

JAERI-Research

96-046



粒子法による熱伝導 - 対流遷移の研究

1996年9月

渡辺 正・蕪木英雄

日本原子力研究所
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。
入手の問い合わせは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-11 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越してください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-11 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, 319-11, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1996

編集兼発行 日本原子力研究所
印 刷 いばらき印刷(株)

粒子法による熱伝導-対流遷移の研究

日本原子力研究所 計算科学技術推進センター

渡辺 正・蕪木 英雄

(1996年8月1日受理)

代表的な粒子法である直接シミュレーションモンテカルロ法及び分子動力学法を用いてレイリー・ベナル系をシミュレートし、マクロな流れ場における熱伝導-対流遷移現象をマイクロレベルから考察した。

統計的手法である直接シミュレーションモンテカルロ法により得られた臨界レイリー数は、流体方程式の線形安定性解析により得られるものと一致し、マクロな流れの安定性が、マイクロレベルの粒子法により定量的に扱えることがわかった。また、熱伝導-対流遷移過程においては、温度や流速の変動量の相関が、明確な熱伝導及び対流状態におけるものより強くなっていることが明らかになった。

決定論的手法である分子動力学法により、熱伝導及び対流状態における原子運動をリアプノフ指数を用いて調べたところ、原子の大規模な秩序運動としての対流渦が流れ場に現れると、個々の原子のカオス運動は増加することが明らかとなった。

Study on Transition between Heat Conduction and Convection Using Particle Methods

Tadashi WATANABE and Hideo KABURAKI

Center for Promotion of Computational Science and Engineering
Japan Atomic Energy Research Institute
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received August 1, 1996)

The Rayleigh-Bénard system is simulated using the direct simulation Monte Carlo method and the molecular dynamics method, which are the representative particle methods, and the transition phenomena between heat conduction and convection is studied from the microscopic level.

The critical Rayleigh number obtained by the direct simulation Monte Carlo method, which is a statistical technique, agrees with that obtained by the linear stability analysis of hydrodynamic equations, and it is shown that the macroscopic flow instability can be studied quantitatively using the microscopic particle method. The correlations of fluctuations of temperature and velocity are found to grow at the transition in comparison with those at obvious conduction or convection states.

The motions of atoms are studied using the molecular dynamics method, which is a deterministic technique, in terms of Lyapunov exponents. It is found that the chaotic motions of atoms are increased when the convection rolls, which are large-scale ordered motions of atoms, appear in the flow field.

Keywords: Rayleigh-Bénard System, DSMC Method, Critical Rayleigh Number, Correlation, Molecular, Dynamics, Lyapunov Exponent, Chaos

目 次

| | |
|------------------------------------|----|
| 1. はじめに | 1 |
| 2. レイリー・ベナール系 | 1 |
| 3. 直接シミュレーションモンテカルロ (DSMC) 法 | 3 |
| 3.1 概 要 | 3 |
| 3.2 シミュレーション条件 | 4 |
| 3.3 熱伝導-対流遷移と臨界レイリー数 | 5 |
| 3.4 遷移過程における変動量の相関関数 | 7 |
| 3.5 DSMCシミュレーションのまとめ | 9 |
| 4. 分子動力学 (MD) 法 | 9 |
| 4.1 概 要 | 9 |
| 4.2 シミュレーション条件 | 10 |
| 4.3 熱伝導-対流遷移と流速の増加 | 10 |
| 4.4 原子のカオス運動 | 12 |
| 4.5 MDシミュレーションのまとめ | 14 |
| 5. まとめ | 14 |
| 参考文献 | 15 |

Contents

| | |
|---|----|
| 1. Introduction | 1 |
| 2. Rayleigh-Benard System | 1 |
| 3. Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) Method | 3 |
| 3.1 Outline | 3 |
| 3.2 Simulation Condition | 4 |
| 3.3 Transition between Heat Conduction and Convection, and Critical Rayleigh Number | 5 |
| 3.4 Correlation Function of Fluctuations at the Transition State | 7 |
| 3.5 Summary of DSMC Simulations | 9 |
| 4. Molecular Dynamics (MD) Method | 9 |
| 4.1 Outline | 9 |
| 4.2 Simulation Condition | 10 |
| 4.3 Transition between Heat Conduction and Convection, and Increase in Flow Velocity | 10 |
| 4.4 Chaotic Motion of Atoms | 12 |
| 4.5 Summary of MD Simulation | 14 |
| 5. Summary | 14 |
| References | 15 |

1. はじめに

日本原子力研究所計算科学技術推進センターでは、原子力分野で見られる複雑現象として、代表的な伝熱・流動現象をとりあげ、その基礎過程を計算機シミュレーションを通して解明する研究を進めている。

流動現象の解析は通常ナビエ-ストークス方程式に代表されるマクロな連続体の微分方程式を数値的に解くことによって行なわれている。しかしながら、混相流や多成分系の流動現象、あるいは複雑な流路内の流れなどの解析にあたっては、基礎方程式や数値解法に何らかの変更・仮定を施す必要があった [1]。

一方、流動現象は、多数の流体の原子・分子、あるいは流体の微小な塊としての流体粒子（流体要素）による集団的な運動であると考え、粒子の運動を追跡しその統計的な平均値として流れ場の温度、速度などの流動状態を求める粒子法と呼ばれる数値解法がある。粒子法には、ミクロなレベルで原子・分子の運動を扱う直接シミュレーションモンテカルロ法 [2] や、分子動力学法 [3]、メソスコピックないしはマクロなレベルで流体粒子を扱うセルラオートマタ系の手法 [4]、スムースパーティクル系の手法 [5] 等がある。これらの手法は、分子運動に起因する統計的な変動を平均的な流れ場と同時に求めたり、複雑な相の形状を記述するのに優れているが、逆に、変動の少ない定常的な流れ場を再現するためには統計平均数を多くする必要があり、一般に、多数の粒子が必要となる。近年、計算機の進展にともなって、多数の粒子を現実的な計算時間で扱うことが可能となってきており、今後、粒子法の様々な流動現象への適用が期待されている [6]。

本報告書では、温度差によって発生する自然対流現象の基礎研究として、レイリー・ベナール対流のミクロレベルの粒子法を用いたシミュレーションについて記述する。ここでは、ミクロレベルの代表的粒子法として、統計的な手法である直接シミュレーションモンテカルロ法と決定論的な手法である分子動力学法を用いた結果について述べる。

2. レイリー・ベナール系

代表的な非平衡熱流体系の一つに、上面が低温で下面が高温に保たれた流体の系、レイリー・ベナール系、がある。ここでは、上下の温度差がある臨界値よりも小さいと、系内に流れは発達せず熱伝導状態が実現されるが、上下の温度差が臨界値より大きいとマクロな対流渦が発生し、対流熱伝達状態が実現される。熱伝導から対流へ移行する遷移過程はレイリー・ベナール不安定性、対流状態はレイリー・ベナール対流として知られている。

レイリー・ベナール系における十分発達した対流状態については、実験的にも数値的にも多くの研究がなされており、Ahlers [7] や Cross と Hohenberg [8] により、詳しくレビューされている。最近では、分子動力学 (Molecular Dynamics:MD) 法や直接シミュレーションモンテカルロ (Direct Simulation Monte Carlo:DSMC) 法を用いて、マクロな対流渦を原子・分子の運動のレベルから構築する試みがなされている。これは、分子運動のレベルから調べることにより、マクロな流動現象の微視的な構造や発生機構が解明される可能性があるためである。

1. はじめに

日本原子力研究所計算科学技術推進センターでは、原子力分野で見られる複雑現象として、代表的な伝熱・流動現象をとりあげ、その基礎過程を計算機シミュレーションを通して解明する研究を進めている。

流動現象の解析は通常ナビエ-ストークス方程式に代表されるマクロな連続体の微分方程式を数値的に解くことによって行なわれている。しかしながら、混相流や多成分系の流動現象、あるいは複雑な流路内の流れなどの解析にあたっては、基礎方程式や数値解法に何らかの変更・仮定を施す必要があった [1]。

一方、流動現象は、多数の流体の原子・分子、あるいは流体の微小な塊としての流体粒子（流体要素）による集団的な運動であると考え、粒子の運動を追跡しその統計的な平均値として流れ場の温度、速度などの流動状態を求める粒子法と呼ばれる数値解法がある。粒子法には、ミクロなレベルで原子・分子の運動を扱う直接シミュレーションモンテカルロ法 [2] や、分子動力学法 [3]、メソスコピックないしはマクロなレベルで流体粒子を扱うセルラオートマタ系の手法 [4]、スムースパーティクル系の手法 [5] 等がある。これらの手法は、分子運動に起因する統計的な変動を平均的な流れ場と同時に求めたり、複雑な相の形状を記述するのに優れているが、逆に、変動の少ない定常的な流れ場を再現するためには統計平均数を多くする必要があり、一般に、多数の粒子が必要となる。近年、計算機の進展にもなっており、多数の粒子を現実的な計算時間で扱うことが可能となってきており、今後、粒子法の様々な流動現象への適用が期待されている [6]。

本報告書では、温度差によって発生する自然対流現象の基礎研究として、レイリー・ベナール対流のミクロレベルの粒子法を用いたシミュレーションについて記述する。ここでは、ミクロレベルの代表的粒子法として、統計的な手法である直接シミュレーションモンテカルロ法と決定論的な手法である分子動力学法を用いた結果について述べる。

2. レイリー・ベナール系

代表的な非平衡熱流体系の一つに、上面が低温で下面が高温に保たれた流体の系、レイリー・ベナール系、がある。ここでは、上下の温度差がある臨界値よりも小さいと、系内に流れは発達せず熱伝導状態が実現されるが、上下の温度差が臨界値より大きいとマクロな対流渦が発生し、対流熱伝達状態が実現される。熱伝導から対流へ移行する遷移過程はレイリー・ベナール不安定性、対流状態はレイリー・ベナール対流として知られている。

レイリー・ベナール系における十分発達した対流状態については、実験的にも数値的にも多くの研究がなされており、Ahlers [7] や Cross と Hohenberg [8] により、詳しくレビューされている。最近では、分子動力学 (Molecular Dynamics:MD) 法や直接シミュレーションモンテカルロ (Direct Simulation Monte Carlo:DSMC) 法を用いて、マクロな対流渦を原子・分子の運動のレベルから構築する試みがなされている。これは、分子運動のレベルから調べることにより、マクロな流動現象の微視的な構造や発生機構が解明される可能性があるためである。

レイリー・ベナル系のシミュレーションに DSMC 法を用いた例としては、まず、マクロな対流渦が Garcia により定性的にシミュレートされた [9]。このとき、Garcia は境界条件として、疑似滑り条件を用いていたため、壁面において反射粒子の速度分布は半面マックスウェル分布を満足していなかったが、その後、Stefanov と Cercignani は、拡散反射条件によるシミュレーションを行なった [10]。また、Garcia と Penland は、DSMC 法により得られた対流渦の速度分布をナビエ-ストークス方程式の数値解と比較した [11]。これらは、発達した対流渦に関するシミュレーションであり、熱伝導状態から対流状態への遷移過程や渦発生時の流れ場については、詳細な検討は行なわれていない。

MD 法を用いて対流渦をシミュレートした例としては、Mareschal と Kestemont [12]、Rapaport [13] がある。また、Mareschal 等 [14]、Puhl, Mansour と Mareschal [15]、Given と Clementi [16] は、対流渦内の状態について MD 法の結果とナビエ-ストークス方程式による結果とを比較した。これらの研究でも、マクロな対流渦が問題とされているだけで、遷移過程やミクロな原子・分子の運動などについては触れられていない。

メソスコピックな手法として、Posch, Hoover と Kum はレイリー・ベナル対流をスモースパティクル法でシミュレートし、ナビエ-ストークス方程式の計算結果と比較している [17, 18]。この手法は、グリッドを用いない偏微分方程式の数値解法の一つであり、ナビエ-ストークス方程式が表す連続体のメカニクスと MD 法が計算する原子・分子の運動を橋渡しする手法と見ることにもできる [19]。また、セルラオートマトン法による試みもあるが、温度差を表すためのモデル化、仮定が必要となっている [20]。

本報告書では、まず、統計的手法である DSMC 法により熱伝導から対流への遷移過程を、上下面の温度差を変えることにより系統的にシミュレートし、対流開始点の温度差に対応する臨界レイリー数を求める。これをマクロな流体方程式の線形安定性解析により得られる臨界レイリー数と比較することにより、ミクロレベルの DSMC 法でマクロな流れ場の遷移現象を計算することの妥当性を検討する [21]。また、臨界レイリー数に及ぼす境界条件の影響についても検討する [22]。

次に、流動遷移過程における流れ場の諸量の変動について調べる。非平衡な熱力学系における変動を調べる方法として、場の変数の空間相関関数を調べる方法がある。Nicolis と Mansour [23] はマスター方程式から相関関数を導出し、温度勾配を持つ流体中の熱伝導問題へ適用した。非平衡な定常状態においては、温度変動の空間相関が長距離相関であることが理論的に示された。その後、MD 法 [24] や DSMC 法 [25] を用いて熱伝導状態における長距離相関が観測され、温度変動の相関関数の非平衡成分は温度勾配の 2 乗に比例することが確認された。また、マクロな熱流体方程式の揺らぎとして相関関数を数値的に計算すると、DSMC 法によって得られる相関関数と一致することも示された [26]。これらの研究を通して、熱伝導状態における熱力学的諸量の変動成分については調べられてきたが、レイリー・ベナル不安定性における変動、あるいは相関関数については検討されていない。

そこで、本報告書では、DSMC 法を用いて、臨界レイリー数近傍の条件において、レイリー・ベナル不安定性として知られている遷移過程で、変動量や相関関数がどう変化するかを調べる [27, 28]。

次に、流れ場を構成する原子・分子の運動と、原子・分子の組織的な運動としての流れ場との

関係を考察する。ミクロな原子・分子の運動と、マクロな流れ場の関係を論じた研究はほとんど見られないが、非平衡非可逆過程の定常状態におけるミクロな現象は、MD法により調べられている。例えば、Evans [29] は内部エネルギー一定のせん断流れの原子運動を調べ、Holian, Hoover と Posch [30] 及び Hoover [31] は、温度勾配の中の熱の流れについて調べた。Posch と Hoover は、外力場における粒子系の乱雑さを調べるため、原子運動の乱雑さをリアプノフ指数で表しそのスペクトルを求め [32]、さらに、2次元と3次元の差、流体と固体の相違についても検討している [33]。また、系の大きさへのリアプノフ指数の依存性も議論している [34]。しかしながら、代表的非平衡非可逆過程であるレイリー・ベナール系における原子運動については、検討していない。

そこで、本報告書では、決定論的手法であるMD法を用いて熱伝導-対流遷移過程をシミュレートし、流れ場が熱伝導から対流状態へ移行する際の流体を構成する原子の運動を調べる [36]。ここでは、最大リアプノフ指数を簡易的に求め、原子運動のカオスの度合と、組織運動としての流体遷移との関係を検討する。

3. 直接シミュレーションモンテカルロ (DSMC) 法

3.1 概要

DSMC法は、希薄気体の流れを分子運動のレベルから計算するための手法としてBird [2] によって体系づけられた数値解法である。この方法では、計算領域にある気体の原子・分子を実際の数よりも少ない代表粒子で近似し、微小な時間間隔、すなわち計算の1タイムステップにおいて、粒子の移動および領域境界との相互作用が、粒子同士の衝突過程と分離することができるかと仮定して、それら代表粒子の挙動を追跡する。

DSMC法は、ボルツマン方程式

$$\frac{\partial (nf)}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial (nf)}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial (nf)}{\partial \mathbf{c}} = n^2 \int \int [f(\mathbf{c}')f(\zeta') - f(\mathbf{c})f(\zeta)](\zeta - \mathbf{c})\sigma d\Omega d\zeta \quad (3.1)$$

の速度分布関数 f を f から抽出したサンプルの集合を用いて計算する確率解法である。式(3.1)で n は粒子の数密度、 \mathbf{c} および ζ は速度、 \mathbf{F} は外力、 $'$ は衝突後の速度を表し、 $\sigma d\Omega$ は衝突の微分断面積である。式(3.1)は離散化により

$$(nf)^{t+\Delta t} = (1 - \Delta t D)(1 - \Delta t G)(1 + \Delta t J)(nf)^t \quad (3.2)$$

と書くことができる [1]。ここで、 D 、 G 、 J はそれぞれ、移動、外力、衝突を表す演算子である。

あるタイムステップで (nf) 、すなわち粒子の位置と速度がすべて解っているとすると、まず、式(3.2)の右辺に従い、粒子の衝突による粒子間の運動量変化を計算する。ここでは、計算領域

関係を考察する。ミクロな原子・分子の運動と、マクロな流れ場の関係を論じた研究はほとんど見られないが、非平衡非可逆過程の定常状態におけるミクロな現象は、MD法により調べられている。例えば、Evans [29] は内部エネルギー一定のせん断流れの原子運動を調べ、Holian, Hoover と Posch [30] 及び Hoover [31] は、温度勾配の中の熱の流れについて調べた。Posch と Hoover は、外力場における粒子系の乱雑さを調べるため、原子運動の乱雑さをリアプノフ指数で表しそのスペクトルを求め [32]、さらに、2次元と3次元の差、流体と固体の相違についても検討している [33]。また、系の大きさへのリアプノフ指数の依存性も議論している [34]。しかしながら、代表的非平衡非可逆過程であるレイリー・ベナール系における原子運動については、検討していない。

そこで、本報告書では、決定論的手法であるMD法を用いて熱伝導-対流遷移過程をシミュレートし、流れ場が熱伝導から対流状態へ移行する際の流体を構成する原子の運動を調べる [36]。ここでは、最大リアプノフ指数を簡易的に求め、原子運動のカオスの度合と、組織運動としての流体遷移との関係を検討する。

3. 直接シミュレーションモンテカルロ (DSMC) 法

3.1 概要

DSMC法は、希薄気体の流れを分子運動のレベルから計算するための手法として Bird [2] によって体系づけられた数値解法である。この方法では、計算領域にある気体の原子・分子を実際の数よりも少ない代表粒子で近似し、微小な時間間隔、すなわち計算の1タイムステップにおいて、粒子の移動および領域境界との相互作用が、粒子同士の衝突過程と分離することができるかと仮定して、それら代表粒子の挙動を追跡する。

DSMC法は、ボルツマン方程式

$$\frac{\partial (nf)}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial (nf)}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial (nf)}{\partial \mathbf{c}} = n^2 \int \int [f(\mathbf{c}')f(\mathbf{c}') - f(\mathbf{c})f(\mathbf{c})](\mathbf{c} - \mathbf{c})\sigma d\Omega d\zeta \quad (3.1)$$

の速度分布関数 f を f から抽出したサンプルの集合を用いて計算する確率解法である。式(3.1)で n は粒子の数密度、 \mathbf{c} および ζ は速度、 \mathbf{F} は外力、 $'$ は衝突後の速度を表し、 $\sigma d\Omega$ は衝突の微分断面積である。式(3.1)は離散化により

$$(nf)^{t+\Delta t} = (1 - \Delta t D)(1 - \Delta t G)(1 + \Delta t J)(nf)^t \quad (3.2)$$

と書くことができる [1]。ここで、 D 、 G 、 J はそれぞれ、移動、外力、衝突を表す演算子である。

あるタイムステップで (nf) 、すなわち粒子の位置と速度がすべて解っているとすると、まず、式(3.2)の右辺に従い、粒子の衝突による粒子間の運動量変化を計算する。ここでは、計算領域

を衝突セルと呼ばれる領域に分割し、その中で衝突を起こす粒子のペアを確率的に抽出する。それぞれの粒子について、衝突による速度変化を、運動量を保存させつつ計算する。この段階では、衝突ペアとして抽出された粒子の速度だけを更新し、空間的な位置の変化は計算しない。

次に、各粒子の速度に対して外力による影響を考慮し、最後に、得られた速度に応じて粒子を移動させ、新しい位置におく。その際、計算領域の境界を粒子が横切るときは、反射、吸収などの相互作用を考慮するが、粒子同士の衝突は考慮しない。この結果、式(3.2)左辺の1ステップ進んだ時間段階での (nf) が求まる。

このように、本解法は陽的解法であるため、通常、衝突セルの大きさおよびタイムステップは、それぞれ平均自由行程および平均自由時間よりも小さくする必要がある。なお、式(3.1)の右辺の衝突過程の計算法はいくつか提唱されているが、Birdの方法は運動量を保存させるため、厳密には式(3.1)そのものではなく、ボルツマン方程式に密接に関連したKac方程式に対するモンテカルロ直接法となっている[37]。

流れ場の温度や速度といったマクロな量は、個々の粒子の速度をサンプリングすることによって求める。サンプリングは、衝突セルをいくつかまとめたサンプリングセルと呼ばれる領域内の粒子について、数タイムステップにわたる時間平均、あるいは統計平均をとることにより行う。

3.2 シミュレーション条件

シミュレーション領域は、四辺を平坦な壁面で囲まれた幅 11.3mm、高さ 5.6mm の 2次元矩形領域である。アスペクト比は 2.016 である。粒子の衝突は 3次元的に計算し、3方向の速度成分を求めるようにしているが、粒子の移動については 2次元的に扱い、座標は 2方向のみを求めている。初期温度は上下面も含めて 80K とし、初期圧力は 20Pa とする。計算では、空気の間平均分子を想定した直径 3.7 Å、質量 $m = 4.8 \times 10^{-26}$ kg の剛体球分子を 32 万個用いる。領域の高さ L_y と平均自由行程 λ で定義されるクヌーセン数 $Kn = \lambda/L_y$ は、およそ 0.016 であり、本計算条件における流体はほぼ連続流体とみなすことができる。

この領域を 40×20 のサンプリングセルに分割し、一つのサンプリングセルを 5×5 の衝突セルに分割する。計算では、時間ゼロで上面温度は 80K に保ったまま底面の温度を 100K から 500K までの間のある所定の温度に設定し、粒子の過渡的な運動を計算する。タイムステップは平均自由時間の 0.9 倍とし、1ステップおきにサンプリングを行なう。

自然対流を起こす系を特徴づける無次元数としてレイリー数が用いられるが、ここでは、以下のように定義する。

$$Ra = \frac{\alpha \Delta T g L_y^3}{\nu \kappa} = \frac{256}{125\pi} \left(\frac{\Delta T}{T}\right)^2 \left(\frac{1}{Kn}\right)^2 \quad (3.3)$$

