

ダイレクト・シミュレーション・モンテカルロ法 におけるセル内角運動量の保存

齋藤 定*

Conservation of Angular Momentum in Direct Simulation Monte Carlo Method

by

Sadamu SAITO
NEC Corporation

ABSTRACT

A new inter-molecular collision scheme is proposed, which conserves angular momentum in a collision cell as well as momentum and kinetic energy. The scheme is composed of two stages of calculation. In a first or conventional stage, velocities of collision molecules are calculated according to the conservation law of momentum and kinetic energy. In the second stage, positions of the molecules are adjusted in order that the angular momentum is conserved.

1. はじめに

希薄流の数値シミュレーションは、航空宇宙技術分野においては、高度100km以上の希薄大気中を飛行する飛翔体の空力特性を求めるための手段としてその重要性が高まっている。一方、工業的にも製品の小型化、高集積化に伴い希薄流の数値シミュレーションの重要性が認識されはじめている。希薄流のシミュレーション手法としてはダイレクト・シミュレーション・モンテカルロ法が、現在最もよく使われているものである。

しかしながら、Meiberg (1986)はダイレクト・シミュレーション・モンテカルロ法において分子間衝突処理を行う空間セル内の角運動量が保存されないことがシミュレーション結果に悪い影響を与えているという指摘をしている。本稿では、ダ

イレクト・シミュレーション・モンテカルロ法の2分子間衝突処理アルゴリズムについてセル内の角運動量を保存する手法を新たに提唱する。

以下、§2では従来のダイレクト・シミュレーション・モンテカルロ法の2分子間衝突処理の部分で角運動量が保存しない理由について述べ、§3ではセル内角運動量を保存させるための手法を示し、最後にまとめを述べる。

2. 従来法におけるセル内角運動量の保存性

2.1 ダイレクト・シミュレーション・モンテカルロ法の概要

ダイレクト・シミュレーション・モンテカルロ法の計算処理を図1に示した(Bird, 1976)。取扱う空間はセルに分割され、この空間に多数のシミュレーション分子が配置される。シミュレーション分子間の衝突処理はセル毎に行われる。時間ス

* 日本電気株式会社

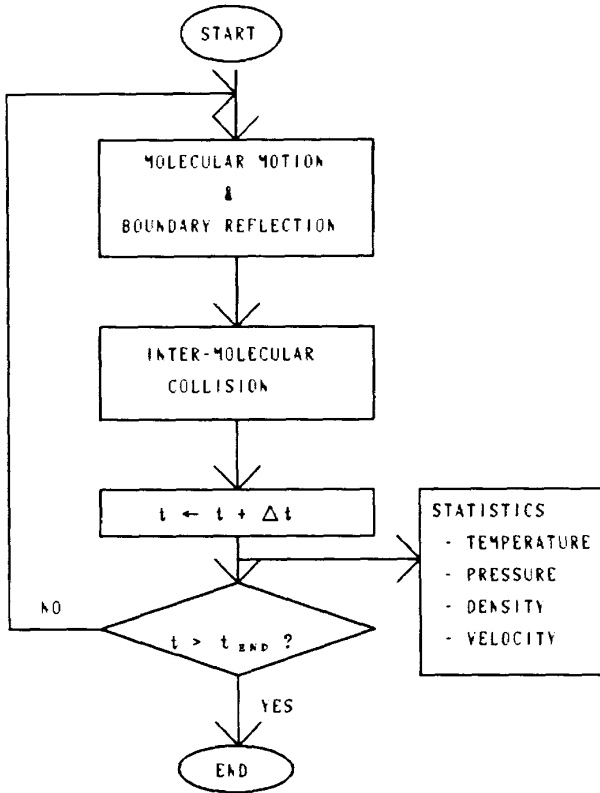


図1 計算処理の流れ図

ステップ Δt が分子の並進運動及び2分子間衝突の時間スケールに比べて十分小さければ、分子の並進運動と分子間衝突を分離して計算する取扱いが有効となる (Koura, 1970)。分子の並進運動と各セル内の2分子間衝突とを交互に繰り返すことにより時間が進められる。速度、温度、圧力及び密度は統計処理により求められる。

2.2 従来法における分子間衝突処理アルゴリズム

ダイレクト・シミュレーション・モンテカルロ法の計算処理は分子の並進運動処理とセル内の2分子間衝突処理とからなる。従来法においてセル内の角運動量が保存しなくなるのは分子間衝突処理の部分においてである。ここでは、従来の分子間衝突処理法について述べる。

セル状に分割された空間内に粒子が分布しており、このうちの一つのセル内に n 個の粒子 ($n \geq 2$) があるものとする。ここで、粒子モデルとして剛体球を仮定し、また、同一空間セル内にある2分子はその位置と関係なく、セル内の分子密度及び2分子間の相対速度により決められる一定の確率

