方程式から、この状況での解析解を求めることができ、

$$u_{\phi} = \frac{\Gamma}{2\pi r} \left(1 - \exp\left(-\frac{r^2}{4\nu t}\right)\right) \quad (3)$$

となる。これはバーガー渦¹⁴として知られているものである。ここで ν は動粘性率である。

その他のパラメーターは以下のように定めた。系の半径 R は 200、粒子数 n は約 11000、体積密度 ρ は約 34% である。温度は局所的な速度の分散として定義している。粘性率は予め設定できるものではなく、粒子の挙動の結果から得られる。この系での動粘性率 ν は温度 T に対して

$$\nu \propto T^{1/2} \quad (4)$$

となると考えられる¹。そして渦度が 88 の渦糸を初期条件として系に配置し、各粒子の速度を与える。粒子の温度が低すぎると、 $u_{\phi} \propto 1/r$ の渦糸の速度分布により平均衝突時間の大きな差ができ、系の内側から外側に向かって衝撃波が走ってしまうので、衝突回数が少なくシミュレーションには有利となる極低温の設定はできない。ここでは温度 T を 1 としている。ただし渦糸中央部での非常に速い速度を設定するため、局所的に系の中心付近では温度を低くしているが、すぐに緩和し等温になる。この系は中心対称なので、マクロな物理量は各動径ごとに平均したものをを用いている。

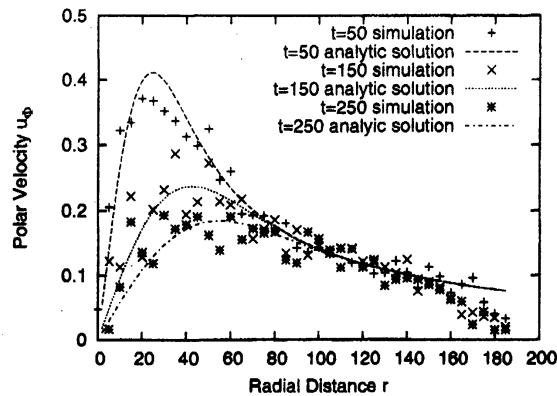


Fig. 1. 動径ごとに平均をとった渦の回転接線方向の速度のプロット。反時計回りを正としている。ドットが各時間 t でのシミュレーション結果。ただし 8 サンプルを平均している。曲線が対応する各時間での式 (3) による解析解。 ν を 2.4 としている。

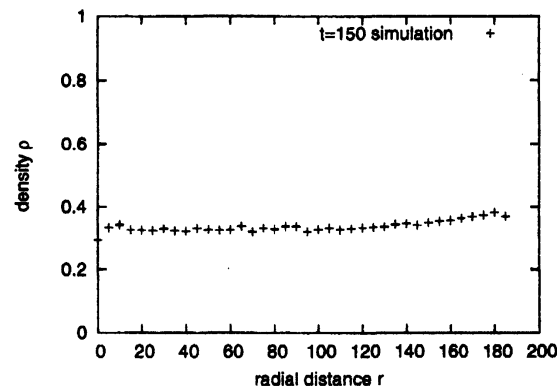


Fig. 2. 各動径ごとに平均した $t = 150$ での体積密度のプロット。

以上のような条件でシミュレーションを行った。Opeteron 2.2GHz プロセッサを用い、タイムステップ 0 から 250 までに 1.5 時間程度がかかる。

一方 ν を 2.4 として式 (3) のグラフを作成した。その結果、Fig. 1 のように、境界に近い部分を除いて、シミュレーション結果に解析解がうまくフィティングできることがわかった。また密度は $t = 150$ のとき、Fig. 2 のようになっている。他の時間でも同じようなプロファイルになっている。MD モデルは本質的に圧縮性だが、Fig. 2 によれば圧縮性はそれほど目立っていない。回転方向の速度の鋭いピークは大きなエネルギー散逸、つまり粘性散逸を引き起こし、温度の上昇につながる。式 (4) から、局所的に粘性率が上がって、速度場が鈍り、したがって $t = 50$ での系統的な誤差が発生したと考えられる。