α , ΔT , T , g , ν , κ はそれぞれ、体積膨張率、上下面の温度差、平均温度、重力、動粘性係数、温度伝導率である。式(3.3)では、チャップマン-エンスコグの表示[38]、および上下の温度差による運動エネルギーと高さの差によるポテンシャルエネルギーを等しくおく仮定[9]、

$$k\Delta T = mgL_y \quad (3.4)$$

を用いている。 k はボルツマン定数である。重力に関するこの仮定は、熱伝導状態では系内の密度を一定に保つ役割を果たす [17]。なお、上下面の温度差に対応するレイリー数は 126 から 5341 の範囲となる。

境界条件は、上下面では拡散反射条件とし、反射粒子の速度成分はすべて壁面温度に対する半面マックスウェル分布から抽出する。左右面では、鏡面反射条件とし、境界面に垂直な速度成分は符号を変え、平行な速度成分は変化しないものとする。

3.3 熱伝導 - 対流遷移と臨界レイリー数

流れ場の発達の典型的な例として、レイリー数 4527 における速度場の発達を Fig.1 に示す。各々の図は、200 タイムステップにわたるサンプリングにより得られたもので、200 ステップ間の時間平均を表している。初期状態は、初期温度に対応するマックスウェル分布から抽出したランダムな速度分布であるが、下面の温度をステップ状に上昇させることにより過渡変化を開始するため、まず下面から上向き速度ベクトルが形成される (0-200 ステップ)。(ただし、計算開始直後には、急に全粒子に重力がかかることになるため、下向き速度ベクトルが見られる。) 速度場は、その後一見乱雑な状態となるが (200-400 ステップ)、その中から徐々に大きな流れが現れ (400-600 ステップ)、定常的な対流渦が発達する様子 (3000-3200 ステップ) が示されている。

対流に対応して温度場がどのように変化しているかを調べるため、領域の上下面の中間の高さでの温度の時間変化を Fig.2 に示す。Fig.2 では、領域中央 (Fig.1 の 2 つの対流渦の間の下降流の中心) での平均温度と左右境界近傍 (対流渦の両側の上昇流の中心) での平均温度、および、水平面内平均温度を示してある。なお、温度は、下面で 1.0、上面で 0.0 となるように規格化してある。Fig.1 の過渡変化開始直後の上昇流と、それに続くランダムな速度分布に対応して、400 ステップまでは、水平方向に均一に温度が上昇し、マクロな流れの発達の開始にともなって 600 ステップ頃から水平方向に温度差が生じているのがわかる。中央部分では対流による下降流のため平均値よりも温度は低下し、左右境界近傍では、上昇流のため温度が上昇している。2500 ステップ以降、ほぼ定常な温度場となっているが、これは Fig.1 の定常な速度場に対応したもので、25000 ステップ以降も安定に保たれた。

安定な対流渦が形成された後の温度、および密度分布を Fig.3 に示す。密度は初期値で規格化してある。高温で低密度な領域は下面から上面に向かって上昇流に沿って広がっており、低温で高密度な領域は、上面から下面に向かって下降流に沿って広がっている。レイリー・ベナール対流の特徴が分子運動のレベルから良くとらえられていることがわかる。

完全に熱伝導状態にある流れ場の速度分布と温度分布を Fig.4 に示す。レイリー数は 1507 である。Fig.4 はシミュレーションの 11700 ステップから 12600 ステップまでの 900 ステップ間の平均値である。局所的な流れは見られるものの、安定で大きな対流渦は現れておらず、また、温度分布が上下の壁にほぼ平行となっており、安定な熱伝導状態であることがわかる。

十分定常な流れ場が発達した後、シミュレーション領域の中央部分と左右の壁近傍での垂直方向温度分布を Fig.5, 6 にそれぞれ示す。レイリー数が 1870 までは、上下の壁の間ではほぼ線形の温度勾配となり、しかも中央部分と壁近傍で差の少ない、熱伝導的な温度分布となっていることがわかる。しかし、領域中間の高さ付近では、やや高温側にずれている。これは、上面近傍

の低温側に比べ、下面近傍の高温側で気体の熱伝導率が高く、温度勾配が緩やかになるためと考えられる。温度分布は、レイリー数 3414 以上のケースでは、対流渦の発達のため、中央部の下降流のところでは低温側に、また、壁近傍の上昇流のところでは高温側にひずんでいるのが見られる。また、上下壁近傍では、若干の温度ジャンプが見られる。これは、希薄気体の流れ場特有の現象であるが、本シミュレーションの条件では、クヌーセン数は 0.016 と連続流体の領域にはいっており、温度ジャンプは非常に小さく、後述するように、無視し得る大きさとなっている。

速度場の定量的な違いを調べるため、上下面のほぼ中間の高さ ($y=0.5$) での垂直方向の速度成分を Fig.7 に、また左側境界から領域の幅 $3/4$ の位置 ($x=0.75$) での水平方向速度成分を Fig.8 に示す。いずれも、レイリー数が 1870 以下ではほぼ流速ゼロであり、3414, 4527 のケースで対流の上昇流、下降流、および上下面に沿う流れの発達が見られる。なお、Fig.7 からは、左右境界で用いた鏡面反射条件がマクロな流体の壁面における滑り条件に対応し、Fig.8 からは、上下境界で用いた拡散反射条件が滑りなしの条件にほぼ対応していることがわかる。

定常状態における上下面の中間の高さでの温度をレイリー数に対して示したのが Fig.9 である。Fig.9 では、Fig.2 と同じく上下面の中間の高さにおける中央部分 (下降流の中心) の平均温度、左右境界近傍 (上昇流の中心) での平均温度、および水平面内平均温度を示してある。図中の点はそれぞれ定常状態における約 1000 ステップ間の平均値であるが、Fig.2 に示される程度の変動を含んでおり、レイリー数の小さいケースではほぼ均一の温度分布と考えられる。マクロな流体方程式の線形安定性解析からは臨界レイリー数は $Ra_c = 1708$ と得られるが [39]、ほぼこの値を境として温度分布に分岐が生じていることが解る。すなわち、分子運動のレベルの計算から得られる臨界レイリー数は、連続体としての扱いから得られた臨界レイリー数とほぼ一致することが確認できる。ただし、臨界レイリー数付近では、Fig.5～8 に示されていたようにマクロな流れ場は熱伝導状態に近くっており、臨界レイリー数を越えても温度分布はまだ上下面にほぼ平行となっている。なお、シミュレーション領域のアスペクト比 2.016 は、臨界レイリー数に対応する波長に合わせたものである [39]。

ここで、境界条件について検討しておく。これまでの結果は、すべて、上下の壁での境界条件として、拡散反射条件を採用していた。比較を行なった流体方程式の線形安定性解析では、壁面で滑りなしの条件を採用しており、Fig.8, 9 の結果から、DSMC 法の拡散境界条件と流体方程式の滑りなし境界条件が対応していることが確認できる。一方、粒子法では、疑似滑り境界条件が用いられることがある [9, 25]。これは、壁に衝突した粒子について、垂直方向速度成分については壁の温度に対応する半面マックスウエル分布から抽出するものの、水平方向速度成分については、変化させないというものである。このため、温度指定壁での拡散反射条件と断熱壁での滑り条件の中間的なものとなるが、反射粒子の速度分布は、壁の温度に対応する半面マックスウエル分布を満足していない。疑似滑り条件は流体方程式の滑り条件に対応すると考えると、臨界レイリー数が滑りなし条件の場合よりも小さくなるため、対流渦が早く現れ、粒子法の数値計算上有利である、との理由で用いられてきたものである。

疑似滑り条件による速度場の発達の一例を Fig.10 に示す。これはレイリー数 1507 のケースである。流体方程式の線形安定性解析において、滑り壁の条件を用いると、臨界レイリー数は 658 となり [39]、Fig.10 では、対流渦の発達が見られる。なお、臨界レイリー数に対応する波長に合わせるため、ここではアスペクト比を 2.828 としている。Fig.10 では、始め三つの渦

が形成されるが、時間とともに、安定な双子渦に落ちついていく様子が見られる。このように疑似滑り条件を用いると、拡散反射条件に比べて、定常状態に落ち着くまでに時間がかかるようになる。Fig.11には、レイリー数1226のケースでの領域中間の高さの温度変化を示す。ここでは、Fig.10のケースよりも臨界レイリー数に近いため、定常状態の温度分布になるまでに、さらに計算時間を必要としている。拡散境界条件のFig.5, 6に対応する温度分布をFig.12, 13に示す。レイリー数1226以上で温度分布は大きく変形し、対流渦が発生していることがわかる。また、上下壁面近傍での温度ジャンプが、Fig.5, 6に比べ大きく、無視できなくなっていることがわかる。Fig.7, 8に対応する速度分布は、Fig.14, 15に示す。水平垂直いずれの方向にも、壁に平行な速度成分は、流体方程式の滑り条件に対応したものと見ることができる。

定常状態における上下面の間の高さでの温度分布をFig.16に示す。レイリー数1000付近に温度分布の分岐開始が見られるが、線形安定性解析による理論的な臨界レイリー数は、658であり、かなりずれたものとなっている。この原因は、Fig.12, 13に現れていた大きな温度ジャンプと考えられる。すなわち、壁近傍での温度ジャンプが大きく、実際に計算された領域の上下の温度が、指定した壁の温度から、かなり外れているということである。このため、式(3.3)中の温度差 ΔT が小さくなっており、レイリー数も予定のものよりは小さくなっている。そこで、温度ジャンプを差し引いた温度差と領域高さを用いて式(3.3)を評価し直してみる。再評価したレイリー数に対して温度分布をプロットした結果をFig.17, 18に示す。Fig.17は拡散反射条件の場合であり、Fig.18は疑似滑り条件の場合である。横軸は、臨界レイリー数近傍の差を拡大するため、臨界値との相対的な差 $(Ra - Ra_c)/Ra_c$ で示してある。いずれの図も、温度ジャンプの修正前と修正後の温度を示してある。Fig.5, 6に示されるように、拡散反射条件を使用した場合は温度ジャンプは小さく、これを考慮してレイリー数を修正してもほとんど差が見られないことが、Fig.17からわかる。臨界レイリー数以上での温度分布の分岐も影響は受けていない。これに対して、疑似滑り条件の場合は、Fig.12, 13に示されるように温度ジャンプの影響は大きく、Fig.18では、温度分岐開始がかなり臨界レイリー数に近付いているのがわかる。このように、疑似滑り条件の場合でも、計算結果を用いて修正したレイリー数を使用することにより、理論値との一致は良好なものとなる。しかしながら、定常状態が得られるまでレイリー数がわからず、また、壁面近傍での速度分布が半面マックスウェル分布を満たさないこと、さらに、定常状態に至るまでの計算時間が増加することなどを考慮すると、疑似滑り条件は有効な計算条件とは言えないことがわかる。以下では、拡散反射条件のみを使用する。

3.4 遷移過程における変動量の相関関数

ここまでで、DSMC法により求めた臨界レイリー数が巨視的な流体方程式から得られる理論値と定量的に一致することが確認できた。ここでは、臨界レイリー数近傍での流れ場の挙動、特に熱伝導状態から対流へ移行する際の、場の変数の変動量の変化について詳細に調べる。レイリー・ベナル系は上下に温度勾配を持つ非平衡系であるため、場の変数 W の定常状態における時間平均値からのずれ

$$\delta W(x, y) = W(x, y) - \langle W(x, y) \rangle \quad (3.5)$$

をその変動量として定義する。ここで、 $\langle \rangle$ は時間平均、 δ は変動量を示す。W は温度や速度などを表す。この変動量に関して高さ方向の2地点、 y と y' における空間相関関数を

$$\langle \delta W(y)\delta W(y') \rangle = \frac{1}{L_x} \int_0^{L_x} \langle \delta W(x,y)\delta W(x,y') \rangle dx \quad (3.6)$$

とし、水平方向の平均値により与えることとする。 L_x は領域の幅である。この相関関数は、2つの高さの間での変動量の相関の強さを示す尺度となる。

上下面のほぼ中間の高さ ($y' = 0.525$) を基準とした相関関数の垂直方向の変化を Fig.19, 20 に示す。Fig.19 は垂直方向速度変動の相関関数、Fig.20 は温度変動の相関関数である。レイリー数が小さく系が熱伝導状態であっても相関関数は広がっており、相関が局所的なものではないことが示されているが、これは、非平衡な系の特徴である [23]。図からわかるように、この長距離相関はレイリー数の増加とともに強まり、臨界レイリー数付近から急激に成長する。Fig.5~8に見られたように、臨界レイリー数近傍では、マクロな流れ場はまだ熱伝導状態に近いものを示しているが、変動量の相関はすでに強まっており、対流状態への移行が始まっていることがわかる。

Fig.19, 20 に示された相関関数のレイリー数に関する変化を調べるために、式(3.6)を高さ方向に積分した量

$$\langle \langle \delta W(y') \rangle \rangle = \frac{1}{L_y} \int_0^{L_y} \langle \delta W(y)\delta W(y') \rangle dy \quad (3.7)$$

をレイリー数に対して示したのが Fig.21, 22 である。これは、系全体での温度相関の強さを表す尺度と考えられる。Fig.19, 20 と同様、臨界レイリー数付近で急激に系内の変動量の相関が強まり、巨視的な対流渦が発達するということがわかる。言い換えれば、相関が急激に強まることが対流状態の開始であり、この開始点を与えるのが臨界レイリー数であると考えることができる。

ここで、相関関数の特性距離を

$$\begin{aligned} \langle \langle \langle \delta W \rangle \rangle \rangle &= \frac{1}{L_y} \int_0^{L_y} \frac{\langle \langle \delta W(y') \rangle \rangle}{\langle \delta W(y')\delta W(y') \rangle} dy' \\ &= \frac{1}{L_y^2} \int_0^{L_y} \int_0^{L_y} \frac{\langle \delta W(y)\delta W(y') \rangle}{\langle \delta W(y')\delta W(y') \rangle} dy dy' \end{aligned} \quad (3.8)$$

で定義する。これは変動の影響が及ぶ範囲を自己相関に対して相対的に示す尺度となる。この特性距離を、平均自由行程を基準として、速度変動に対するものを Fig.23, 温度変動に対するものを Fig.24 に示す。温度変動の相関についての特性距離を見ると、レイリー数が小さい熱伝導状態では平均自由行程の6倍程度であるのに対し、臨界レイリー数付近で対流の性質が現れ

ると増加し、平均自由行程の9倍程度まで大きくなっているのがわかる。これは、本計算に用いたセル分割では、熱伝導状態での変動の影響はサンプリングセルの2セル分（衝突セルで10セル分）の距離まで及んでいたのに対し、熱伝導-対流遷移過程では、最大、サンプリングセルの3セル分（衝突セルでは15セル分）にまで及ぶことを示している。しかしながら、Fig.21, 22とは異なり、レイリー数が大きくなると特性距離は減少している。すなわち、変動量の相関自体はFig.21, 22に見られるように、対流によって系全体で強まるものの、その影響の及ぶ範囲はFig.23, 24に示されたように、臨界レイリー数付近の熱伝導-対流遷移過程でのみ相対的に大きくなっている。

3.5 DSMC シミュレーションのまとめ

本章では、DSMC法を用いて、レイリー・ベナル不安定性として知られる熱伝導-対流遷移過程を分子運動のレベルからシミュレートした結果を示した。対流状態への遷移開始を示す臨界レイリー数は、マクロな流体方程式から得られる値とほぼ一致し、臨界レイリー数近傍の遷移過程では、流れ場が熱伝導状態を示しているにもかかわらず、変動量の空間相関はすでに強まっていることがわかった。また、変動量の及ぶ範囲を相対的に示す特性距離は、安定な熱伝導状態あるいは対流状態では小さく、遷移過程においてのみ大きくなることが明らかとなった。

4. 分子動力学 (MD) 法

4.1 概要

MD法では、系を構成する原子・分子についてニュートンの運動方程式を立て、これを計算する。N個の質量mの粒子で系内が満たされているものとして、粒子iの受ける力を \mathbf{F}_i とすると、運動方程式は

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}_i}{m}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.1)$$

と書ける。 \mathbf{r}_i は粒子の位置とする。アルゴンなどの電氣的に中性で球状の原子どうしに働く原子間力は中心力で表され、原子間の距離がrのとき、ポテンシャルエネルギー

$$\phi_{LJ}(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad (4.2)$$

によって精度良く表される。これは、レナード-ジョーンズポテンシャルと呼ばれる形式で、 ϵ と σ はそれぞれエネルギー及び長さの次元を持つ。12乗の項は原子が接近した時の斥力を表し、6乗の項は引力を表している。このポテンシャルを用いて、j粒子がi粒子に及ぼす力 \mathbf{F}_{ij} は、

$$\mathbf{F}_{ij} = -\nabla_i \phi_{LJ}(r_{ij}) \quad (4.3)$$

ると増加し、平均自由行程の9倍程度まで大きくなっているのがわかる。これは、本計算に用いたセル分割では、熱伝導状態での変動の影響はサンプリングセルの2セル分（衝突セルで10セル分）の距離まで及んでいたのに対し、熱伝導-対流遷移過程では、最大、サンプリングセルの3セル分（衝突セルでは15セル分）にまで及ぶことを示している。しかしながら、Fig.21, 22とは異なり、レイリー数が大きくなると特性距離は減少している。すなわち、変動量の相関自体はFig.21, 22に見られるように、対流によって系全体で強まるものの、その影響の及ぶ範囲はFig.23, 24に示されたように、臨界レイリー数付近の熱伝導-対流遷移過程でのみ相対的に大きくなっている。

3.5 DSMC シミュレーションのまとめ

本章では、DSMC法を用いて、レイリー・ベナール不安定性として知られる熱伝導-対流遷移過程を分子運動のレベルからシミュレートした結果を示した。対流状態への遷移開始を示す臨界レイリー数は、マクロな流体方程式から得られる値とほぼ一致し、臨界レイリー数近傍の遷移過程では、流れ場が熱伝導状態を示しているにもかかわらず、変動量の空間相関はすでに強まっていることがわかった。また、変動量の及ぶ範囲を相対的に示す特性距離は、安定な熱伝導状態あるいは対流状態では小さく、遷移過程においてのみ大きくなることが明らかとなった。

4. 分子動力学 (MD) 法

4.1 概要

MD法では、系を構成する原子・分子についてニュートンの運動方程式を立て、これを計算する。N個の質量mの粒子で系内が満たされているものとして、粒子iの受ける力を \mathbf{F}_i とすると、運動方程式は

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}_i}{m}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4.1)$$

と書ける。 \mathbf{r}_i は粒子の位置とする。アルゴンなどの電氣的に中性で球状の原子どうしに働く原子間力は中心力で表され、原子間の距離がrのとき、ポテンシャルエネルギー

$$\phi_{LJ}(r) = 4\epsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad (4.2)$$

によって精度良く表される。これは、レナード-ジョーンズポテンシャルと呼ばれる形式で、 ϵ と σ はそれぞれエネルギー及び長さの次元を持つ。12乗の項は原子が接近した時の斥力を表し、6乗の項は引力を表している。このポテンシャルを用いて、j粒子がi粒子に及ぼす力 \mathbf{F}_{ij} は、

$$\mathbf{F}_{ij} = -\nabla_i \phi_{LJ}(r_{ij}) \quad (4.3)$$

と求められる。i 粒子に働く力は、系内の全粒子からの寄与を足し算することにより求まるが、ある距離以上離れた粒子から働く力はほとんどゼロとなるため、計算精度と計算時間のかねあいで、通常、 $2.5 \sim 3.5\sigma$ 程度までの距離にある粒子の影響だけを考慮する [3]。

ある粒子について、他の粒子からの力を式 (4.2)(4.3) から計算し、式 (4.1) から、その粒子の速度と位置を求めれば MD 法の一つの粒子の 1 ステップが終了する。これを系内の全粒子について行ない、時間を進めて繰り返すことによって粒子の動きを追跡する。式 (4.1) は簡単な常微分方程式であるため、数値積分の方法は種々あるが、MD 法では粒子の移動による相互作用の変化が重要となるため、タイムステップは十分小さくする必要がある。

力の計算時間の短縮のため、粒子登録法を用いる。すなわち MD 法では、すべての粒子対について力を求めると、式 (4.2) (4.3) の計算時間が、粒子数のほぼ 2 乗に比例して増大するため、通常、相互作用しそうな粒子だけをリストアップしたテーブルを各粒子に持たせておき、力の計算はそのリストの中の粒子についてのみ行なう [3]。粒子は逐次動いているため、リストは適宜更新する。

4.2 シミュレーション条件

領域は幅 648 Å、高さ 321 Å の 2 次元矩形領域とし、シミュレーションにはアルゴン原子、($m = 6.63 \times 10^{-26} \text{ kg}$, $\epsilon/k = 120 \text{ K}$, $\sigma = 3.4 \text{ Å}$)、を 7200 個用いた。上面の温度は 120 K とし、底面は 180 K から 600 K の間の値とした。領域内の初期温度は、底面から上面まで線形の温度勾配により与えた。粒子の初期配置は均等な間隔の格子状とし、粒子位置の温度に対応した速度のマックスウェル分布から抽出した値を粒子の初期速度として用いた。

式 (4.1) の積分にはベルレの方法を用い [3]、原子間力の計算を行なうカットオフは 3σ とした。タイムステップは、時間の単位を $\tau = (m\sigma^2/48\epsilon)^{1/2} = 3.1 \times 10^{-13} \text{ sec}$ として、0.05 とした。

境界との相互作用は、上面及び底面では拡散反射とし、反射粒子の速度は壁温度に対応した速度のマックスウェル分布から抽出した。左右境界では、鏡面反射とし、壁に垂直な速度成分を反転させ、水平な速度成分はそのままとした。すなわち、前章の DSMC 法の場合と同様である。本シミュレーションでは、壁面からのポテンシャルによる力は簡単のため考慮しない。

重力に相当する外力として、DSMC 法の場合と同様に式 (3.4) で表される g を F_i に加えた [12]。

流れ場の温度や流速といったマクロな量は、計算領域を 40×20 のサンプリングセルにわけ、各セル内の粒子の速度をサンプリングすることにより求める。粒子速度のサンプリングは、数万タイムステップにわたる時間平均により行なった。

4.3 熱伝導 - 対流遷移と流速の増加

Fig.25 に、底面が 600K、上面が 120K のケースでの速度場、及び温度場の発達を示す。左側が速度場、右側が対応する温度場である。各速度場、温度場は、それぞれタイムステップゼロから 4 万タイムステップ毎の時間平均により得られたものである。ランダムな速度場と上底面に水平な温度場から、局所的な流れが発生し、対応する温度場が形成される様子がわかる。計算領域のアスペクト比は、DSMC 法によるシミュレーションの場合と同様、連続流体の方程式の線形