で衝突をするものとする。同一セル内の分子 a (位置 \vec{r}_a , 速度 \vec{c}_a) 及び分子 b (\vec{r}_b, \vec{c}_b) の衝突後の速度をそれぞれ \vec{c}_a^* 及び \vec{c}_b^* とすると

運動量保存則

$$m_a \vec{c}_a + m_b \vec{c}_b = m_a \vec{c}_a^* + m_b \vec{c}_b^* \quad (1)$$

及び運動エネルギー保存則

$$m_a \vec{c}_a^2 + m_b \vec{c}_b^2 = m_a \vec{c}_a^{*2} + m_b \vec{c}_b^{*2} \quad (2)$$

より

$$\vec{c}_a^* = \vec{c}_m + \frac{m_b}{m_a + m_b} |\vec{c}_r| \cdot \vec{R} \quad (3.a)$$

$$\vec{c}_b^* = \vec{c}_m - \frac{m_a}{m_a + m_b} |\vec{c}_r| \cdot \vec{R} \quad (3.b)$$

と衝突後の分子 a 及び b の速度を求める。ここで、

$$\vec{c}_m = (m_a \vec{c}_a + m_b \vec{c}_b) / (m_a + m_b) \quad (4.a)$$

$$|\vec{c}_r| = |\vec{c}_a - \vec{c}_b| \quad (4.b)$$

また、 \vec{R} はランダム単位ベクトルを表す。

2分子の衝突前の全角運動量を \vec{L} とすると、一般に

$$\begin{aligned} L &= \vec{r}_a \times \vec{c}_a + \vec{r}_b \times \vec{c}_b \\ &= \vec{r}_a \times \vec{c}_a^* + \vec{r}_b \times \vec{c}_b^* + \delta \end{aligned} \quad (5)$$

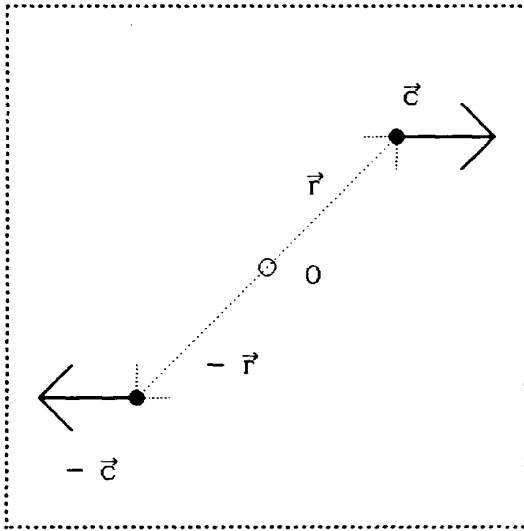
となる。ここで δ は衝突前の角運動量からのずれを表す。衝突の前後で角運動量が保存するためには $\delta = 0$ でなければならない。

2.3 従来法のセル内角運動量誤差の評価

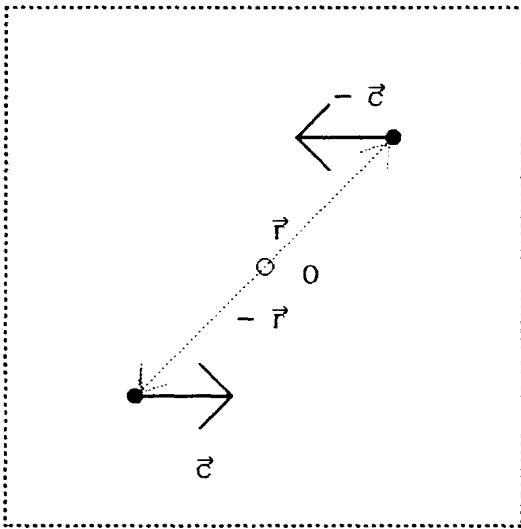
次に、従来法で一回の2分子間衝突処理により生じるセル内角運動量の誤差の大きさの見積りをしてみる。図2aに示されているように、同一のセル内にある同質量をもち、それぞれ衝突前の速度が \vec{c} 及び $-\vec{c}$ の2粒子が衝突して互いに速度を交換し図2bに示される速度になった場合を考える。2粒子はセルの中心 O について互いに対称な位置 $\vec{r}/2$ 及び $-\vec{r}/2$ にある。この時、衝突前及び衝突後の角運動量はそれぞれ $\vec{L}_{pre} = \vec{r} \times \vec{c}$ 及び $\vec{L}_{after} = -\vec{r} \times \vec{c}$ であるので、衝突処理前後の角運動量のずれの大きさは

$$|\Delta \vec{L}| = |2 \vec{r} \times \vec{c}| = 2 |\vec{r}| \cdot |\vec{c}|$$

となる。代表的な値として $|\vec{r}| = 0.06 \times 10^{-6}$ (m), $|\vec{c}| = 400$ (m/s) を用いると一回の衝突処理による角運動量のずれ $|\Delta \vec{L}|$ は 2.4×10^{-5} (m²/s) となる。