MD モデルで粘性流体を扱う時には、様々なレイノルズ数の流体を扱う必要がある。レイノ

ルズ数 Re は以下のようにあらわされる。

$$Re = \frac{LU}{\nu} \quad (5)$$

ここで L は系の代表長、 U は系の代表速度である。もし大きな Re のシミュレーションを行いたい場合、計算コストは大きくなると一般的には考えられる。例えば L を大きくすることは直接的にそれを意味する。また U を大きくすることは温度の上昇を意味し、それが ν の上昇になってしまうので Re を大きくすることにつながらない。

一方、 ν のみを調整できれば、計算コストを大きくせずに Re を下げられる可能性がある。この MD モデルにおいて ν は温度と密度に依存する。しかし温度は U との関係から下げることができず（衝撃波が発生してしまう）、さらにここで用いている密度 $\rho \sim 34\%$ はすでに ν が最低となる密度の領域である。したがって現状のモデルでは ν は $T = 1$ で 2.4 より低くすることはできない。

これを克服するため、新たな自由度（回転と呼ぶ）を導入したモデルを導入した。従来のモデルは真円同士の衝突と並進運動のみで構成されるため、回転運動量が生じることはありえない。そこで回転自由度は恣意的なルールで導入する必要がある。この研究では最大限に一般性をもたせ、かつシンプルな新たな衝突モデルを導入した。回転運動量と並進運動量の交換は衝突の瞬間のみに生じさせるので、従来の Event-Driven 型アルゴリズムがやはり適用可能である。

衝突モデルの詳細は次のようになっている。

粒子 a と粒子 b の衝突を考える。ダッシュ付きの記号は衝突後の物理量であることを意味する。初めに、通常の弾性衝突を計算する。衝突前の速度ベクトル $\mathbf{v}_a$ と $\mathbf{v}_b$ は、衝突後 $\mathbf{v}_a'$ と $\mathbf{v}_b'$ になる。このステップで衝突による変位角 α_a と α_b を求めておく。

二番目に、回転と並進で交換する運動量 dw を決める。ここでは α に依存するよう、次のような関係式で決める。

$$dw = dw_0 \operatorname{sgn} \left(\frac{\pi}{2} - \frac{\alpha_a + \alpha_b}{2} \right) \sin \left(\frac{\alpha_a + \alpha_b}{2} \right), \quad (6)$$

ここで dw_0 はオフセットで 0.3 としている。

三番目に、もともと粒子がもっている回転運動量 ω_a と ω_b の符号によってスキームを分岐させる。 $\omega_a \omega_b > 0$ のときとそれ以外の場合である。前者で $\omega_a \geq \omega_b > 0$ として次のように処理する。

$$\omega_a' = \omega_a - |dw|, \quad \omega_b' = \omega_b + |dw| \quad \text{to} \quad dw = \frac{\omega_a + \omega_b}{2} \quad (7)$$

dw の上限が課されるので、ここで再設定している。この処理は平均をとる操作であることは明らかである。後者では、 $\omega_a \geq 0$ と $\omega_b \leq 0$ を仮定して、以下のような操作を行う。

$$\omega_a' = \omega_a + dw, \quad \omega_b' = \omega_b - dw. \quad (8)$$

これは式 (6) により回転を増減させる操作となっている式 (7) と式 (8) より両方の場合ともに角運動量は保存している。

衝突点を基準とする座標系で衝突法線方向の速度を $v_{\parallel}$ 、法線方向を $v_{\perp}$ として、運動量保存則を満たすには

$$v_{a\parallel} = v'_{a\parallel}, \quad v_{b\parallel} = v'_{b\parallel}, \quad (9)$$

$$v_{a\perp} + v_{b\perp} = v'_{a\perp} + v'_{b\perp}. \quad (10)$$

となる必要がある。ここで式 (10) において右辺の片方に任意の dv を加えて、片方から差し引くという操作が可能である。またエネルギー保存則は

$$v_{a\perp}^2 + v_{b\perp}^2 + \omega_a^2 + \omega_b^2 = v_{a\perp}'^2 + v_{b\perp}'^2 + \omega_a'^2 + \omega_b'^2 \quad (11)$$

を要求する。ここで粒子の慣性モーメントは1としている。もし dv を式 (11) での $d\omega$ の変位を打ち消すように設定すれば、この衝突は運動量則とエネルギー保存則をみたすようになる。よって最後にこの操作を行い、衝突後の速度を設定する。