安定性解析により、熱伝導状態がもっとも早く不安定となる波長に対応している。この対流渦の初期の生成過程は、計算条件が異なるものの、Fig.1 に示した DSMC 法によって得られたものと同様なものとなっている。ただし、DSMC 法では、中央に下向きの流れが形成されたのに対し、ここでは、上向きの流れとなっている。DSMC 法でも、上向きの渦が観察されたケースもあり、粒子法による対流渦の向きがどのように決定されるかは明らかではないが、流体方程式の線形安定性解析でも流れの方向までは特定できない。

計算領域中間の高さでの温度の時間変化を示したのが、Fig.26 である。ここでは、中央部分と両側の壁近傍の平均値、及び、水平方向の平均値を示してある。15 万タイムステップ程度でほぼ対流状態が形成された後、変動を伴った定常な温度分布となっている。DSMC 法の場合と初期条件が異なるため、初期の過渡変化は Fig.2, 11 と異なっているが、安定な流れ場が形成されていることが確認できる。定常状態における流れ場は Fig.27 に示す。

底面の温度を変えて同様の計算を行ない、定常状態における垂直方向速度の最大値の変化を示したのが Fig.28 である。流速は、平均温度に対応する原子の平均熱速度 $(8kT)^{1/2}/(\pi m)^{1/2}$ により無次元化してある。Fig.28 では、横軸をレイリー数そのものではなく、臨界値からのずれ $\varepsilon = (Ra - Ra_c)/Ra_c$ で示してある。レイリー数は、ここではエンソグの理論により、

$$Ra = Ra'(\rho^*)L_y^2\left(\frac{\Delta T}{T^*}\right)^2 \quad (4.4)$$

と表される [38, 40]。ここで、 ρ^* 、 T^* は、それぞれ、平均密度、平均温度である。また、 $Ra'(\rho^*)$ は、密度の関数となる部分をまとめたものである。ここで用いた臨界レイリー数 Ra_c は、Fig.28 に示した $\varepsilon^{1/2}$ のフィッティングから求めたものである。流体方程式の安定性理論では、臨界値近傍では、変動の振幅は臨界値からのずれの $1/2$ 乗に比例することが知られている [41]。そこで Fig.28 では、流速の増加が見られる範囲で $\varepsilon^{1/2}$ の曲線を当てはめ、 $\varepsilon = 0$ の点を求めている。フィッティングから求めた $\varepsilon = 0$ の点では $(\Delta T/T^*)^2 = 0.95$ であった。この系での理論的臨界レイリー数は 1708 であるが [39]、式 (4.4) により対応する $(\Delta T/T^*)^2$ の理論値を求めると、1.17 となる。この差は、おそらく、本 MD シミュレーションでは、壁からのポテンシャルを無視し、簡単な拡散反射条件及び鏡面反射条件を用いているためではないかと考えられる。以下の考察では、対流開始点を $\varepsilon = 0$ に対応させるため、シミュレーションから得られた $(\Delta T/T^*)^2$ をこの系の臨界レイリー数に対応するものとする。 $\varepsilon > 0$ の領域では、MD のデータは、フィッティング曲線に沿っており、定性的には安定性理論と良く一致していることがわかる。なお、Fig.28 では、 $\varepsilon < 0$ の領域でも、流速がゼロとなっていないが、流速が ε に依存していないことから、粒子数やサンプリング回数などの統計誤差によるものと考えられる。

領域中間の高さの温度分布を、上底面の温度差に対して示したのが Fig.29 である。 $\varepsilon < 0$ の領域では、中央と壁近傍の温度は、いずれも平均温度とほぼ等しく、温度分布は上下壁に平行となっていることがわかる。一方、 $\varepsilon > 0$ の対流状態では、対流渦の流れに沿って温度分布が変形しており、上昇流のある中央部分で高温、下降流のある左右壁近傍で低温の温度分布となっている。この傾向は、流れの向きが逆転していることを除き、DSMC 法による Fig.18 と同じものであり、これによっても、本 MD シミュレーションが、定性的に熱伝導-対流遷移を再現できていることがわかる。

4.4 原子のカオス運動

流れ場が定常状態にある時のある原子一つの軌跡を示したのが、Fig.30である。Fig.30は、定常状態における 0.12×10^6 タイムステップにわたる原子の物理平面内での位置の変化を示したものである。流れ場が対流状態にあると ($\varepsilon = 0.871$) 原子の軌跡は対流渦に沿ったものになることがわかる。流れ場の流速は、原子速度のサンプリングにより求めているので、渦が発生している場合は、個々の原子も平均的には渦の流れに沿った大きな運動をしていることになる。これに対し、熱伝導状態では ($\varepsilon = -0.532$)、原子は乱雑な運動をしており、局所的には流れ場に沿った動きをしているとしても、特に秩序だった大きな運動は見られない。

原子の動きの乱雑さを、原子運動の相空間における軌道間の距離の増加により測定する [42]。ここでは、シミュレーションのあるタイムステップで、相空間における、あるひとつの原子の位置をわずかにシフトさせ、元の系とシフトした系の時間発展を調べ、着目した原子の軌道の違いを測定する。軌道間距離は、

$$d(t) = \left\{ \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^2 [(p'_{i,j}(t) - p_{i,j}(t))^2 + (q'_{i,j}(t) - q_{i,j}(t))^2] \right\}^{1/2}, \quad (4.5)$$

で与えられる。ここで、 p と q は、元の系における原子の運動量と位置であり、 p' と q' は、シフトした系における原子の運動量と位置である。添字 j は、物理平面内での方向を示す。ある時間間隔 Δt で、軌道間距離の増加率は $d(\Delta t)/d(0)$ により与えられるものとする。 Δt を変えた時の典型的な増加率の変化を、 $\varepsilon = 0.053$ の場合について Fig.31 に示す。増加率は、時間間隔の増加に対して指数関数的に増加しているが、これは、この系がカオス状態にあることを示している [42]。

原子のカオス運動の度合は、リアプノフ指数を測ることにより調べることができる [41]。リアプノフ指数は、相空間内の近接した軌道が時間とともに離れていく程度を表す量であり、軌道間距離を用いて、

$$\lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n\Delta t} \sum_{k=0}^n \ln \frac{d_k(\Delta t)}{d_k(0)}, \quad (4.6)$$

と表される。ここで、 n はサンプリングの数である。軌道間距離の増加率を求める方法を、リアプノフ指数が収束するまで繰り返す。この方法は、詳細なリアプノフ指数を求める方法 [32, 33] の簡略法である。時間間隔は 200 タイムステップとした。典型的なリアプノフ指数の時間に対する収束性を示したのが、Fig.32 である。サンプリングの数が増えるに従い、リアプノフ指数は一定の値に落ち着いていく様子が見られる。

リアプノフ指数は、軌道間距離の増加率により得られるが、増加率は、原子の物理空間における平均相対速度に主に依存すると仮定する。平均相対速度は、平衡状態における原子の平均速度に比例するので、増加率は、結局、

$$\frac{d_k(\Delta t)}{d_k(0)} \propto \bar{v} \quad (4.7)$$

により与えられる。ここで、 \bar{v} は系内の原子の平均速度である。系内の原子の平均速度は、系の平均温度に対応する平均熱速度、重力により得られる速度、流れ場の対流によって得られる速度、の三つの速度の和と考えられる。平均温度に対する平均熱速度は、代表速度を平均熱速度とした無次元量として考えると1である。重力に起因する速度は、重力が式(3.4)で与えられているように ΔT に比例し、代表速度が $(T^*)^{1/2}$ に比例するため、 $\Delta T/(T^*)^{1/2}$ に比例する。対流速度に起因する原子速度は、Fig.28に示されているように、 $\varepsilon^{1/2}$ に比例する。結局、原子の平均速度は、

$$\bar{v} \propto 1 + a \frac{\Delta T}{(T^*)^{1/2}} + b\varepsilon^{1/2}, \quad (4.8)$$

により与えられる。ここで、 a, b は定数である。関係式(4.8)の右辺第一項は熱伝導の効果を表し、第二、第三項は、対流の効果を表している。リアプノフ指数は、これにより、

$$\lambda = \ln\left[1 + a \frac{\Delta T}{(T^*)^{1/2}} + b\varepsilon^{1/2}\right] + c, \quad (4.9)$$

と表される。ここで、 c はもうひとつの定数である。

リアプノフ指数の ε に対する変化は、Fig.33に示す。Fig.33には、MDシミュレーションにより得られたものと、式(4.9)をMDのデータに当てはめた曲線を示してある。式(4.9)は、それぞれ異なる流れ場の状態に対応する3つの定数を含んでいる。すなわち、 a が非平衡熱伝導状態、 b が非平衡対流状態、 c が熱平衡状態である。フィッティングにあたっては、まず、 $\Delta T = 0$ の熱平衡状態に対して、 $\varepsilon = -1$ のMDデータから $c = 0.228$ が求まる。この値は、シミュレーションに用いた原子数や統計の数などの計算条件に依存している。次に、熱伝導状態、 $-1 < \varepsilon < 0$ 、において、式(4.9)とMDデータとの一致により、 $a = 0.003$ と決定される。重力による原子速度のオーダーは、 $g\Delta t$ と見積もることができるが、本シミュレーション条件では、これは $0.001\Delta T/(T^*)^{1/2}$ となる。すなわち、定数 a のオーダーは、妥当なものと考えられる。さらに、対流状態、 $0 < \varepsilon$ 、におけるMDデータと式(4.9)の一致から、 $b = 0.04$ が得られる。Fig.28の $\varepsilon^{1/2}$ の係数は0.1であり、これも、妥当なオーダーであると考えることができる。

Fig.33では、フィッティング曲線として、式(4.9)の熱伝導だけの効果によるリアプノフ指数の増加も示してある。原子運動の乱雑さは、図から明らかのように、流れ場の対流の影響を大きく受けている。Fig.30に見られたように、対流状態では、原子は大きな秩序運動を起こしているが、運動のカオスの度合は増加していることがわかる。散逸構造と呼ばれる自己組織化運動が発達すると熱エネルギーは運動エネルギーに転化されることが知られている[43]。このマクロな運動エネルギーの増加がミクロなレベルでの原子運動の乱雑さの増加に対応していると考えられるが、集団的な秩序運動が個々のカオス運動を増加させているのか、個々のカオス運動が増加することにより集団の秩序が生み出されるのかは明確ではない。

4.5 MD シミュレーションのまとめ

本章では、アルゴン原子を用いた MD 法により、熱伝導から対流へ至る 2 次元のレイリー・ベナール系をシミュレートした。一辺が数百 Å の計算領域における数千個の原子が、上下の温度差と外力の作用により、熱伝導状態や対流渦というマクロな流れの挙動を示し、系内の原子は、熱伝導状態では乱雑な運動をしているのに対し、対流状態では対流渦に沿って運動していることを確認した。原子のカオス運動を相空間における軌道間距離の増加率、すなわち、リアプノフ指数により測定した。熱伝導状態では、リアプノフ指数は、系の平均温度と上下の温度差とともに増加しているが、対流状態では、さらに、対流速度にも依存して増加することが明らかとなった。

5. まとめ

本報告書では、流体中の温度差によって発生する自然対流現象の基礎研究として、熱伝導-対流遷移過程をマイクロレベルの粒子法を用いてシミュレートした結果について記述した。マイクロな原子・分子のレベルでの代表的なシミュレーション手法として、ここでは、統計的手法である DSMC 法と決定論的手法である MD 法を用いた。

DSMC 法、MD 法のいずれにおいても、熱伝導状態と対流状態が計算され、マイクロレベルの粒子法によりマクロな流れ場の流動遷移過程を調べることの妥当性を確認した。DSMC 法により得られた臨界レイリー数は、マクロな流体方程式の線形安定性解析により得られるものと一致し、DSMC 法により、レイリー・ベナール不安定性として知られる熱伝導-対流遷移現象が定量的にシミュレートできることがわかった。さらに、遷移過程では、流れ場の諸量の変動量の空間相関が明確な熱伝導や対流状態のものより強くなっていることが明らかとなった。MD 法では、原子のカオス運動の度合を、リアプノフ指数を測定することにより調べ、原子の大規模な秩序運動としての対流渦が形成されると、個々の原子のカオス運動は増加していることが明らかとなった。

粒子法は流体を構成する原子・分子の運動を追跡する手法であり、マクロな流体方程式の数値解析にともなう各種モデル化を必要としないため、より根源的な解析手法と考えられる。しかも、流体方程式からは得られない、原子・分子の運動そのものやそこから生まれる揺らぎなどを、流れ場と同時に求めることができる。ここで扱ったのは、2次元の簡単な体系における単一成分の非平衡熱流体系であり、シミュレーションに用いた粒子数はそれほど多いものではない。また、プログラムは通常の FORTRAN で書かれた単一プロセッサ用のものである。超並列計算機やベクトル並列計算機を使用すると、本報告書で行なったシミュレーション条件でも 1 千万個以上の粒子を用い、かつ現実的な計算時間で結果が得られる。すなわち、より大きな系、より現実的な条件、あるいは、より複雑な系において、粒子法によるシミュレーションを行なうことが可能である。今後、通常の流体方程式の数値解析では困難や多くのモデル化がともなうような場合に、粒子法による流体解析が広く行なわれることが考えられ、そのためには、並列計算機の有効利用が必要不可欠である。流体解析に限らず、計算機の特性に基づいたアルゴリズムやライブラリを用いた並列化、膨大な計算結果の可視化を含む処理、データの転送や保存といった大規

4.5 MD シミュレーションのまとめ

本章では、アルゴン原子を用いた MD 法により、熱伝導から対流へ至る 2 次元のレイリー・ベナール系をシミュレートした。一辺が数百 Å の計算領域における数千個の原子が、上下の温度差と外力の作用により、熱伝導状態や対流渦というマクロな流れの挙動を示し、系内の原子は、熱伝導状態では乱雑な運動をしているのに対し、対流状態では対流渦に沿って運動していることを確認した。原子のカオス運動を相空間における軌道間距離の増加率、すなわち、リアプノフ指数により測定した。熱伝導状態では、リアプノフ指数は、系の平均温度と上下の温度差とともに増加しているが、対流状態では、さらに、対流速度にも依存して増加することが明らかとなった。

5. まとめ

本報告書では、流体中の温度差によって発生する自然対流現象の基礎研究として、熱伝導-対流遷移過程をマイクロレベルの粒子法を用いてシミュレートした結果について記述した。ミクロな原子・分子のレベルでの代表的なシミュレーション手法として、ここでは、統計的手法である DSMC 法と決定論的手法である MD 法を用いた。

DSMC 法、MD 法のいずれにおいても、熱伝導状態と対流状態が計算され、マイクロレベルの粒子法によりマクロな流れ場の流動遷移過程を調べることの妥当性を確認した。DSMC 法により得られた臨界レイリー数は、マクロな流体方程式の線形安定性解析により得られるものと一致し、DSMC 法により、レイリー・ベナール不安定性として知られる熱伝導-対流遷移現象が定量的にシミュレートできることがわかった。さらに、遷移過程では、流れ場の諸量の変動量の空間相関が明確な熱伝導や対流状態のものより強くなっていることが明らかとなった。MD 法では、原子のカオス運動の度合を、リアプノフ指数を測定することにより調べ、原子の大規模な秩序運動としての対流渦が形成されると、個々の原子のカオス運動は増加していることが明らかとなった。

粒子法は流体を構成する原子・分子の運動を追跡する手法であり、マクロな流体方程式の数値解析にもなる各種モデル化を必要としないため、より根源的な解析手法と考えられる。しかも、流体方程式からは得られない、原子・分子の運動そのものやそこから生まれる揺らぎなどを、流れ場と同時に求めることができる。ここで扱ったのは、2次元の簡単な体系における単一成分の非平衡熱流体系であり、シミュレーションに用いた粒子数はそれほど多いものではない。また、プログラムは通常の FORTRAN で書かれた単一プロセッサ用のものである。超並列計算機やベクトル並列計算機を使用すると、本報告書で行なったシミュレーション条件でも 1 千万個以上の粒子を用い、かつ現実的な計算時間で結果が得られる。すなわち、より大きな系、より現実的な条件、あるいは、より複雑な系において、粒子法によるシミュレーションを行なうことが可能である。今後、通常の流体方程式の数値解析では困難や多くのモデル化がともなうような場合に、粒子法による流体解析が広く行なわれることが考えられ、そのためには、並列計算機の有効利用が必要不可欠である。流体解析に限らず、計算機の特성에基づいたアルゴリズムやライブラリを用いた並列化、膨大な計算結果の可視化を含む処理、データの転送や保存といった大規

模数值シミュレーション技術の開発・整備が、シミュレーションに基づく研究としての計算科学には重要な要素であり、計算科学技術の総合的な進展が必要である。

参考文献

- [1] 保原 充, 大宮司 久明 編: "数値流体力学", 東京大学出版会, 東京 (1992) .
- [2] Bird G. A.: "Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows", (Clarendon, Oxford, 1994).
- [3] 上田 顕: "コンピュータシミュレーション", 朝倉書店, 東京 (1990).
- [4] Rothman D. H. and Zaleski S.: "Lattice-gas models of phase separation: interfaces, phase transitions, and multiphase flow", *Rev. Mod. Phys.*, **66**, 1417(1994).
- [5] 矢部 孝, 観山 正見, 梶島 成治: "パソコンによるシミュレーション物理", 朝倉書店, 東京 (1992) .
- [6] 矢部 孝, 川田 重夫, 福田 昌宏: "シミュレーション物理入門", 朝倉書店, 東京 (1989) .
- [7] Ahlers G.: "Experiments with pattern-forming systems", *Physica D* **51**, 421(1991).
- [8] Cross M. C. and Hohenberg P. C.: "Pattern formation outside of equilibrium", *Rev. Mod. Phys.* **65**, 851(1993).
- [9] Garcia A. L.: "Hydrodynamic fluctuations and the direct simulation Monte Carlo method", in *Microscopic Simulations of Complex Flows*, edited by M. Mareschal, Plenum Press, New York, 177(1990).
- [10] Stefanov S. and Cercignani C.: "Monte Carlo simulation of Bénard's instability in a rarefied gas", *Eur. J. Mech. B*, **11**, 543(1992).
- [11] Garcia A. and Penland C.: "Fluctuating hydrodynamics and principal oscillation pattern analysis", *J. Stat. Phys.* **64**, 1121(1991).
- [12] Mareschal M. and Kestemont E.: "Order and fluctuations in nonequilibrium molecular dynamics simulations of two-dimensional fluids," *J. Stat. Phys.*, **48**, 1187(1987), "Experimental evidence for convective rolls in finite two-dimensional molecular models," *Nature*, **239**, 427(1987).
- [13] Rapaport D. C.: "Molecular-dynamics study of Rayleigh-Bénard convection," *Phys. Rev. Lett.*, **60**, 2480(1988).
- [14] Mareschal M., Mansour M. M., Puhl A. and Kestemont E.: "Molecular dynamics versus hydrodynamics in a two-dimensional Rayleigh-Bénard system," *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 2550(1988).

模数値シミュレーション技術の開発・整備が、シミュレーションに基づく研究としての計算科学には重要な要素であり、計算科学技術の総合的な進展が必要である。

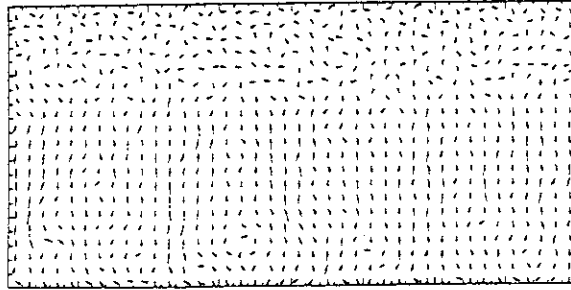
参考文献

- [1] 保原 充, 大宮司 久明 編: "数値流体力学", 東京大学出版会, 東京 (1992) .
- [2] Bird G. A.: "Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows", (Clarendon, Oxford, 1994).
- [3] 上田 顕: "コンピュータシミュレーション", 朝倉書店, 東京 (1990).
- [4] Rothman D. H. and Zaleski S.: "Lattice-gas models of phase separation: interfaces, phase transitions, and multiphase flow", *Rev. Mod. Phys.*, **66**, 1417(1994).
- [5] 矢部 孝, 観山 正見, 梶島 成治: "パソコンによるシミュレーション物理", 朝倉書店, 東京 (1992) .
- [6] 矢部 孝, 川田 重夫, 福田 昌宏: "シミュレーション物理入門", 朝倉書店, 東京 (1989) .
- [7] Ahlers G.: "Experiments with pattern-forming systems", *Physica D* **51**, 421(1991).
- [8] Cross M. C. and Hohenberg P. C.: "Pattern formation outside of equilibrium", *Rev. Mod. Phys.* **65**, 851(1993).
- [9] Garcia A. L.: "Hydrodynamic fluctuations and the direct simulation Monte Carlo method", in *Microscopic Simulations of Complex Flows*, edited by M. Mareschal, Plenum Press, New York, 177(1990).
- [10] Stefanov S. and Cercignani C.: "Monte Carlo simulation of Bénard's instability in a rarefied gas", *Eur. J. Mech. B*, **11**, 543(1992).
- [11] Garcia A. and Penland C.: "Fluctuating hydrodynamics and principal oscillation pattern analysis", *J. Stat. Phys.* **64**, 1121(1991).
- [12] Mareschal M. and Kestemont E.: "Order and fluctuations in nonequilibrium molecular dynamics simulations of two-dimensional fluids," *J. Stat. Phys.*, **48**, 1187(1987), "Experimental evidence for convective rolls in finite two-dimensional molecular models," *Nature*, **239**, 427(1987).
- [13] Rapaport D. C.: "Molecular-dynamics study of Rayleigh-Bénard convection," *Phys. Rev. Lett.*, **60**, 2480(1988).
- [14] Mareschal M., Mansour M. M., Puhl A. and Kestemont E.: "Molecular dynamics versus hydrodynamics in a two-dimensional Rayleigh-Bénard system," *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 2550(1988).