(a)



(b)

図2 同一セル内の2分子間衝突前[(a)]と衝突後[(b)]の分子の速度を示す図

3. セル内角運動量の保存

分子間衝突の前後でセル内の角運動量を保存するためには、従来法で考慮されていなかった角運動量の保存則を考慮する必要がある。従来法の運動量及び運動エネルギー保存則による分子間衝突処理(ステップI)の後に、セル内角運動量を保存させるために衝突分子の再配置処理(ステップII)を行うことによりセル内の運動量、運動エネルギー及び角運動量のすべてを保存させることができる。以下ではステップIIの処理の詳細について述べる。

いま複数の空間セルのうちで n 個 ($n \geq 2$) の分

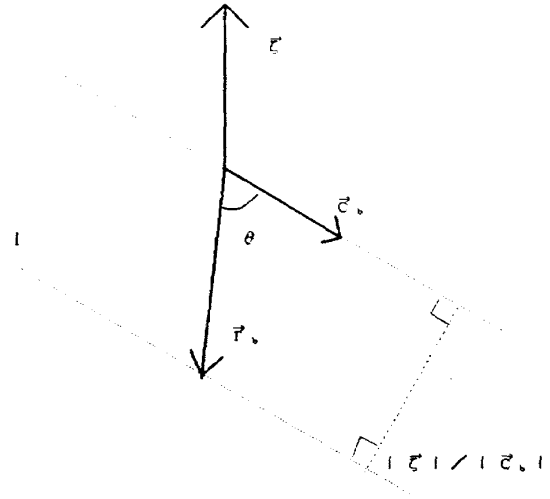


図3 2分子間衝突の角運動量保存則を説明する図

子を含む一つのセルに着目する。このセルの中の2分子 a 及び b が衝突し、式(1) (運動量保存則) 及び式(2) (運動エネルギー保存則) に基づいて行われるステップIの処理の後に2分子の速度 c_a^* 及び c_b^* が、それぞれ式(3.a)及び式(3.b)で与えられている。

ステップIIの処理は式(5)で $\delta = 0$, すなわち

$$\delta = \vec{L} - (\vec{r}_a^* \times \vec{c}_a^* + \vec{r}_b^* \times \vec{c}_b^*) = 0 \quad (6)$$

が満たされるように2分子の位置 \vec{r}_a 及び \vec{r}_b をそれぞれ \vec{r}_a^* 及び \vec{r}_b^* に再配置する。2分子のうち一つの位置の変更は行わず $\vec{r}_a^* = \vec{r}_a$ とし、もう一方の分子の位置 \vec{r}_b^* の与え方を示すこととする。

式(6)を書き改めて

$$\vec{r}_b^* \times \vec{c}_b^* = \vec{L} \quad (7)$$

ここで、 \vec{L} は

$$\vec{L} \equiv \vec{L} - \vec{r}_b \times \vec{c}_b$$

図3は式(7)の3つのベクトルの関係を示している。式(7)を満たす \vec{r}_b^* は、 \vec{L} と直交し \vec{c}_b^* を含む平面内にあり、 \vec{r}_b^* の終点は \vec{c}_b^* との距離が $|\vec{L}|/|\vec{c}_b^*|$ の直線1上の点の集合であり、 \vec{r}_b^* は一意的には決まらない。 \vec{r}_b^* の選択法としては、 \vec{r}_b^* を \vec{r}_b と同じセルにとどめ、同時に $|\vec{r}_b^* - \vec{r}_b|$ ができるだけ小さくなるよう選ぶのが望ましい。 \vec{r}_b の属するセル内の点の集合と直線1上の点の集合の共通部分が無い場合には \vec{r}_a^* を改めて設定し、 \vec{r}_b^* を求める手続きを再び繰り返せばよい。

4. まとめ

ダイレクト・シミュレーション・モンテカルロ法の2分子間衝突処理部分につき、運動量保存、運動エネルギー保存に加え、従来法では保存させることのできなかつた角運動量をも保存させることのできる手法を新たに提唱した。角運動量の保存は、運動量保存則及び運動エネルギー保存則に基づく従来の2分子間衝突計算処理の後に、衝突分子の再配置を行うことにより実現される。本手法の実際の数値シミュレーションにおける効果については今後調べる予定である。

引用文献

- Bird, G. A. : Molecular Gas Dynamics (Oxford University Press, London, (1976)).
Koura, K. : Phys. Fluids, **13**, 1457 (1970).
Meiburg, E. : Phys. Fluids, **29**, 3107 (1986).