さらに、 ω の符号が衝突の前後で変化するのは自然とは言えないので、三番目の過程で $d\omega$ が反転しないよう制限している。

このスキームは二番目の後者の場合に $(\alpha_a + \alpha_b)/2 = \pi/2$ のとき、大きなギャップが $d\omega$ に生じることなどを考慮すると若干の物理的不自然さはある。今回新しく作成したモデルが現実の回転を考慮したモデル¹⁵⁻¹⁷とどの程度対応するのかはまだ検討していない。

しかし例えば逆に $(\alpha_a + \alpha_b)/2 = 0$ の場合や、 $(\alpha_a + \alpha_b)/2 = \pi$ のときに運動量の交換が起こらないなど自然と思われる面もある。この新たな自由度を現実の回転と断言することはできないが、回転を真似た自由度で最も単純で一般的なモデルと言えるだろう。このモデルと現実の分子運動との対応は全く考慮していないので、モデル内の粒子を単一粒子とする考えるべきではない。粒子は仮想的な流体の構成要素とすべきである。そのため MD の用途は制限されるが、この研究の当初の用途は満たしている。

$d\omega$ という手で加えた物理量の存在により、位相空間の体積は衝突の前後では保存していない。したがってこのモデルは一種の散逸系となっている。局所平衡の成立などを保証するため位相空間の体積が保存することが望ましいが、ハミルトニアン $H(x_a, x_b, v_a, v_b)$ のヤコビ行列

$$\det |\Delta H| = 1, \quad (12)$$

を衝突前後で成立させるためには $d\omega = 0$ または $d\omega = \pm|\omega_a - \omega_b|$ としなければならない。これは並進運動量と回転運動量がカップリングしないことを意味するので、そのようなモデルは実現できない。

このスキームを採用し、先ほどの渦糸の減衰をみたシミュレーションと境界条件以外は同じ条件でのシミュレーションを行った。回転運動量は初期配置ではすべての粒子で0としていて、境界はすべりなしの境界としている。もはや境界の影響はこの時間スケールではあまりないと FFig. 1 より判断し、その場合、すべりなしの方が温度のコントロールが正確にできるためである。またこの境界では粒子が衝突した場合、回転運動量は0にしてしまう。

Fig. 3 と Fig. 4 は $t = 150$ でのシミュレーション結果である。Fig. 3 における回転の有無で比較すると、回転がある場合に大きなマクロな速度が観測されることから、動粘性率が下

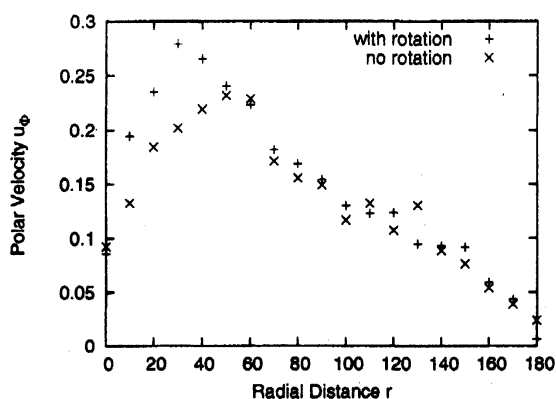


Fig. 3. $t = 150$ での渦の回転方向の速度のプロット。回転がある場合と、回転のない場合を比較している。回転のない場合は Fig.1 での結果と境界以外の条件は同一である。それぞれ 10 サンプルの平均をとった。

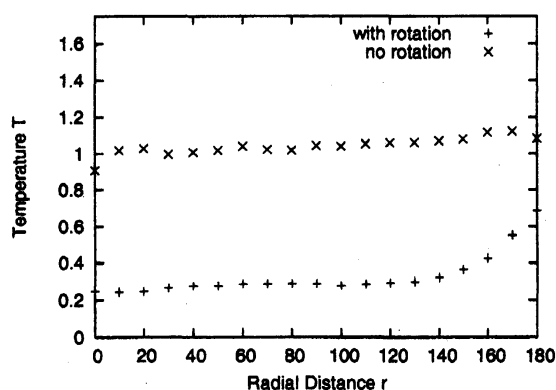


Fig. 4. $t = 150$ での温度のプロット。温度はそれぞれの動径ごとでの並進速度の分散で定義している。

がっているといえる。したがってこの方法により ν を下げることに成功した。これは Fig. 4 と式 (4) を考慮すればおそらく温度が低下したことによるものであり、 $T = 1$ に初期設定した温度は $t = 50$ までに $T = 0.25$ 周辺まで下がって、その後は Fig. 4 にみるようにその周辺に落ち着いて定常になっている。ここで温度の定義は前半の渦系の解析で利用したものと同一であり、回転自由度の分散は考慮していない。式 (6) の型や $d\omega_0$ の値が特徴となり定常状態での温度を決めると考えられる。