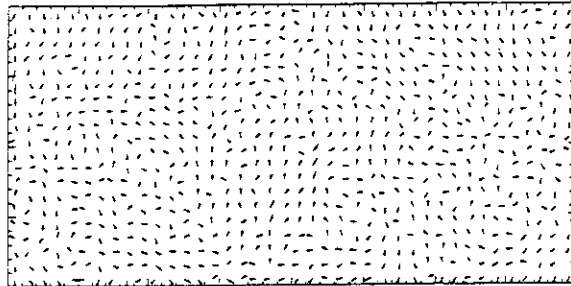
- [15] Puhl A., Mansour M. M. and Mareschal M.: "Quantitative comparison of molecular dynamics with hydrodynamics in Rayleigh-Bénard convection," *Phys. Rev. A*, **40**, 1999(1989).
- [16] Given J. A. and Clementi E.: "Molecular dynamics and Rayleigh-Benard convection," *J. Chem. Phys.*, **90**, 7376(1989).
- [17] Posch H. A., Hoover W. G. and Kum O.: "Steady-state shear flows via nonequilibrium molecular dynamics and smooth-particle applied mechanics," *Phys. Rev. E*, **52**, 1711(1995).
- [18] Kum O., Hoover W. G. and Posch H. A.: "Viscous conducting flows with smooth-particle applied mechanics," *Phys. Rev. E*, **52**, 4899(1995).
- [19] Hoover W. G. and Kum O.: "Non-equilibrium simulations," *Molec. Phys.*, **86**, 685(1995).
- [20] 小林正興, 高橋亮一: "セルオートマトン法による自然対流の解析", *機論 (B)* 57, 191(1991).
- [21] Watanabe T., Kaburaki H. and Yokokawa M.: "Simulation of a two-dimensional Rayleigh-Bénard system using the direct simulation Monte Carlo method," *Phys. Rev. E*, **49**, 4060(1994).
- [22] Watanabe T., Kaburaki H. and Yokokawa M.: "Reply to 'Comment on 'Simulation of a two-dimensional Rayleigh-Bénard system using the direct simulation Monte Carlo method,' '" *Phys. Rev. E*, **51**, 3786(1995).
- [23] Nicolis G and Mansour M. M.: "Onset of spatial correlations in nonequilibrium systems: A master-equation description," *Phys. Rev. A*, **29**, 2845(1984).
- [24] Mareschal M. and Kestemont E.: "Measurements of long-range correlations by nonequilibrium molecular dynamics," *Phys. Rev. A*, **30**, 1158(1984).
- [25] Garcia A. L.: "Nonequilibrium fluctuations studied by a rarefied-gas simulation," *Phys. Rev. A*, **34**, 1454(1986), "Thermal fluctuations in a Knudsen flow system," *Phys. Lett. A*, **119**, 379(1987).
- [26] Garcia A. L., Mansour M. M., Lie G. C. and Clementi E.: "Numerical integration of the fluctuating hydrodynamic equations," *J. Stat. Phys.*, **47**, 209(1987), "Fluctuating hydrodynamics in a dilute gas," *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 874(1987).
- [27] Watanabe T., Kaburaki H., Machida M. and Yokokawa M.: "Growth of long-range correlations in a transition between heat conduction and convection," *Phys. Rev. E*, **52**, 1601(1995).
- [28] 渡辺 正, 蕪木 英雄, 町田 昌彦, 横川 三津夫: "直接シミュレーションモンテカルロ法による Rayleigh-Bénard 不安定性の研究", *Thermal Sci. Eng.*, **2**, 17(1994).

- [29] Evans D. J.: "Computer "experiment" for nonlinear thermodynamics of Couette flow," *J. Chem. Phys.* **78**, 3297(1983).
- [30] Holian B. L. Hoover W. G., and Posch H. A.: "Resolution of Loschmidt's Paradox: The Origin of Irreversible Behavior in Reversible Atomistic Dynamics," *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 10(1987).
- [31] Hoover W. G.: "Reversible mechanics and time's arrow," *Phys. Rev. A*, **37**, 252(1988).
- [32] Posch H. A. and Hoover W. G.: "Lyapunov instability of dense Lennard-Jones fluids," *Phys. Rev. A*, **38**, 473(1988).
- [33] Posch H. A. and Hoover W. G.: "Equilibrium and nonequilibrium Lyapunov spectra for dense fluids and solids," *Phys. Rev. A*, **39**, 2175(1989).
- [34] Hoover W. G. and Posch H. A.: "Second-law irreversibility and phase-space dimensionality loss from time-reversible nonequilibrium steady-state Lyapunov spectra," *Phys. Rev. E*, **49**, 1913(1994).
- [35] Hoover W. G. and Posch H. A.: "Shear viscosity via global control of spatiotemporal chaos in two-dimensional isoenergetic dense fluids," *Phys. Rev. E*, **51**, 273(1995).
- [36] Watanabe T. and Kaburaki H.: "Increase in chaotic motions of atoms in a large-scale self-organized motion," *Phys. Rev. E*, **54**(1996).
- [37] Nanbu K.: "Theoretical Basis of the Direct Simulation Monte Carlo Method," *Proc. 15th Int. Symp. Rarefied Gas Dynamics, Grado, Italy*, 1, 369(1986).
- [38] Chapman S. and Cowling T. G.: "The Mathematical Theory of Non-uniform Gases," (Cambridge University Press, Cambridge, 1970).
- [39] Chandrasekhar S.: "Hydrodynamic and hydromagnetic stability," (Clarendon, Oxford, 1961).
- [40] Gass D. M.: "Enskog theory for a rigid disk fluid," *J. Chem. Phys.*, **54**, 898(1971).
- [41] Bhattacharjee J. K.: "Convection and Chaos in Fluids," (World Scientific, Singapore, 1987).
- [42] Casati G. and Ford J.: "Stochastic transition in the unequal-mass Toda lattice," *Phys. Rev. A*, **12**, 1702(1975).
- [43] Glansdorff P. and Prigogine I.: "Thermodynamic theory of structure, stability and fluctuations," (Wiley-Interscience, London, 1971).

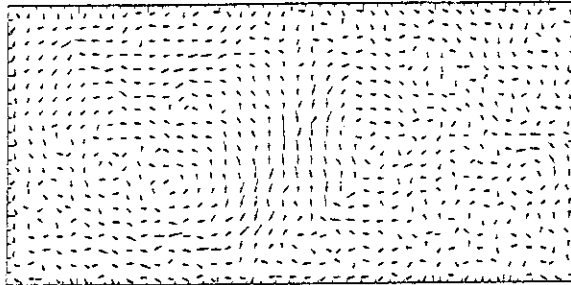
SAMPLING (0-200 STEP)



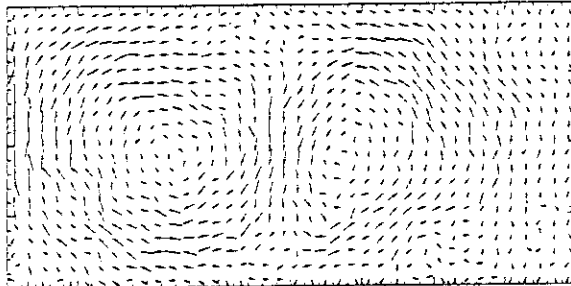
(200-400 STEP)



(400-600 STEP)



(600-800 STEP)



(3000-3200 STEP)

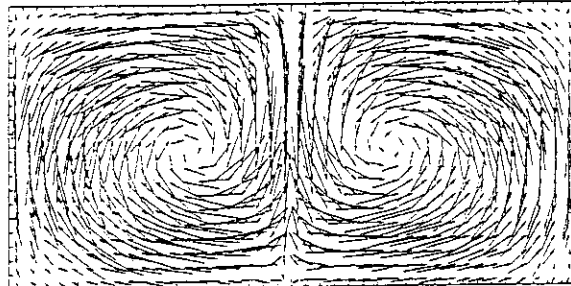


Fig.1:

Transient of the velocity field at the Rayleigh number of 4527. Each velocity vector is obtained by sampling during 200 time steps.

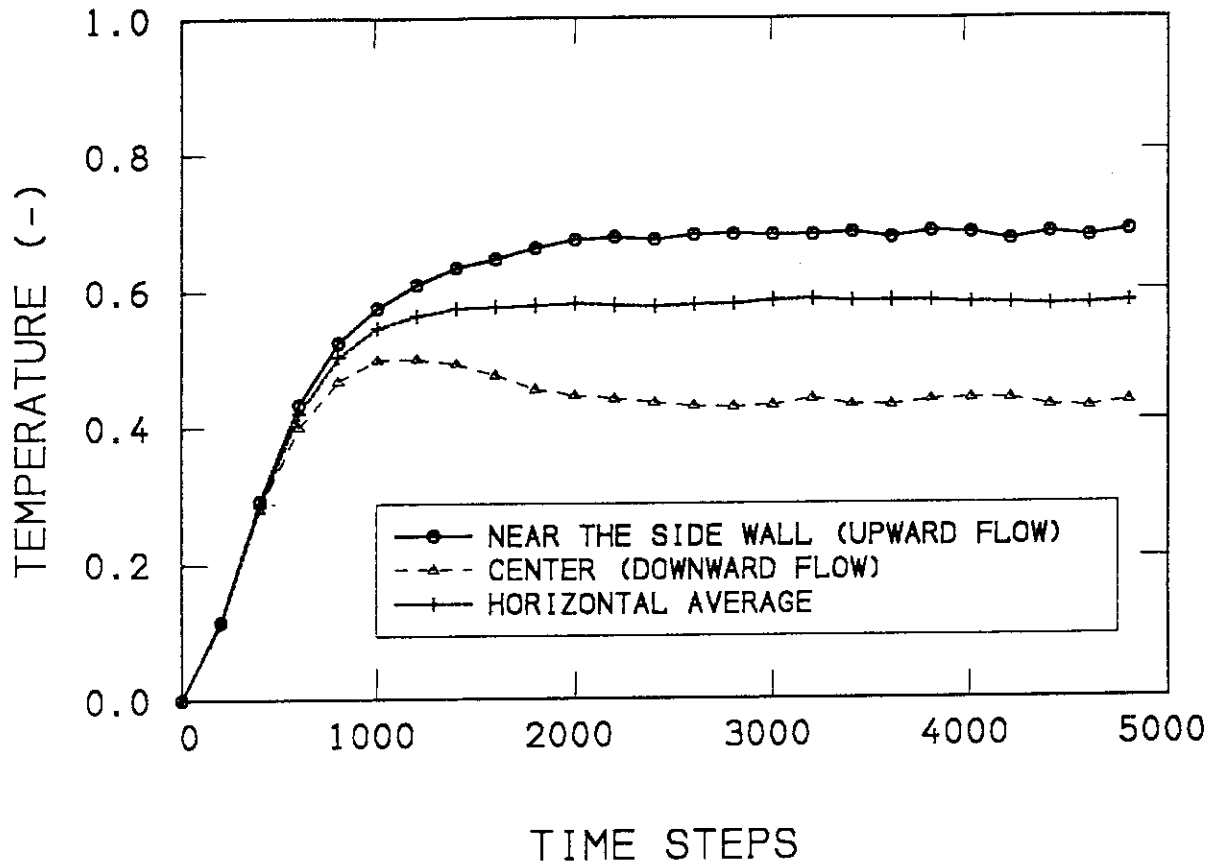


Fig.2:

Time development of the mid-elevation temperature at the Rayleigh number of 4527. The temperatures at the center and near the sidewall are shown along with the horizontal average.

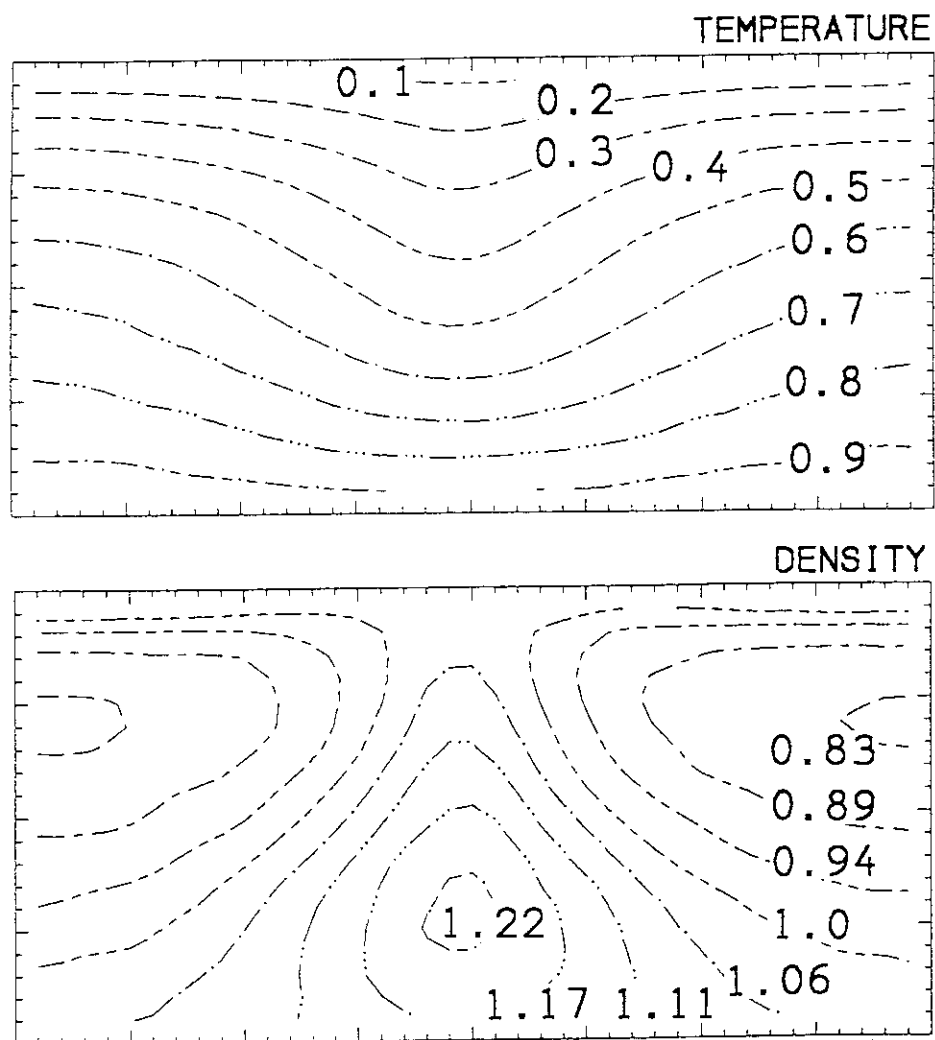


Fig.3:
 Temperature and density distribution at the Rayleigh number of 4527. Sampling is performed from 4900 to 5600 time steps.

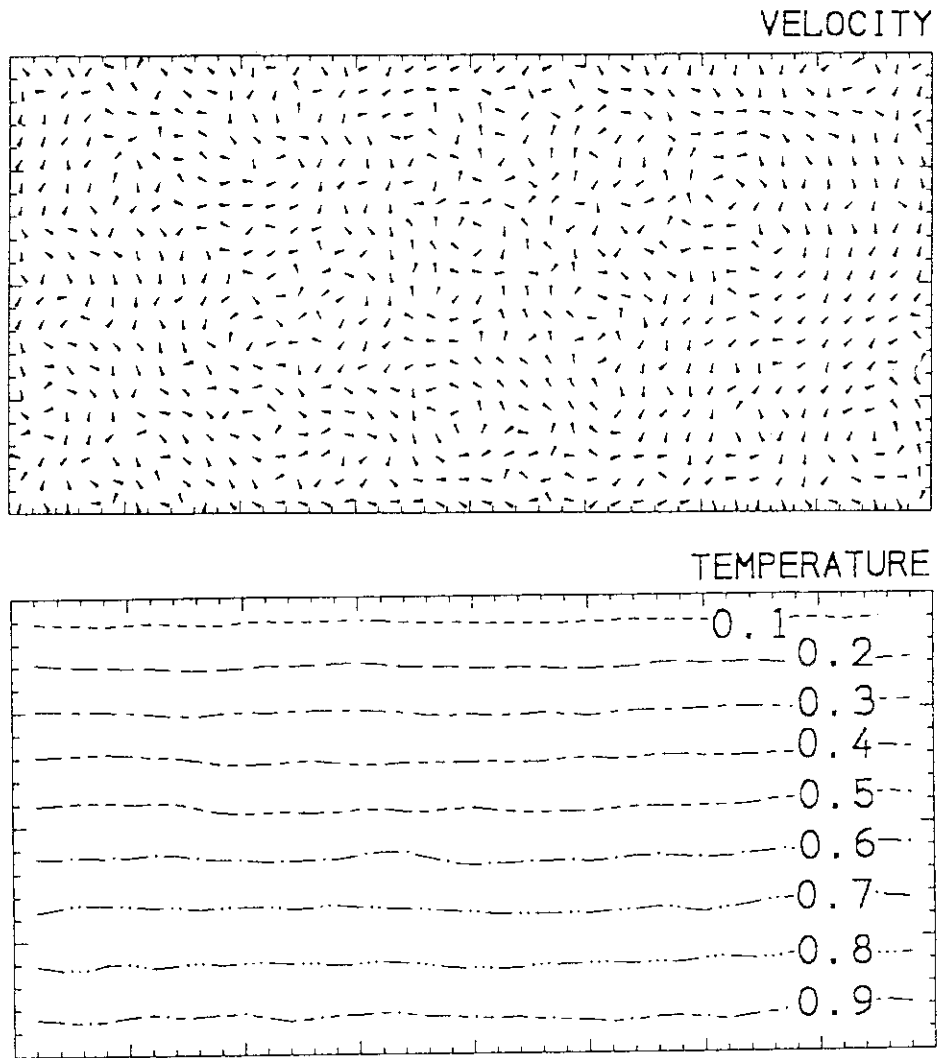


Fig.4:
Velocity field and temperature distribution at the Rayleigh number of 1507. Sampling is performed from 11700 to 12600 time steps.

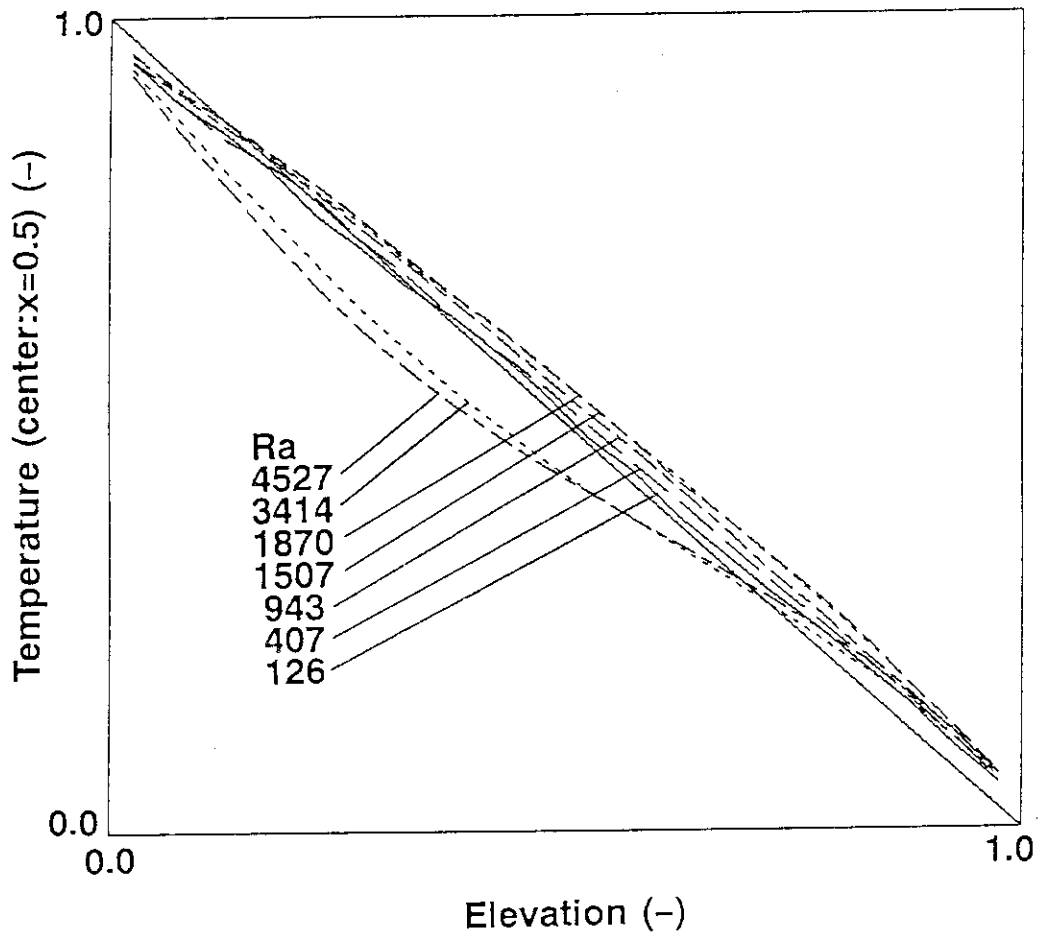


Fig.5:
Temperature distribution in the vertical direction at the center of the simulation region with different Rayleigh numbers.

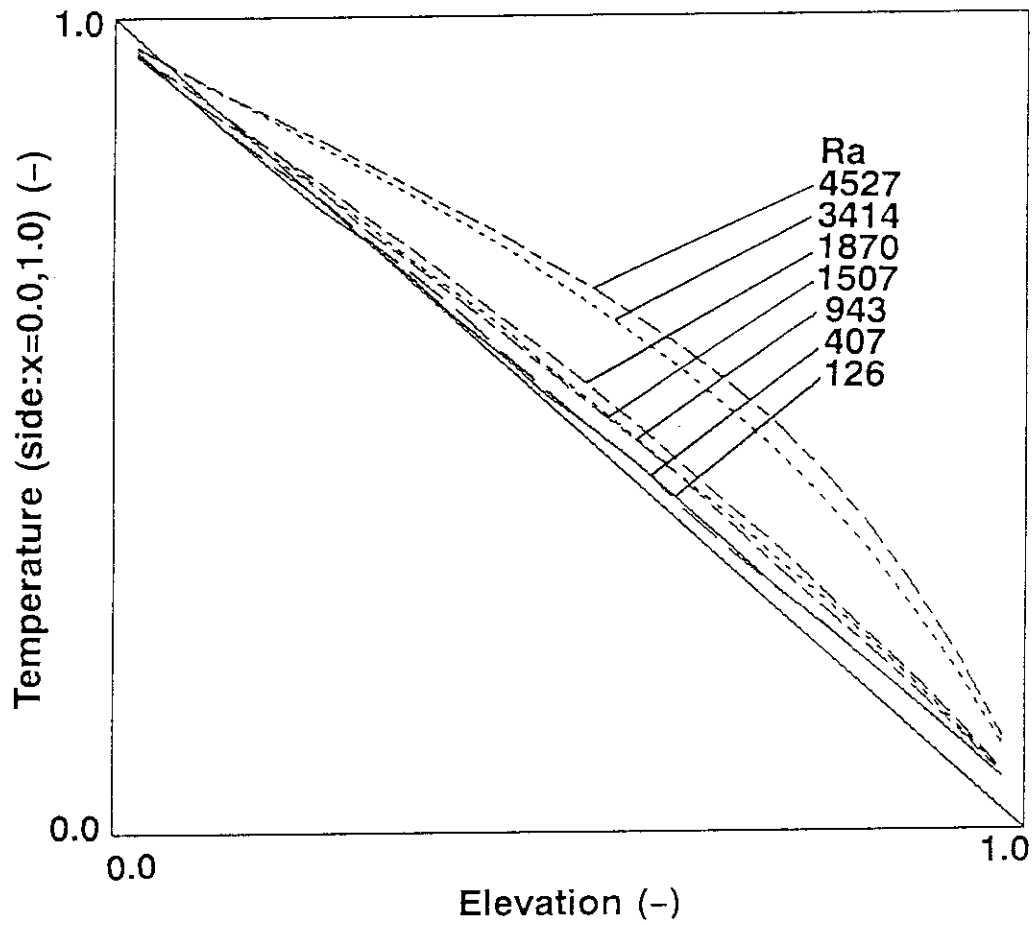


Fig.6:
Temperature distribution in the vertical direction near the side wall with different Rayleigh numbers.

