モンテカルロ直接法の宇宙気体力学への応用

Application of Direct Simulation Monte Carlo method to Cosmic Gas Dynamics

○松田卓也、水谷広巳(神戸大理)

Takuya Matsuda and Hiromi Mizutani

Dept. of Earth and Planetary Sciences, Kobe University, Kobe 657-8501, Japan

Direct Simulation Monte Carlo Method (DSMC) developed to calculate rarefied gas dynamical problems is applied to continuous flow including shocks assuming that Knudsen number is sufficiently small. The method is applied to calculate spiral shocks in an accretion disc in a close binary system. It includes viscosity and thermal conduction automatically, and thus it can simulate turbulent viscosity. DSMC is superior than conventional SPH schemes with an ad hoc alpha viscosity.

1. 緒言

数値流体力学的手法には大きく分けて有限差分/体積法や有限要素法など、格子を使用する方法と、粒子法がある。粒子法は流体計算のための手法としてはあまり普及していない。しかし天体物理学では SPH 法とよばれる粒子法が広く利用されている。その利点は、プログラムが簡便なこと、真空を扱うことができることなど、天体物理学ではメリットもある。欠点としては、精度が低いこと、制御の難しい人工粘性があることである。

最近、Imaeda¹⁾は、SPH 法ではシアを持つ流れを扱うには大きな問題があることを指摘した。たとえば降着円盤の流れ場において、温度ゼロの場合の厳密解が 1 公転周期程度で急速に崩れていく。通常の SPH 法はこの欠点を逃れられない。彼らはその欠点を改善した手法を提案しているが、本来の簡便さが失われている。

本論文では、希薄気体の流れを解くために開発された Direct Simulation Monte Carlo (DSMC)法を、連続流体に適用し、とくに降着円盤の流れを解くために使うことを提案する。

2. Direct Simulation Monte Carlo Method (DSMC)

2.1 DSMCとは

Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) 法は、Bird²⁾により開発され、日本では南部^{3,4)}によって発展させられた手法である。この手法は本来は希薄気体の流れを計算するために開発された。

DSMC法では、衝突を含む個々の分子の運動を計算し、分子の適当な平均量から、流速、密度、温度などの流体の巨視的量を計算する。DSMCでは衝突を確率的に扱う。これがモンテカルロ法と呼ばれるゆえんである。DSMCの衝突モデルは、分子をいわばビリヤードボールのようなものと見なすことに対応している。

2.2 気体分子と計算格子

n 個の気体分子を考える。DSMCでは、計算に使用する分子は現実の分子1個を代表しているのではなく、遙かに多数の分子を代表している。

空間を格子で分割する。この計算格子は、差分法における格子とは異なり、その中の分子間のみには衝突が起きるとする、一種便宜的なものである。そのため格子サイズは分子の平均自由行程より小さく選ぶ必要があるが、計算精度に直接関係する量ではない。1セル内の分子数は、計算機の能力と精度の要求から10-100程度に選ぶ。

流体の巨視的量は次のように定義する。流速はセル内の分子の平均速度、密度は粒子数に粒子質量をかけたも

のである。個々の粒子速度から平均流速を引いたものが熱速度である。熱速度から温度を定義することができる。圧力は状態方程式から求まる。注意すべきことは、これらの巨視的量は計算の結果として求まるもので、差分法などと異なり、それが計算を支配することはない。計算はあくまで粒子の空間分布、速度分布を求めるもので、これが第一義的な変数である。

1セルの分子が10-100では、揺らぎの影響が大きい。そこで定常問題では時間平均、非定常問題ではアンサンブル平均を取ることがある。

2.3 時間発展

ある時刻における全分子の位置と速度が分かっているとす。次のタイムステップまで、分子は衝突なしに自由に飛行するとする。ただし外力はこの段階で考慮する。

1タイムステップの最後で、粒子間の衝突を考慮する。衝突は一つのセル内の粒子間でのみ起きると仮定する。系の平均自由行程から、分子間の全衝突数を計算し、それに応じて適当な数の分子対をえらび、その間の衝突確率を計算する。この段階のアルゴリズムが計算時間を大きく左右する。多数の粒子対を選び、低い衝突確率を仮定するよりは、小数の粒子数に大きな衝突確率を付与するのがよい。その手法が最大衝突数法である。その詳細はBird、南部の教科書を参照のこと。

分子対の衝突においては、粒子数と運動量の保存を仮定する。断熱的な場合はエネルギーも保存すると仮定する。冷却がある場合は非弾性衝突を考慮する手法と、全粒子からエネルギーを抜き去る方法を提案する。衝突後の方向は乱数的であるとする。

2.4 DSMCの利点・・・粘性の自動組み込み

先にも述べたように DSMC は、本来は希薄気体の流れを計算する手法として開発された。しかし分子の平均自由行程 λ が系の典型的長さ L より十分に短い極限を考えると、連続体に近づく。Knudsen 数を $Kn = \lambda/L$ と定義すると $Kn \ll 1$ の場合に連続流に帰着する。実際 $Kn < 0.1$ で十分に流体に近いと考えて良い。

DSMC は分子運動をそのまま解いているために、分子粘性や熱伝導が自動的に組み込まれている。動粘性係数を ν とすると、気体の平均自由行程理論から $\nu = \beta C \lambda$ の関係がある。ここで C は平均分子速度 (~音速) である。 β は理論では $1/3 - 1/2$ 程度である。DSMC では β は定数ではなく、自動的に計算される。これは降着円盤で有名な α 円盤モデルを想起させる。