この結果によれば、そもそも回転を導入せずに低温で従来の MD シミュレーションを行った場合と大きな差はないかもしれない。しかし、この手法ではマクロな速度のスケールを変えずに熱運動のみを減衰させることができおり、温度を低下させるひとつのツールとはなりうる。例えば初期条件を変えずに様々なレイノルズ数の流れの比較をしたいといった場合に有用になるだろう。流体のシミュレーションへ実際に適用することを考えると、温度が下がってい

く過渡状態や、温度の不均一からもたらされる、密度のばらつきなどは扱いにくい問題となるかもしれないが、シミュレーションのサイズがより大きくなればこれらは無視できるだろう。

温度が下がることにより、計算コストに関してもうひとつの利点がある。このシミュレーションでは計算時間の多くは衝突粒子の検索にさかれるので、粒子衝突処理において、スキームの複雑化によって、多少時間がかかるようにはなるものの、やはり温度の低下によって計算時間の短縮が顕著にあらわれる。実際に $t = 0$ から $t = 150$ の計算コストを 30% 減らすことができた。この利点はより大きなサイズになればなるほど、有効となる。

一般的には新たな自由度の導入は、より大きな散逸を意味するので、粘性は大きくなると考えられる。しかしこの研究で示した事実はその反例となっている。これは動粘性率が特徴的に、温度に大きく依存し、また式 (6) で導入した運動量の交換のモデルが偶然温度の低下を大きくもたらすものだったからと考えられる。このモデルでは並進運動量の分散である熱運動の成分から多くの割合でモーメントを奪い、回転運動量に貯めている。

結論として、初めに単一の渦糸の粘性流体中での減衰を剛体粒子を用いた MD によって観測し、ナビエストークス方程式の解にうまくフィッティングできることがわかった。次に回転とみなせる新たな自由度を導入したモデルを構成した。このモデルは従来の MD モデルと比較して、いくつかの利点があることを確認した。特に高いレイノルズ数のシミュレーションがより容易になることから、MD モデルの乱流解析といった目的への応用の可能性を広げた。

References

- 1) T. Ishiwata, T. Murakami, S. Yukawa and N. Ito: *Int. J. Mod. Phys. C* **14** (2003) 1267.
- 2) D. C. Rapaport and E. Clementi: *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986) 695
- 3) D. C. Rapaport: *Phys. Rev. A*: **36** (1987) 3288
- 4) S. T. Cui and D. J. Evans: *Mol. Sim.* **9** (1992) 179
- 5) D. C. Rapaport: *Phys. Rev. Lett.* **60** (1988) 2480
- 6) A. Puhl, M. M. Mansour, and M. Mareschal: *Phys. Rev. A* **40** (1989) 1999
- 7) D. Hirshfeld and D. C. Rapaport: *Phys. Rev. E* **61** (2001) R21
- 8) J. Li, D. Liao, and S. Yip: *Phys Rev. E* **57** (1998) 7259
- 9) P. Jalali, M. Li, J. Ritvanen, and P. Sarkomaa: *Chaos* **13** (2003) 434
- 10) H. Okumura and D. M. Heyes: *Phys. Rev. E* **70** (2004) 061206
- 11) M. Isobe: *Int. J. Mod. Phys.* **10** (1999) 1281
- 12) M. Marín, D. Risso and P. Cordero: *J. Compt. Phys.* **109** (1993) 306.
- 13) Y. Yatuyanagi, Y. Kiwamoto, H. Tomita, M. M. Sano, T. Yoshida, and T. Ebisuzaki: *Phys.Rev.Lett.* **94** (2005) 054502
- 14) J. M. Burgers: *Adv. in Appl. Mech.* **1** (1948) 171
- 15) N. Mitarai, H. Hayakawa, and H. Nakanishi: *Phy. Rev. Lett.* **88** (2002) 174301
- 16) D. W. Condiff and J. S. Dahier: *Phys. Fluids.* **16** (1964) 842
- 17) A. C. Erigen: *J. Math. Mech.* **16** (1966) 1