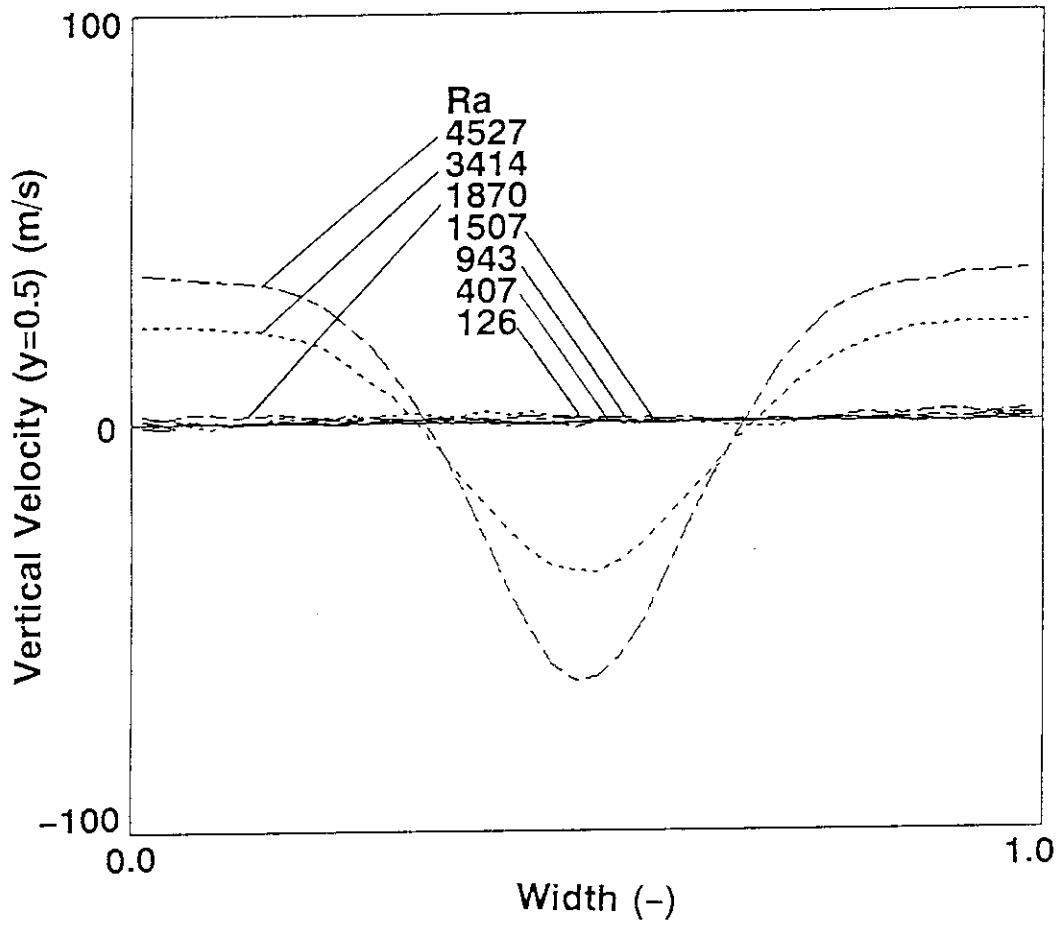


Fig.7:
Vertical velocity distribution at the midelevation with different Rayleigh numbers.

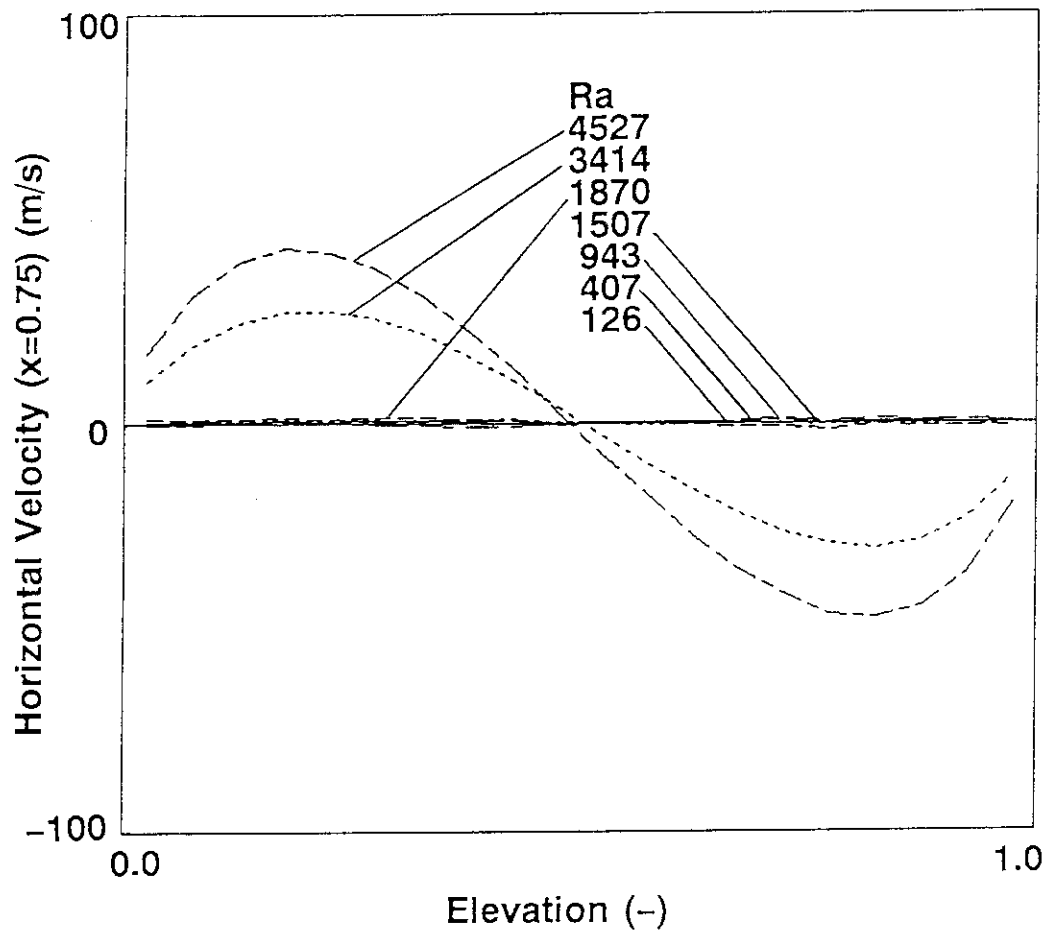


Fig.8:
Horizontal velocity distribution at x=0.75 with different Rayleigh numbers.

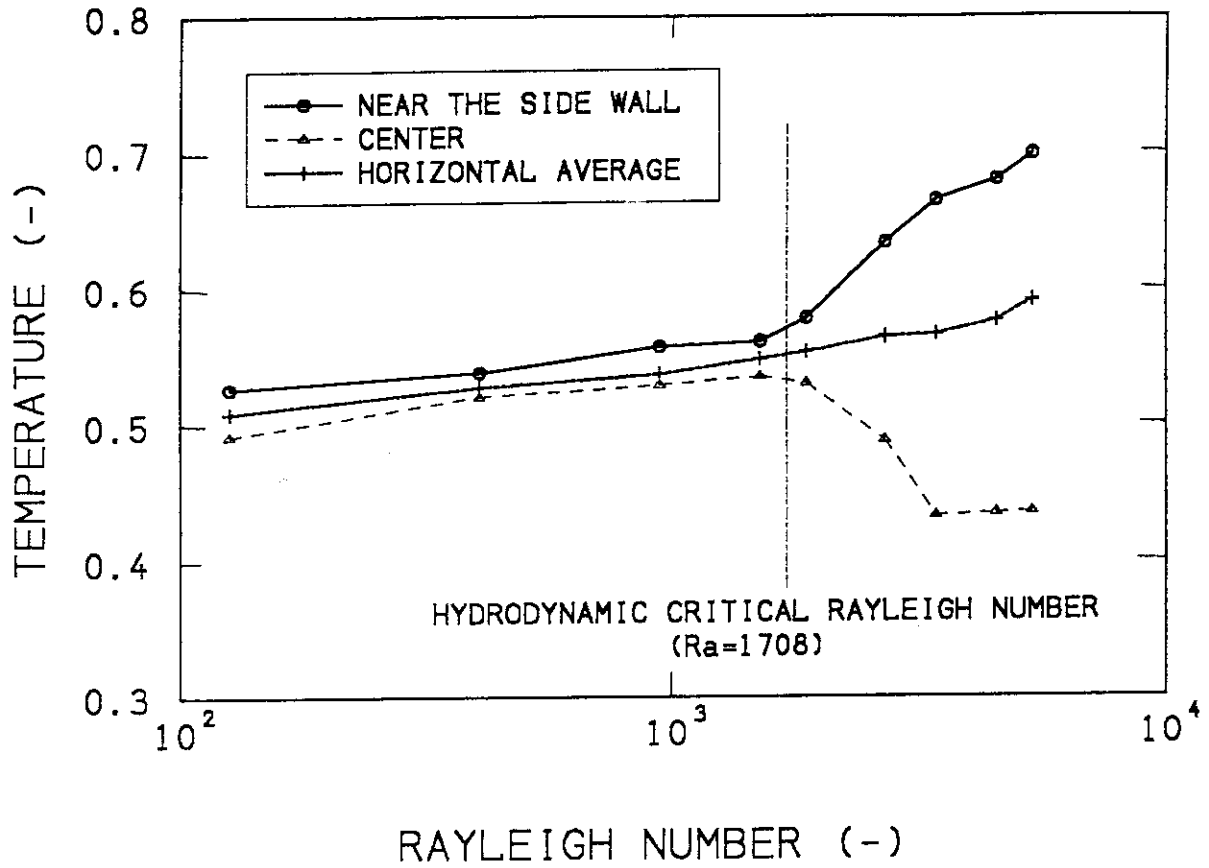


Fig.9: Midelevation temperature in the steady state as a function of the Rayleigh number. The temperatures at the center and near the sidewall are shown along with the horizontal average.

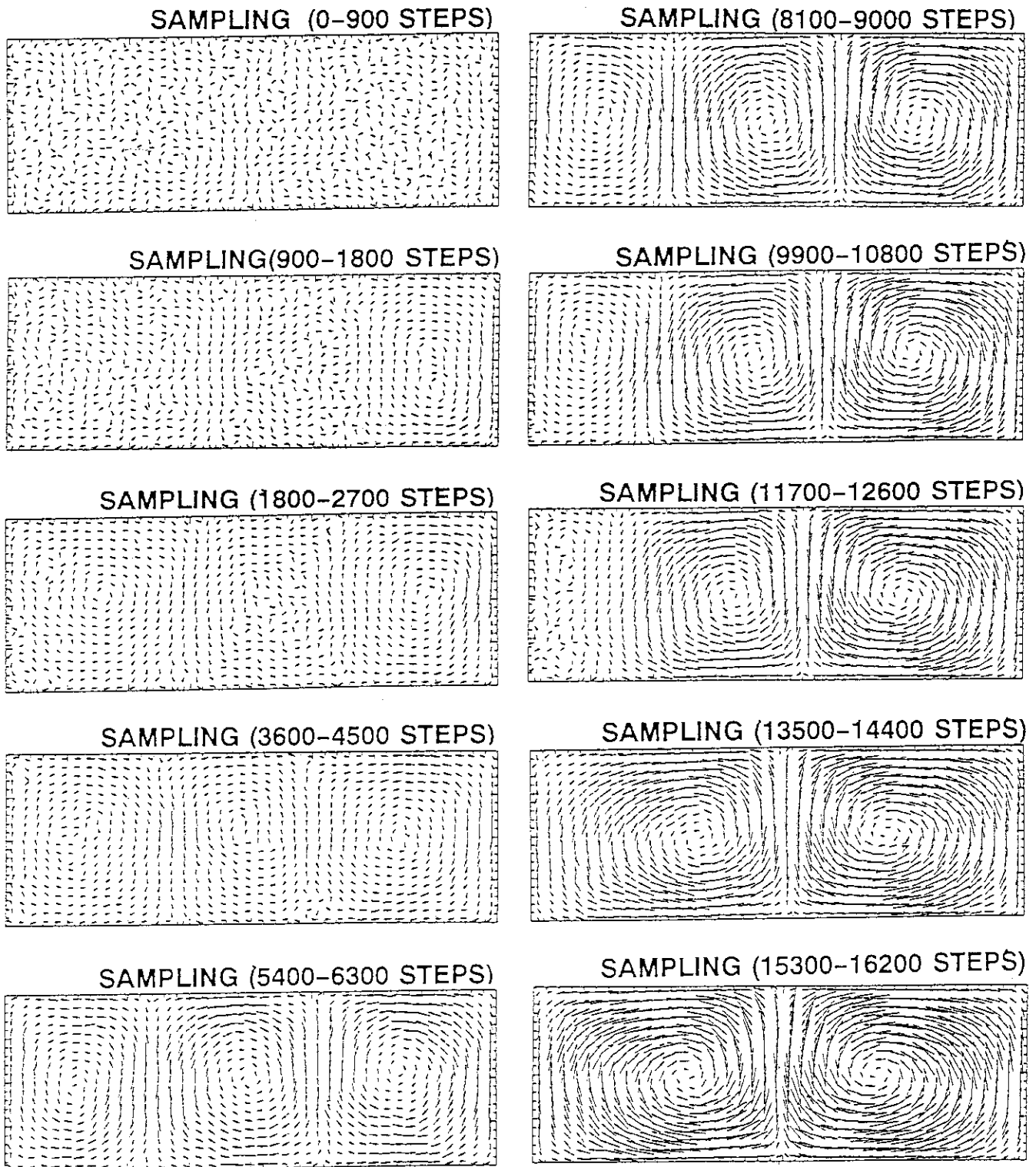


Fig.10:
Transient of the velocity field at the Rayleigh number of 1507 using the semislip boundary condition.

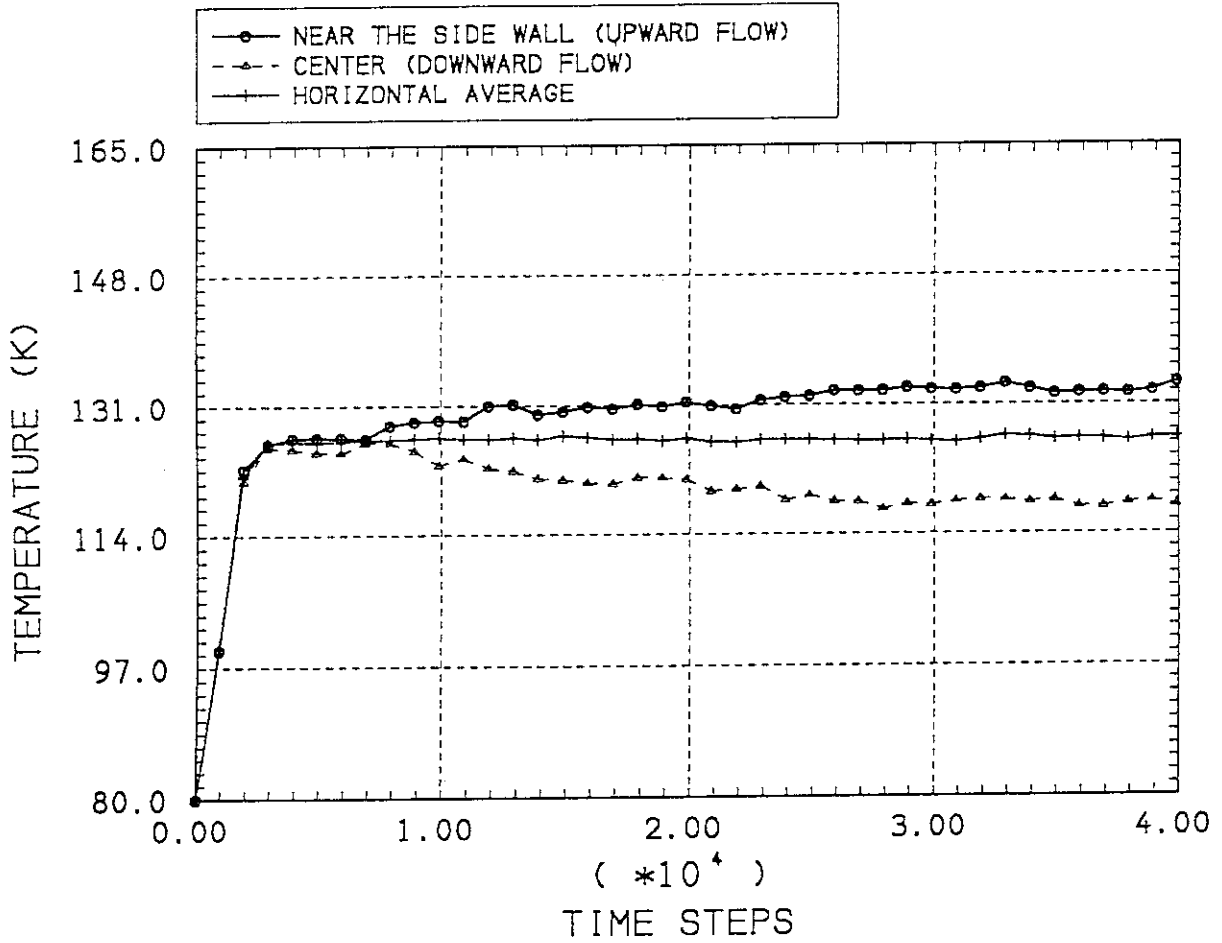


Fig.11:
 Time development of the midelevation temperature at the Rayleigh number of 1226 using the semislip boundary condition.

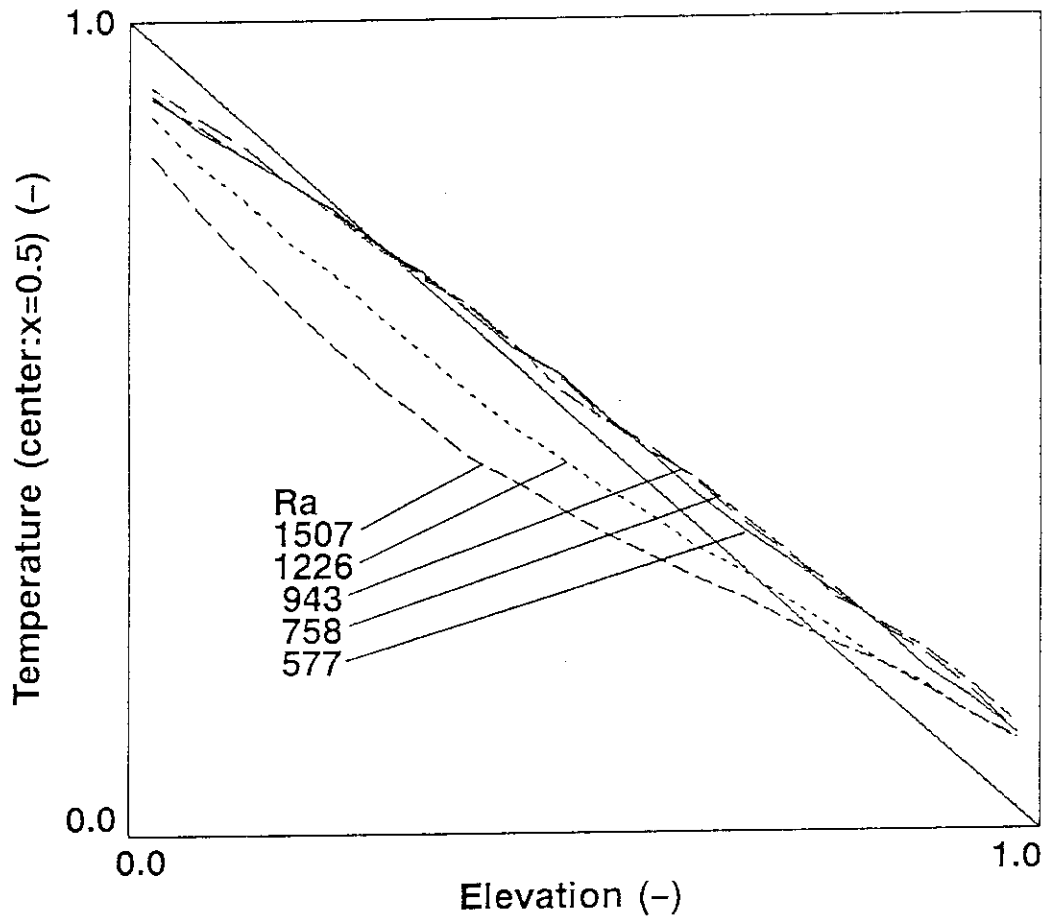


Fig.12:

Temperature distribution in the vertical direction at the center of the simulation region with different Rayleigh numbers using the semislip boundary condition.