3. DSMC の降着円盤流への適用

3.1 角運動量輸送と粘性係数

降着円盤ではガスが何らかの機構で角運動量を失って、中心星に降着する。角運動量損失の機構としてはいろいろ考えられている。降着円盤の標準モデル、 α 円盤モデルでは、降着円盤が乱流的であると仮定し、その動粘性係数を $\nu = \alpha Ch$ と仮定する。ここで α は適当な定数、 h は降着円盤の厚みとする。その理論では、乱流渦のサイズを h 程度、その速度を音速 C と仮定し、不定性をすべて α に押し込めるというものである。理論では α の値として場合に応じて 0.1-0.3、あるいは原始惑星系では遙かに小さな値を採用したりする。その意味で α モデルはきわめて融通無碍な便利なものであるが、現象論的なものである。 α 円盤モデルでは、動粘性係数の方向依存性などは入っていない。

いっぽう DSMC では、与えるべきパラメータは α でも β でもなく、Knudsen 数 Kn である。本計算では典型的な Knudsen 数を 0.01 とした。 Kn を決めると粘性は自動的に計算され、方向依存性も自動的に計算される。さらに乱流による熱伝導も自動的に入ってくる。これは 2次元のシミュレーションでは重要でないが、3次元のシミュレーションの場合、円盤内で発生した粘性発熱を、円盤の上下方向に逃がすことにより、輻射輸送による冷却の効果をシミュレートできるはずである。これは本研究では扱わない。

3.2 降着円盤のモデル

質量 M_1 の主星と M_2 の伴星が近接連星系をなしているとする。本計算では $M_1 = M_2$ とする。ガスは主星と伴星の間にあるラグランジュの L1 点から流入し、主星の周りを回る降着円盤を形成すると考える。計算領域は主星を囲み、ちょうど L1 点を含む領域とする。主星の中心を原点とすると ± 0.5 の領域である。本研究では空間 2次元の場合を考える。つまりガスは、公転面を挟む厚み一定の狭い板状の領域に限定されているとする。長さは連星間距離で、速度は公転速度で無次元化する。時間は 2π が 1 公転周期となるように選ぶ。

3.3 ガスの冷却

ガスは単原子分子であるので、比熱比 γ は $5/3$ となる。このままでは降着円盤のガスは主星にほとんど降着しない。L1 点から降着円盤に落下したガスは、ビリアル定理により、解放した重力エネルギーの半分は運動(回転)エネルギーとなり、半分は熱エネルギーになる。これらの量はだまかには回転速度と音速で現されるので、回転ガスのマッハ数は $M=1$ 程度にならざるを得ない。つまりきわめて熱い円盤になる。現実の降着円盤では、熱エネルギーは輻射として系から失われ、そのため円盤は冷却され、マッハ数は数 10 にものぼる。本研究では二種の冷却法を考えた。1) 非弾性衝突、2) 分子運動への抵抗、である。1) では、分子は非弾性衝突をすると仮定し、反発率 e をパラメータとする。計算では $e=0.9-0.99$ の範囲を考えた。2) では、タイムステップごとに、分子の熱運動速度を f 倍する。ここで $f=0.9-0.99$ の範囲を考えた。

3.4 初期・境界条件

初期条件としては、計算領域内に粒子は一つもないとした。L1 点からは毎ステップ 6 個の粒子が入ってくるとする。中心星は半径 0.02 の円とし、その内部に入った粒子は降着したとする。外部境界に達した粒子はすべて失われるとする。もっとも完全弾性の場合でなければ、外部に逃げる粒子はほとんどない。計算は十分に定常になるまで進める。

4. 計算結果

計算を開始すると L1 点から粒子が計算領域に流入し、まずはリング状の構造を作る。時間が進むとリングの内縁は中心星に達し、降着が始まる。興味深いことは、リングあるいは円盤に 1 対の渦状衝撃波が現れることである。この現象はすでに格子法の計算で示されていた。降着がおきるまでは粒子はリングに溜まる一方である。粒子数は 1セルあたり 10-15 になる。 e, f が小さいほど円盤は冷たくなり、粘性、渦状衝撃波による角運動量輸送の効率が低下するので、総粒子数は最大 15 万個にも達する。無次元時間が 20-30 (3-5 公転周期) たつと、一挙に降着が始まり粒子数は低下し、やがて L1 点からの粒子供給と降着が等しくなる定常状態に達する。

Fig.1 Time averaged density distribution in logarithmic scale for the case of $e=0.95$. Darker region in the accretion disc has higher density. The stream from the L1 point and a pair of spiral shocks is clearly seen.

図に計算例を示す。ここでは粒子間衝突における反発率を $e=0.95$ とした。計算は $t=70$ まで行った。 $t>35$ でほぼ定常状態に達したので、図はそれ以後の時間平均を示す。

一対の渦状衝撃波がきれいに見える。渦巻きの巻き方は比較的緩い。そのことはガスの温度が比較的高いことを示している。しかし非弾性衝突による冷却のため、衝撃波の背後では低温になり、マッハ数は 50 にも達する部分がある。

時間平均をとると見えなくなるが、粒子間に非弾性衝突を起こさせると、粒子はいわゆる Granular gas の状態となり、密度分布にむらが生じ、速度分布もマクスウエル分布からずれることが知られている。

引用文献

- 1) Y.Imaeda: Ph.D. thesis (University of Tokyo, 2001).
- 2) G.A.Bird: *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Oxford Science Publications, 1994).
- 3) 南部健一: 数値流体力学 (安原充, 大宮司久明編, 東京大学出版会, 1992) 287.
- 4) 南部健一: 原子・分子の流れ (日本機械学会編, 共立出版, 1996), 85.