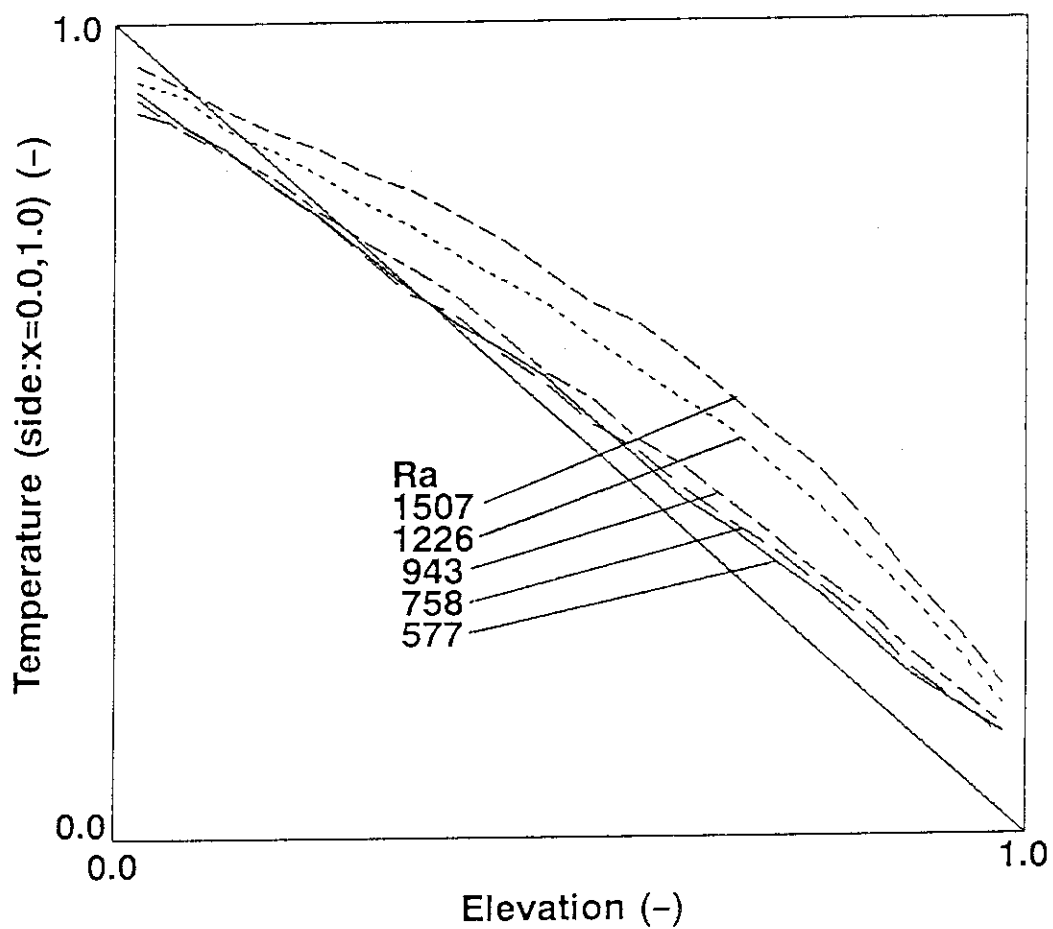


Fig.13:
 Temperature distribution in the vertical direction near the side wall with different Rayleigh numbers using the semislip boundary condition.

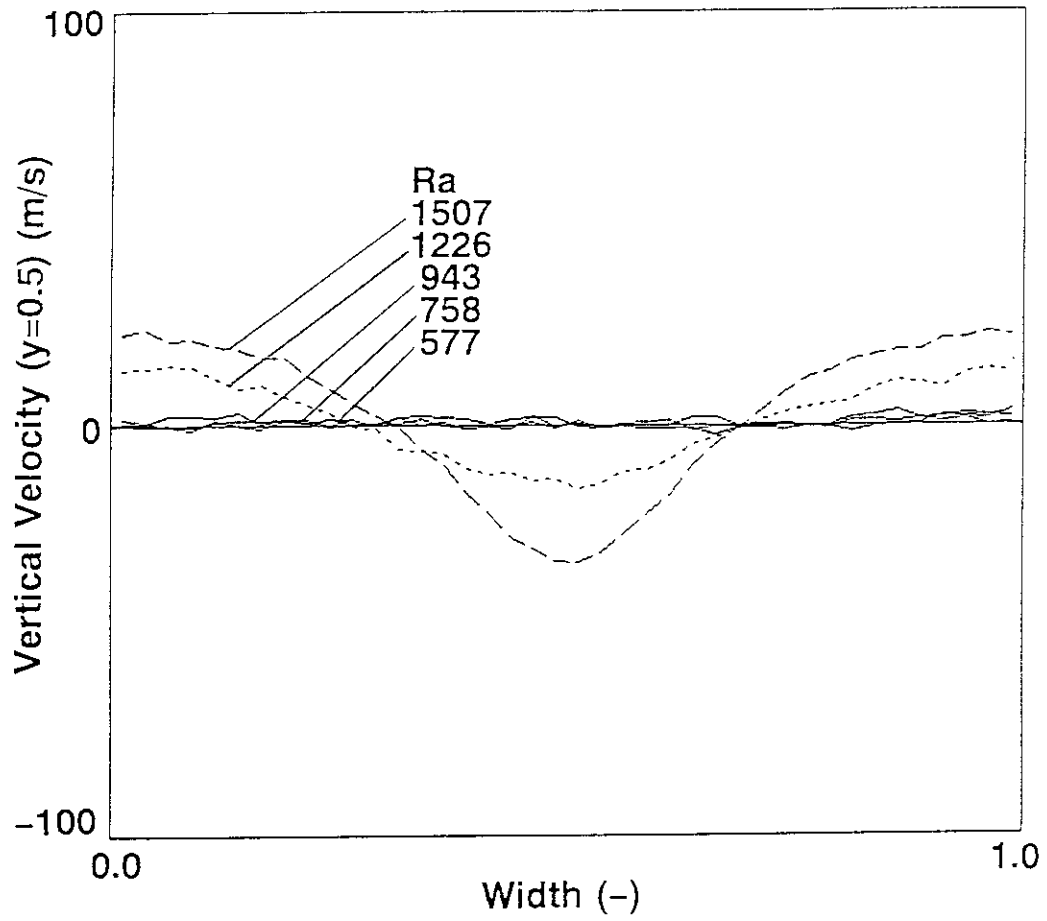


Fig.14:

Vertical velocity distribution at the midelevation with different Rayleigh numbers using semislip boundary condition.

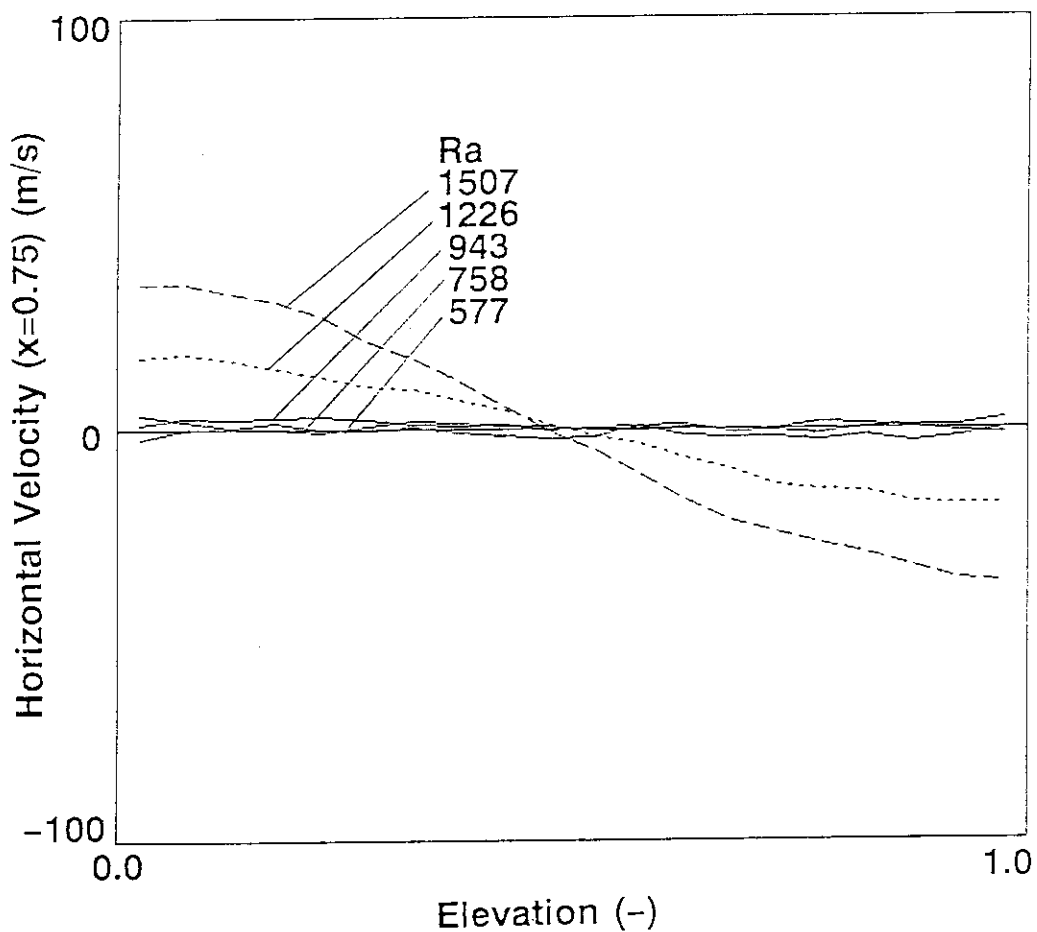


Fig.15:
Horizontal velocity distribution at $x=0.75$ with different Rayleigh numbers using semislip boundary condition.

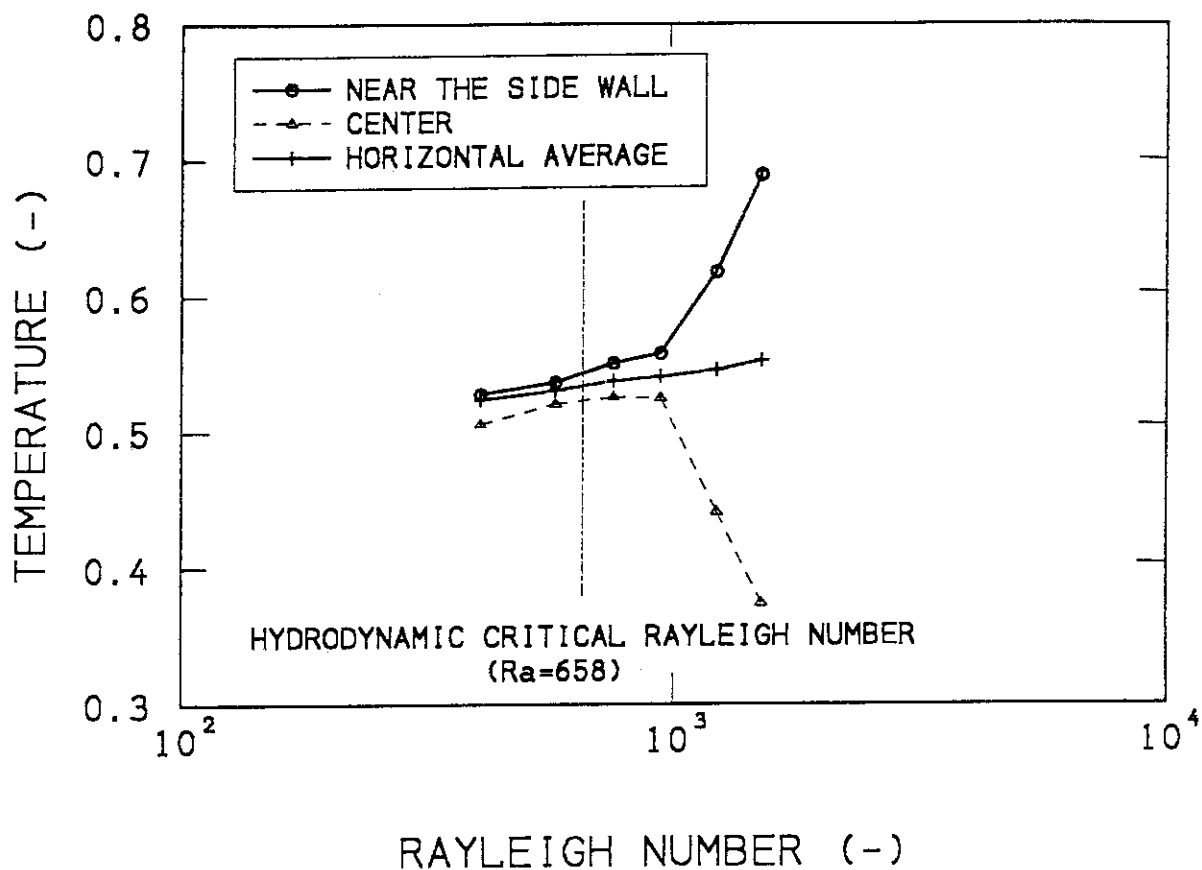


Fig.16:

Midelevation temperature in the steady state as a function of the Rayleigh number. The temperatures at the center and near the sidewall are shown along with the horizontal average. The semislip boundary condition is applied.

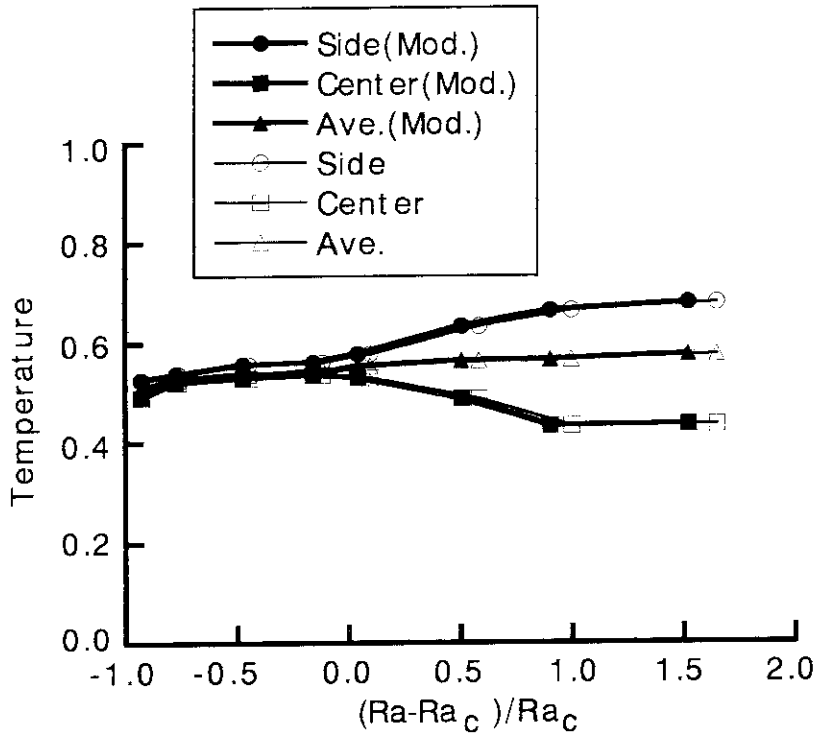


Fig.17:

Midelevation temperatures obtained by using the diffuse boundary condition. The temperatures near the side wall and at the center are plotted together with the horizontal average. The case with the modified Rayleigh number taking account of the temperature jump is denoted by "Mod."

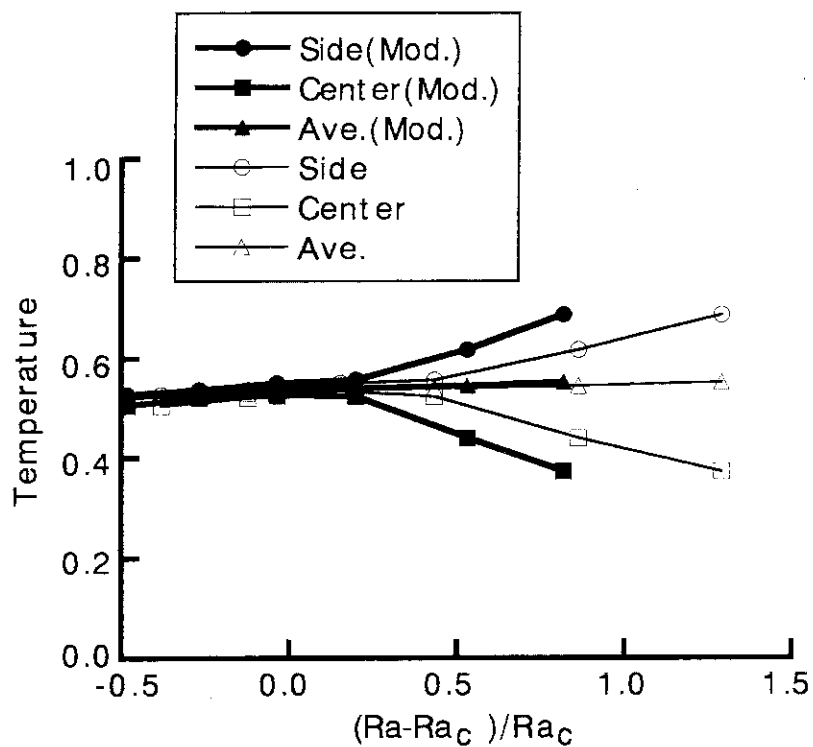


Fig.18:

Midelevation temperatures obtained by using the semislip boundary condition. The temperatures near the side wall and at the center are plotted together with the horizontal average. The case with the modified Rayleigh number taking account of the temperature jump is denoted by "Mod."

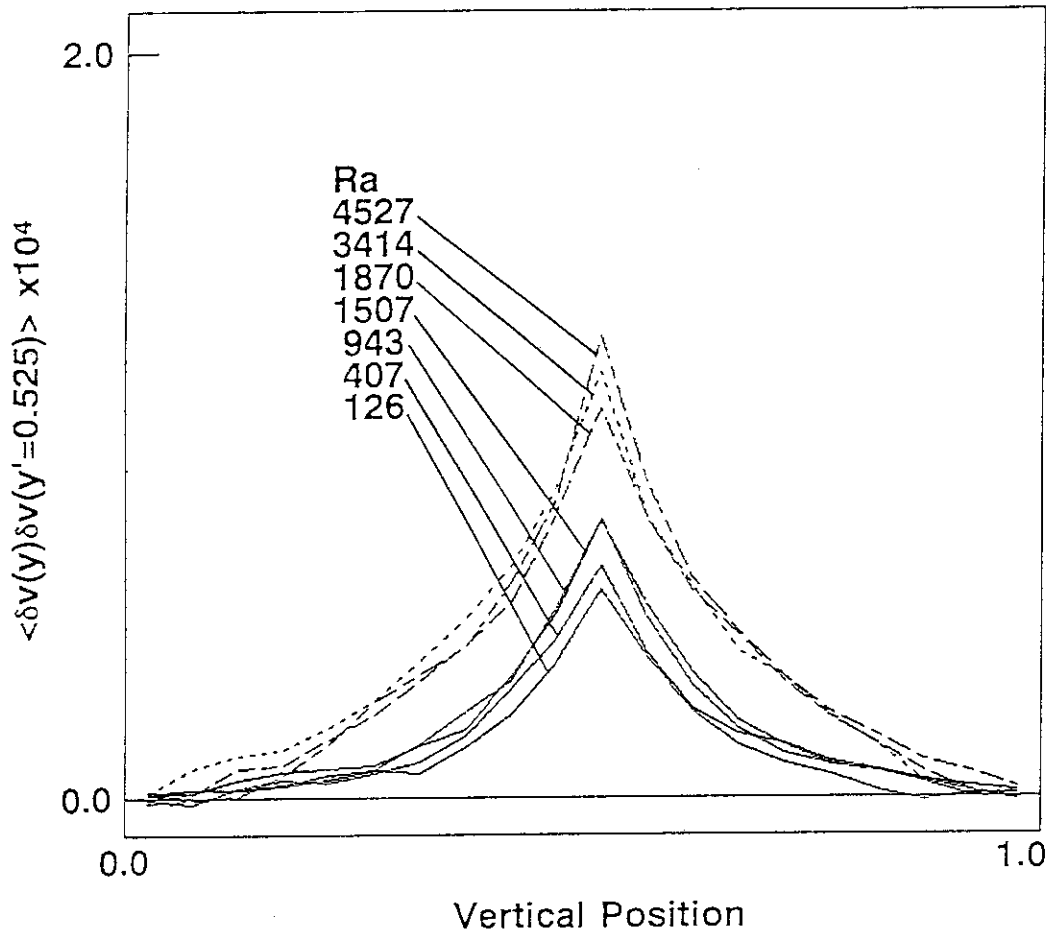


Fig.19:
 Correlation function for the vertical velocity fluctuation with different Rayleigh numbers.
 One elevation is fixed at $y=0.525$.

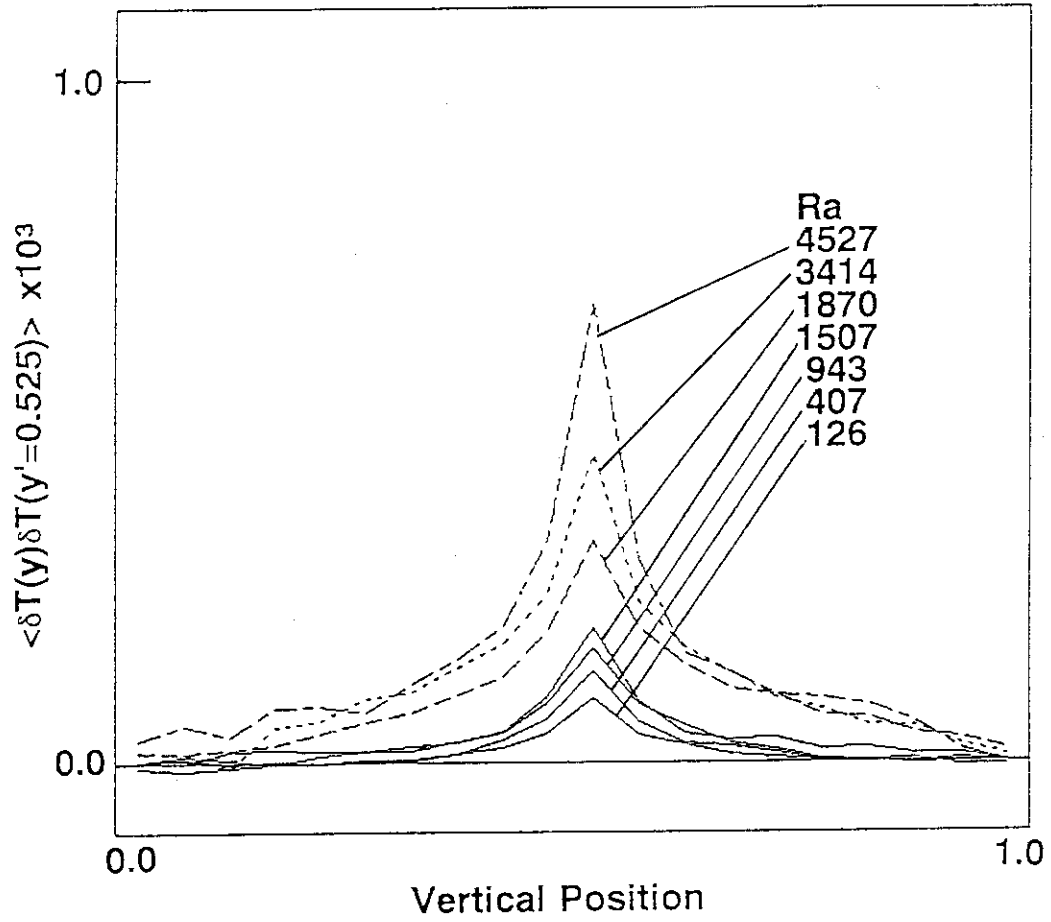


Fig.20:

Correlation function for the temperature fluctuation with different Rayleigh numbers.
One elevation is fixed at $y=0.525$.

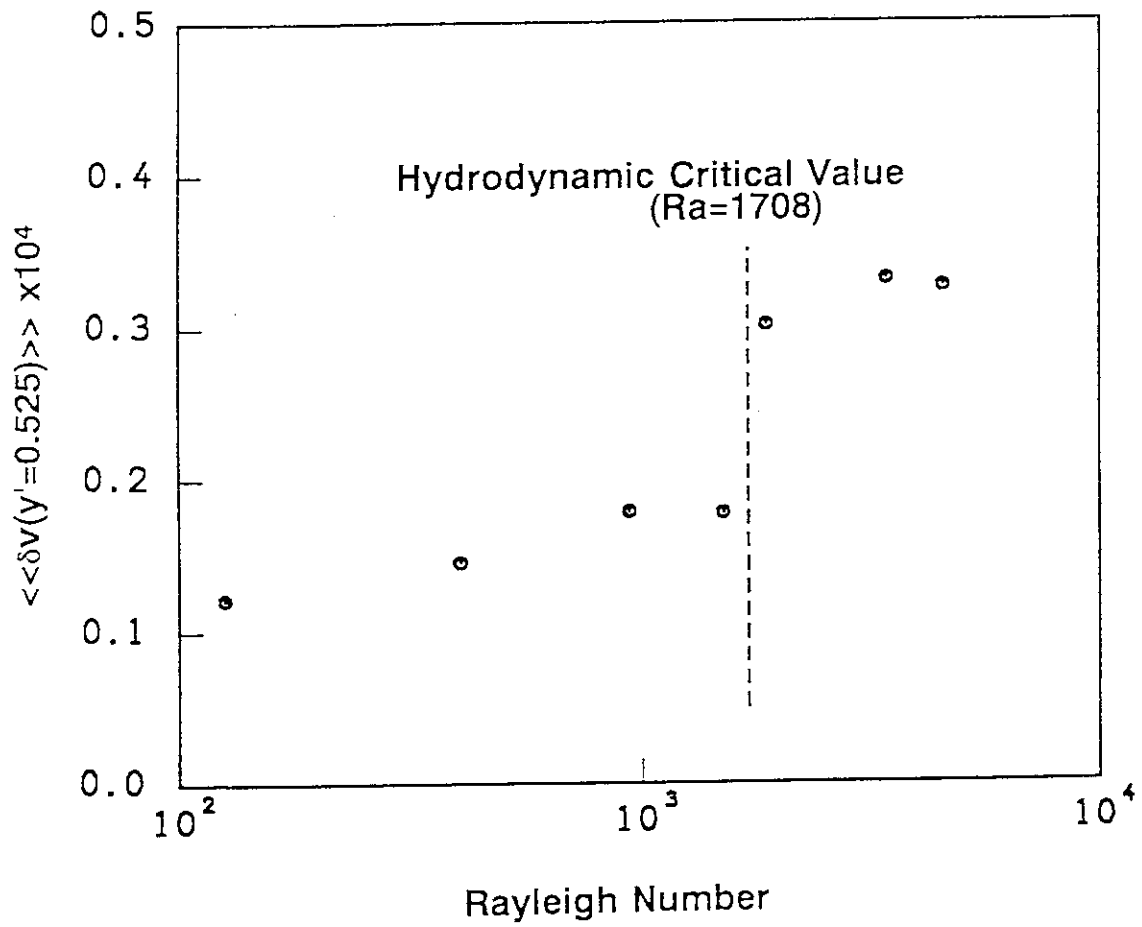


Fig.21:
Integrated correlation function for the vertical velocity fluctuation.

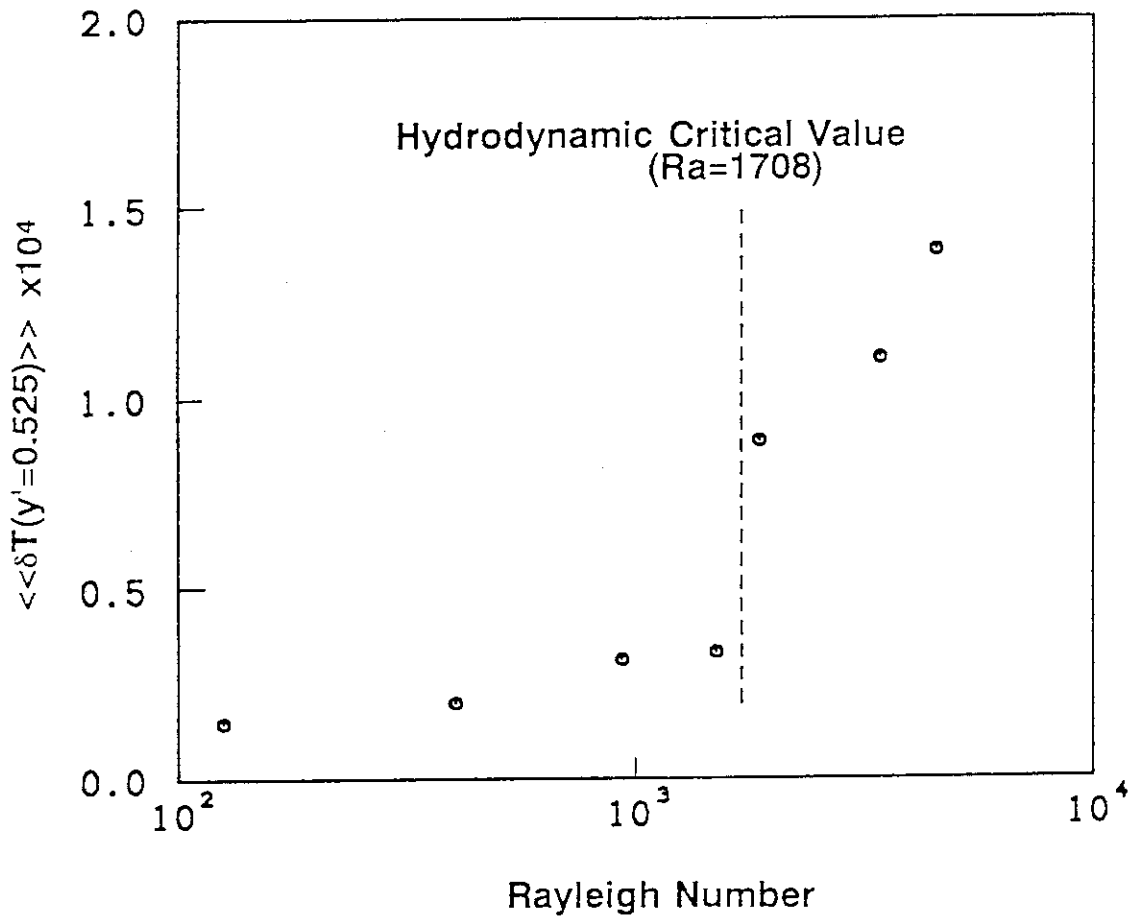


Fig.22:
Integrated correlation function for the temperature fluctuation.

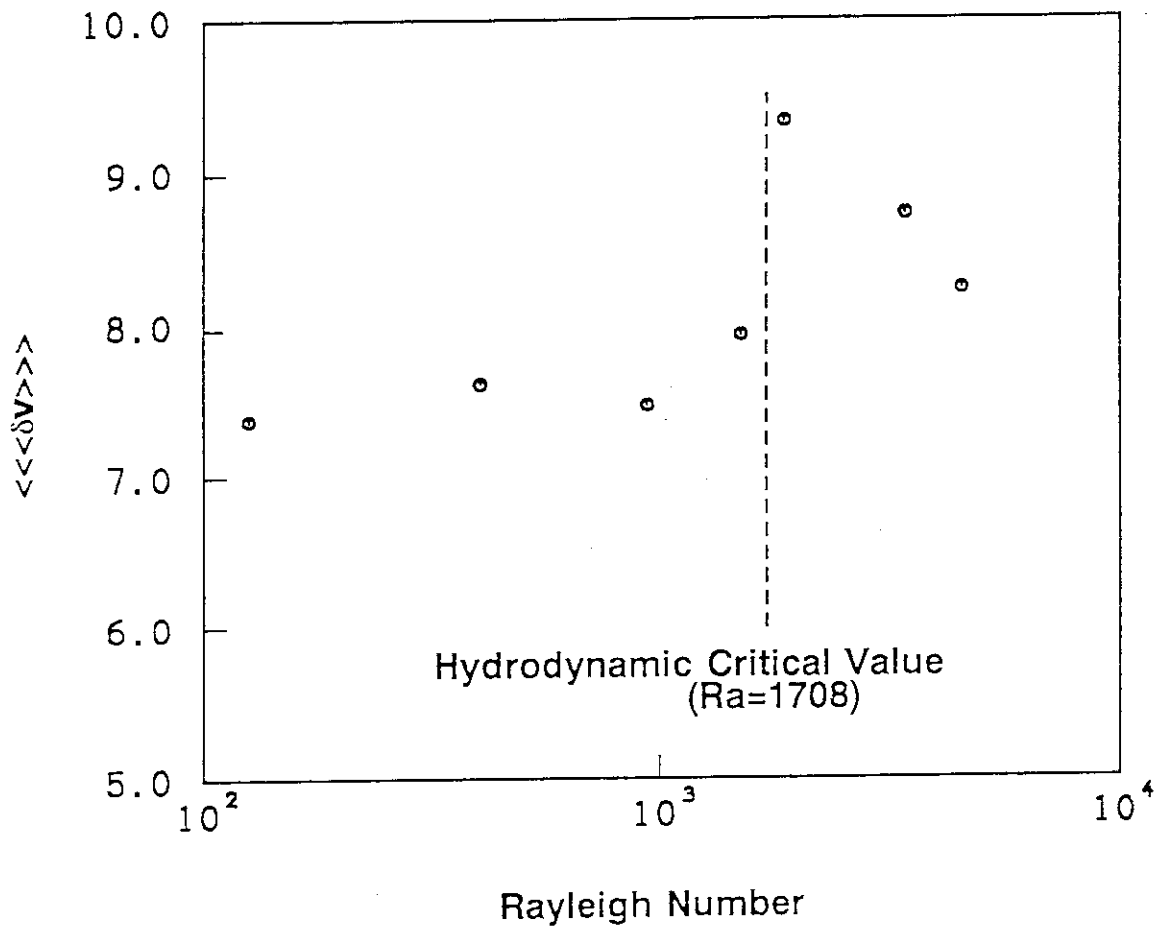


Fig.23:
Characteristic length for the vertical velocity fluctuation.

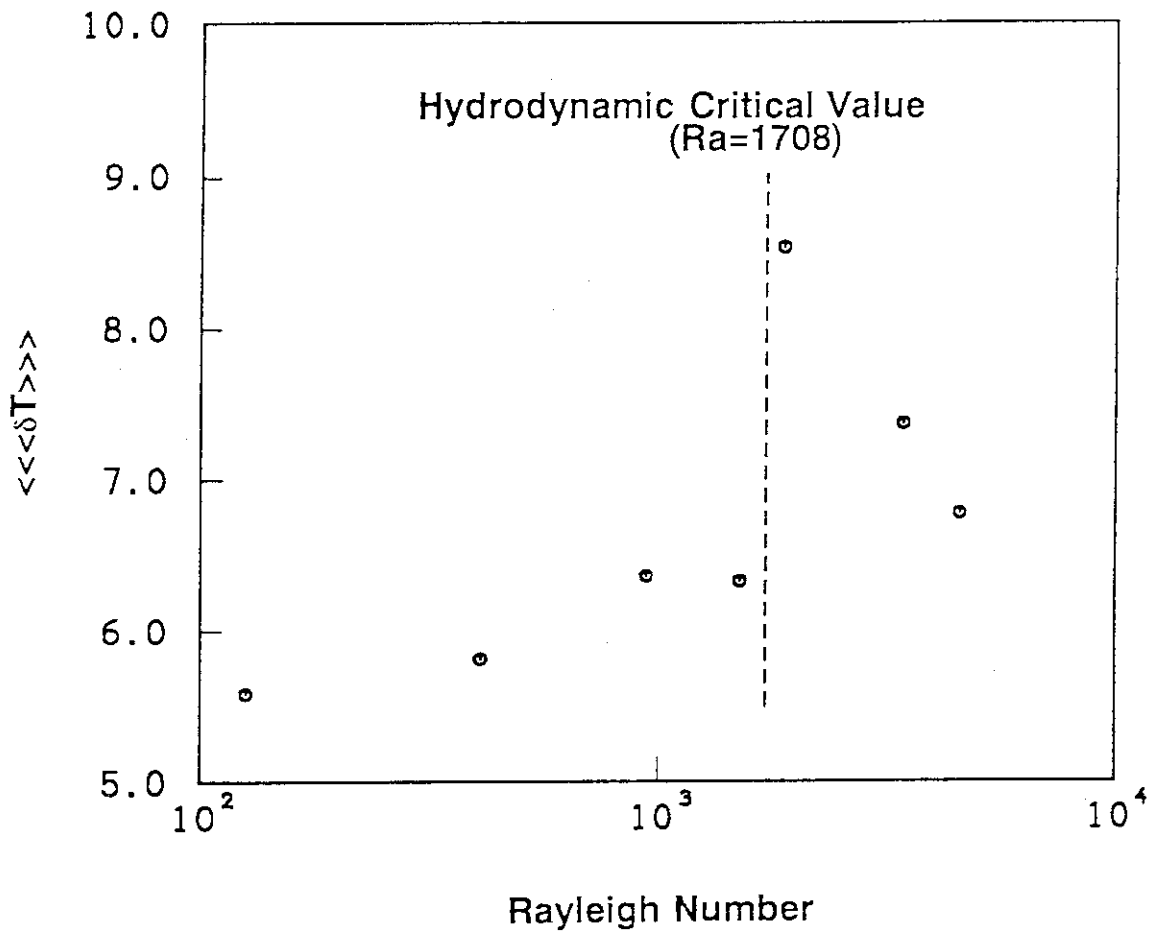


Fig.24:
Characteristic length for the temperature fluctuation.

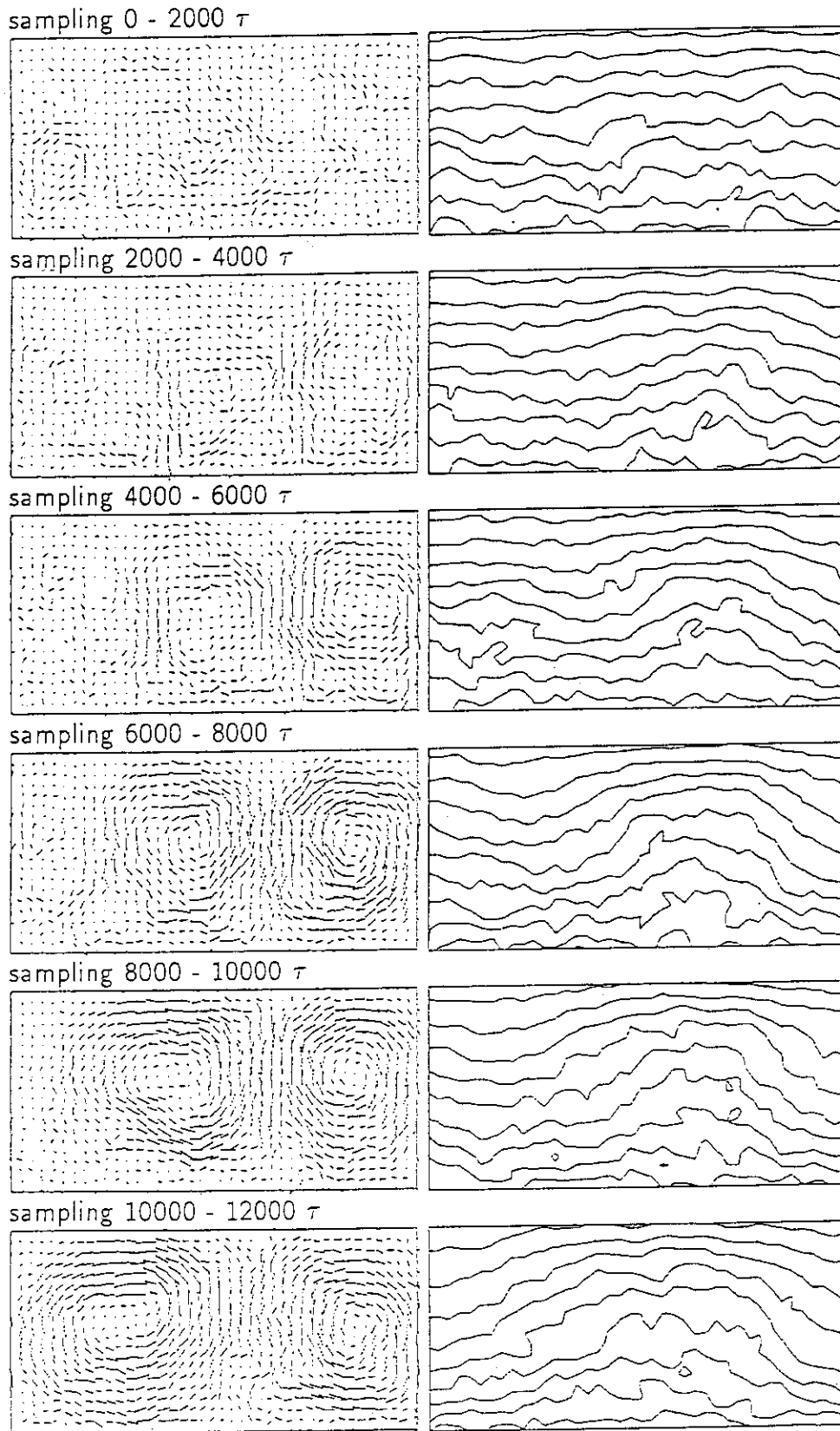


Fig.25:
 Typical transient flow fields for a convection state. The bottom wall temperature is 600 K. Velocity and temperature fields obtained by sampling during 2000 τ period (40000 time steps) are in the left and right columns, respectively.

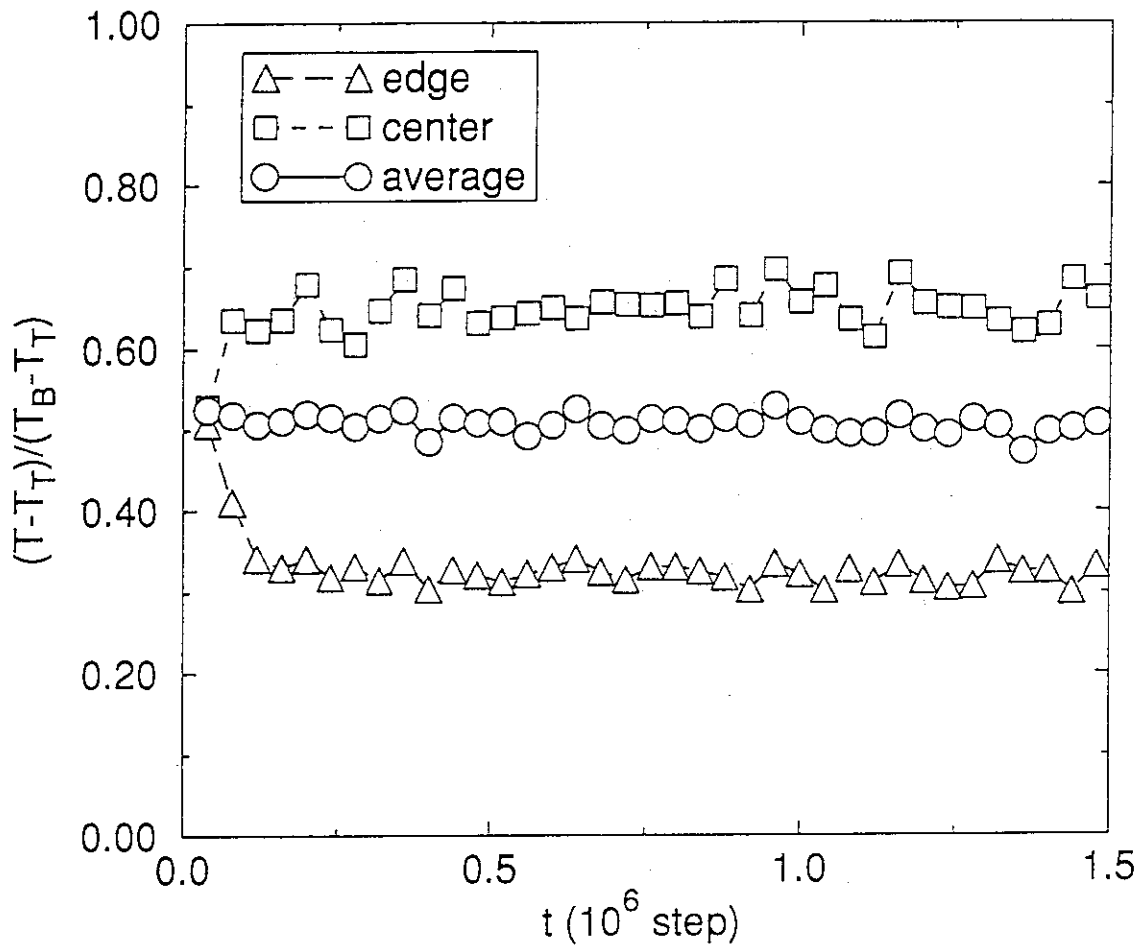


Fig.26:

Time development of the mid-elevation temperatures near the side wall and at the center. The horizontal average temperature is also shown. T_T and T_B denote the temperatures of the top and bottom walls, respectively.

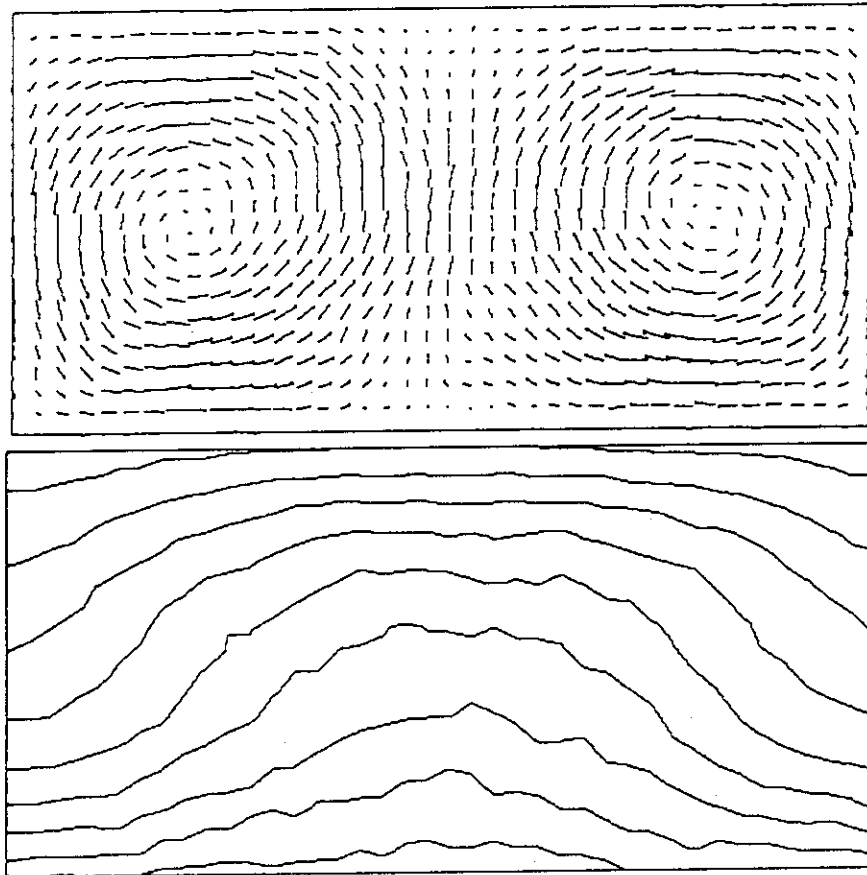


Fig.27:
Velocity and temperature fields after stable convection rolls are established.

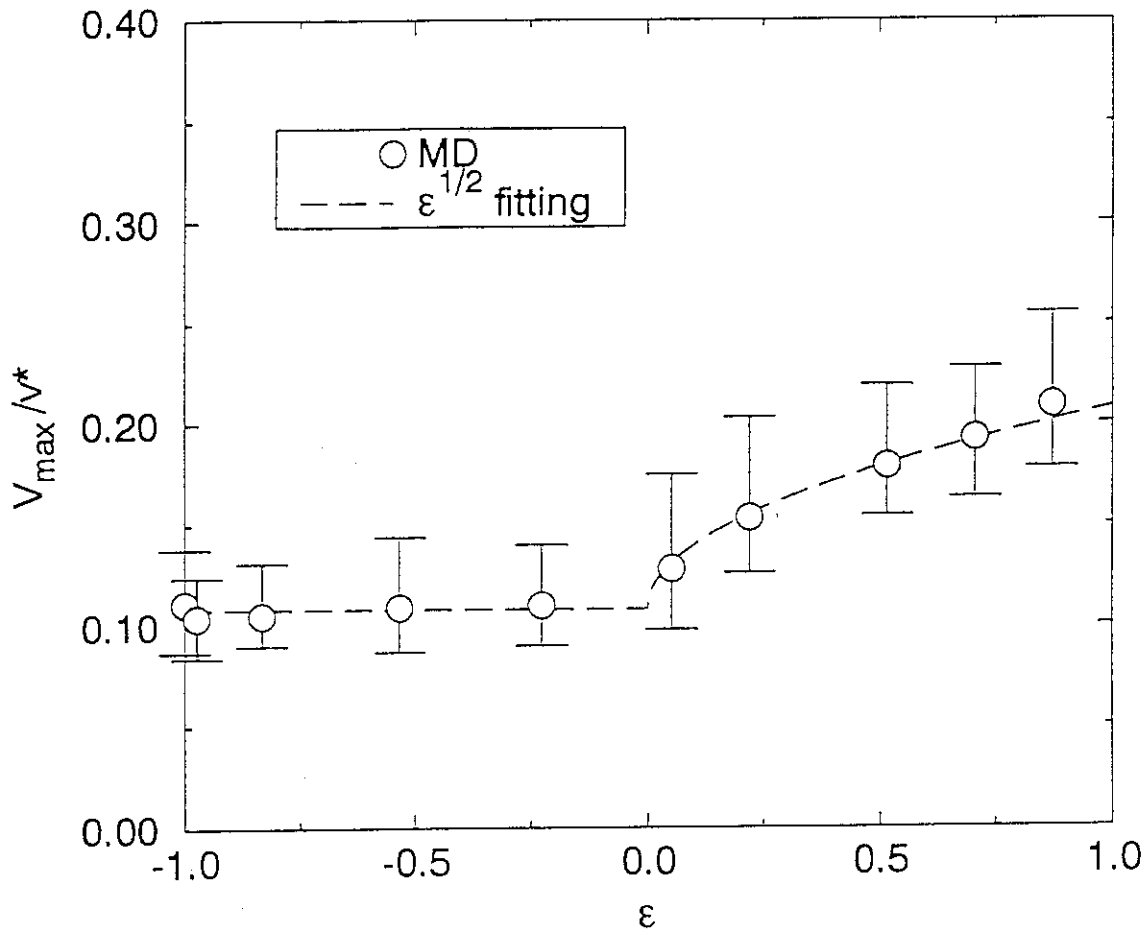


Fig.28:

The maximum flow velocity vs the parameter, $\epsilon = (Ra - Ra_c)/Ra_c$, where the critical Rayleigh number (Ra_c) is determined from a fit of $\epsilon^{1/2}$. The data points (\circ) show a long-time average in the steady state, and the error bars indicate the range of data distributions. A fit of $\epsilon^{1/2}$ is also shown.

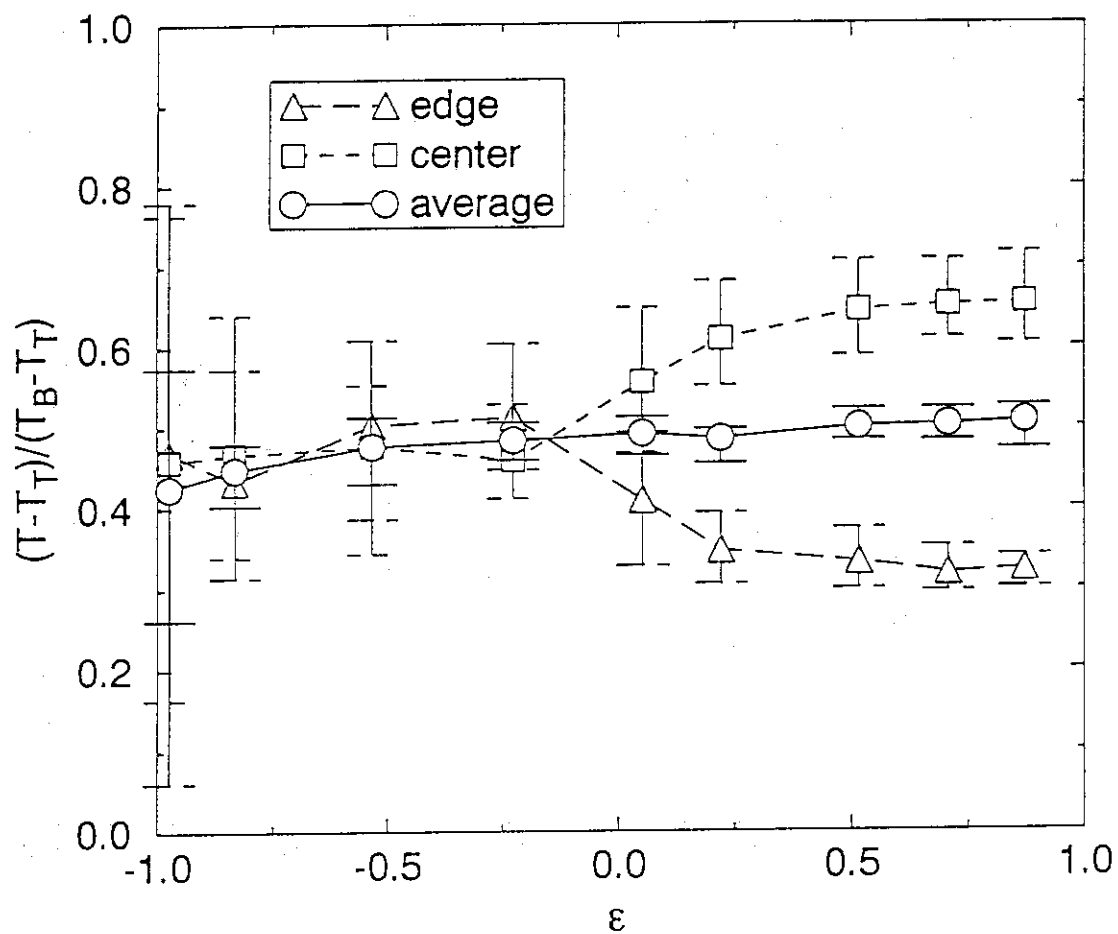


Fig.29:

Midelevation temperature in the steady state as a function of ϵ . The temperatures near the side wall (edge) and at the center (center) are shown along with the horizontal average (average).

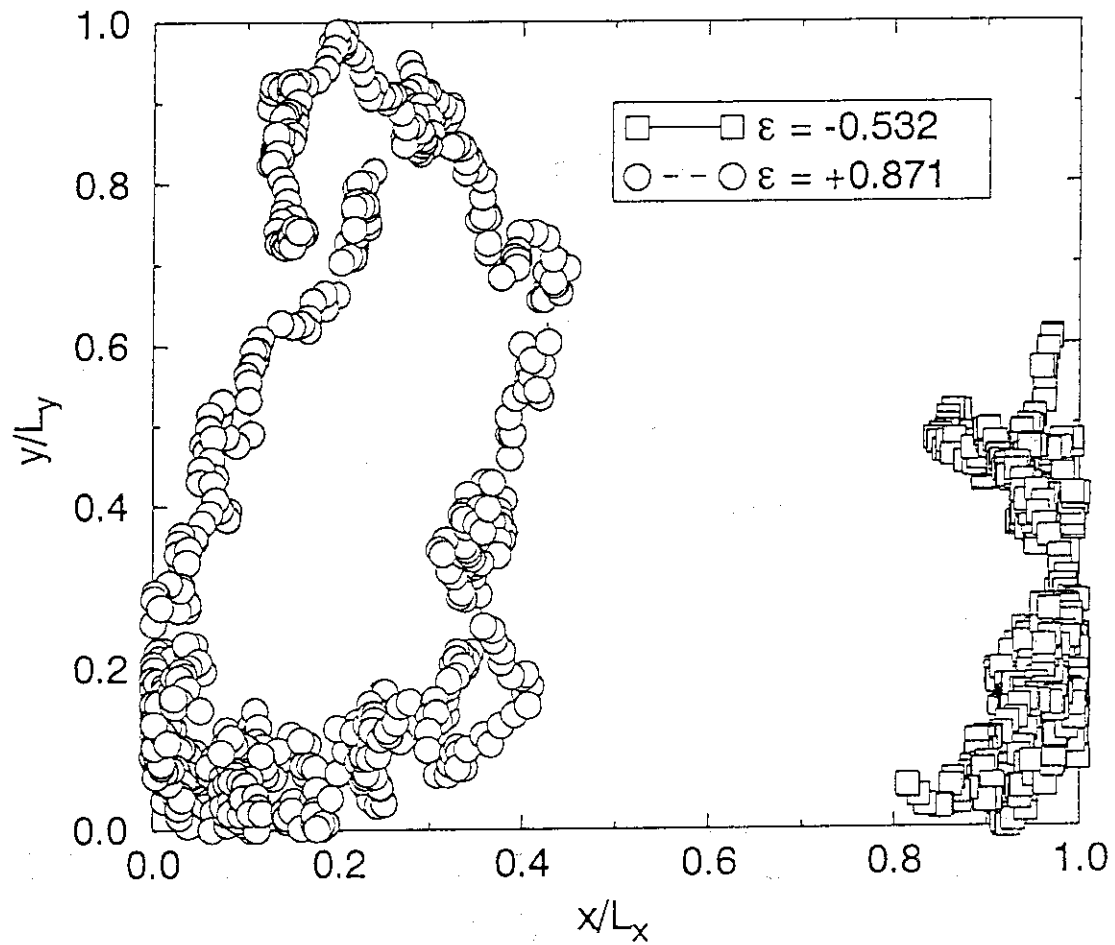


Fig.30:

Typical trajectories of atoms in the physical plane over 0.12×10^6 time steps (6000τ) in the steady state of the macroscopic flow field.

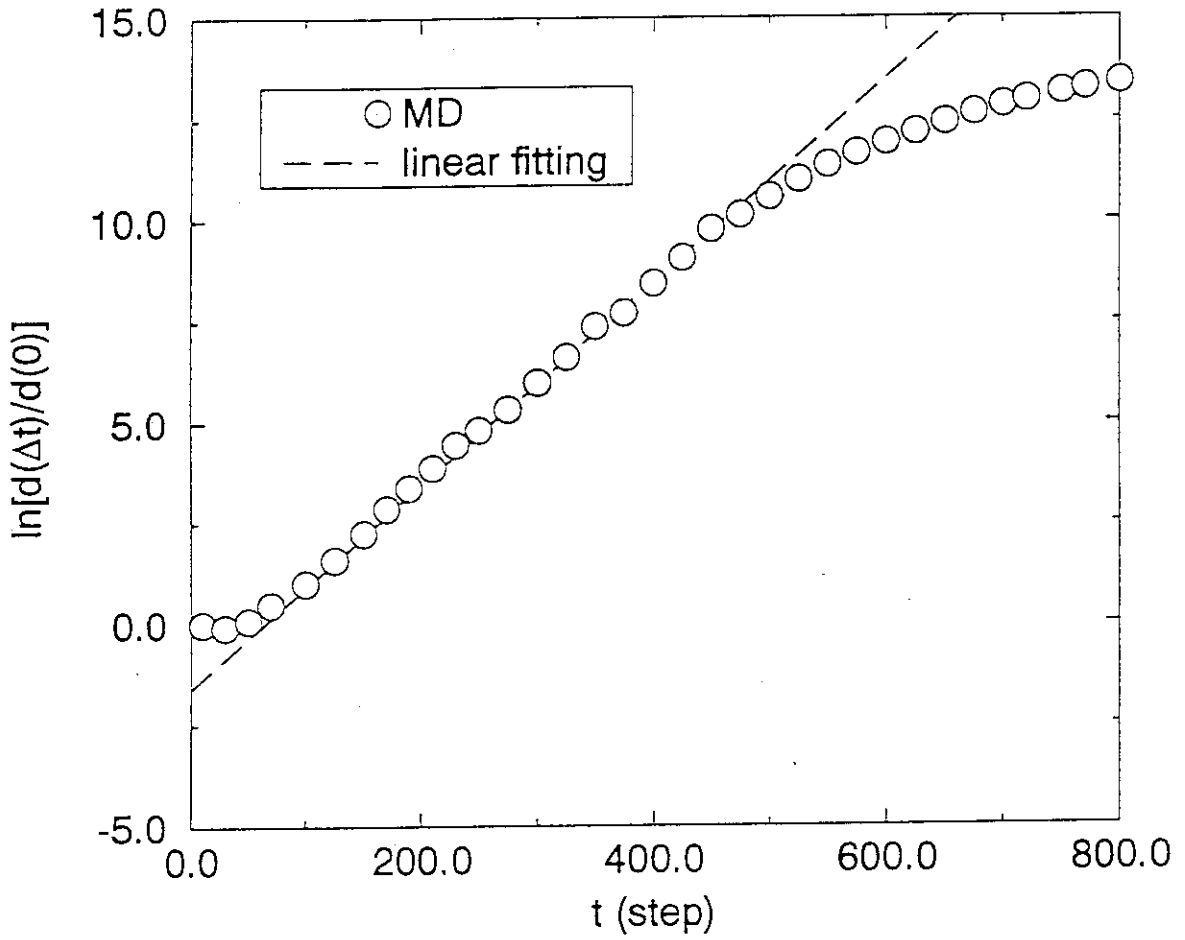


Fig.31:

Typical growth rate of the separation distance between two trajectories in the phase space for $\varepsilon = 0.053$. A linear fit is also shown.

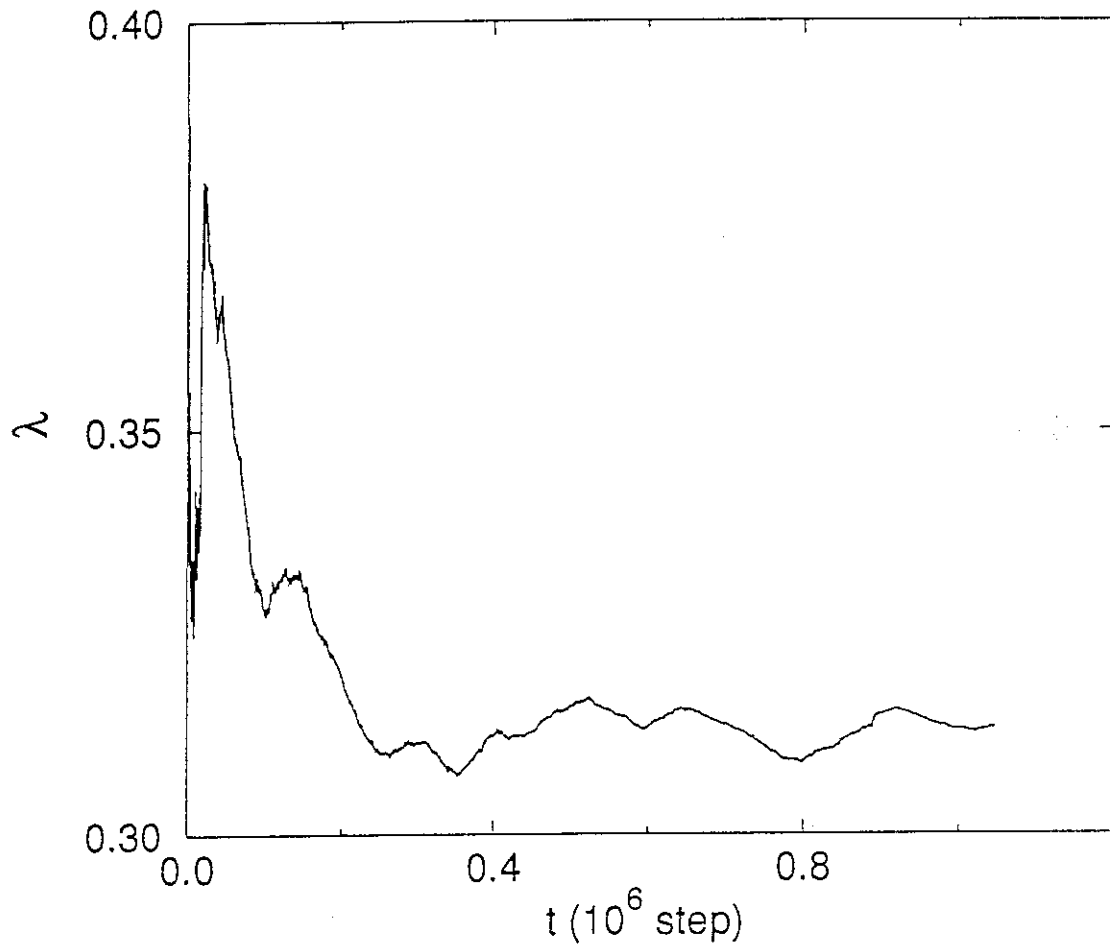


Fig.32:
Typical convergence history of the Lyapunov exponent for $\varepsilon = 0.516$.

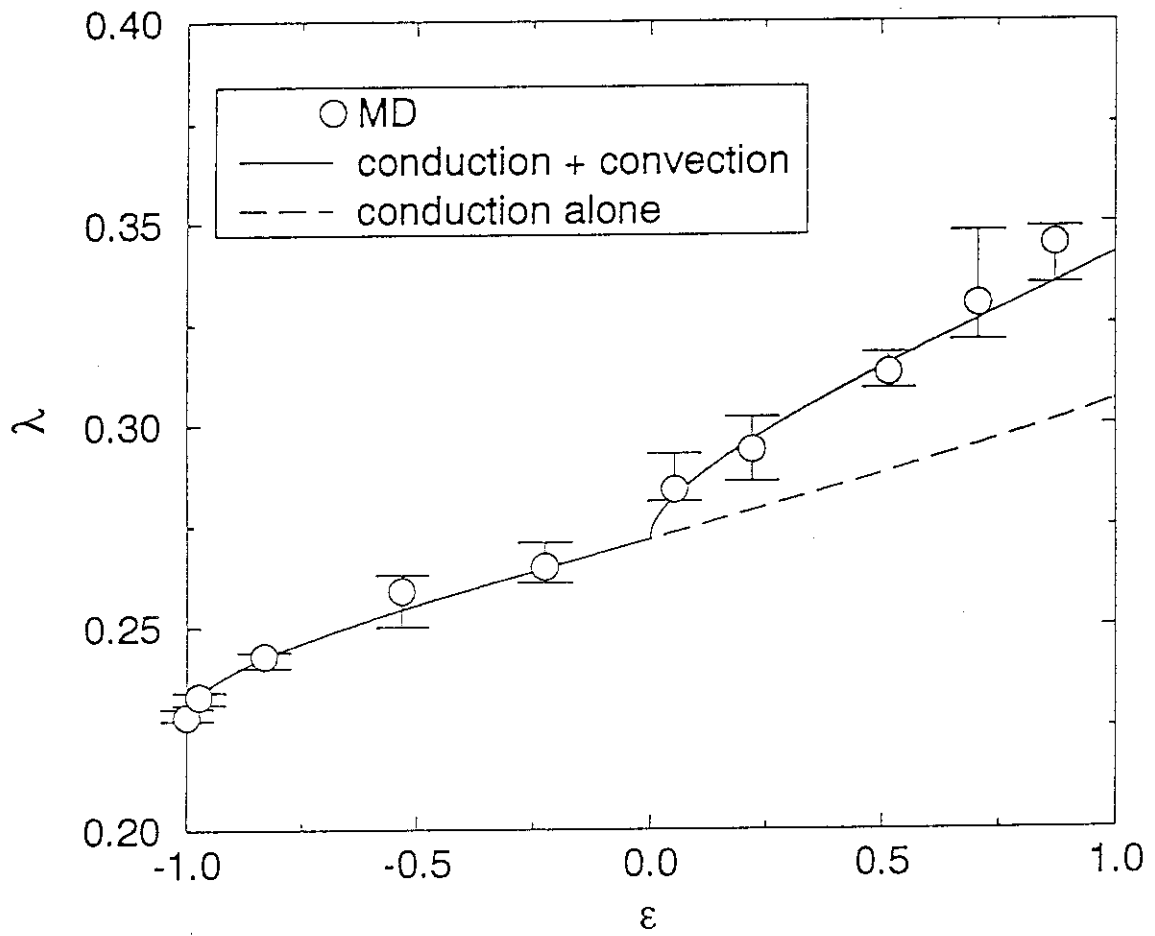


Fig.33:
Lyapunov exponents as a function of ϵ .