

地球流体力学

計算機実験集

余田 成男

2002年 3月 24日

第 1 章

線型移流・拡散

1 次元の線型移流拡散方程式を解析的に解き、その時間発展を図示する。時間発展の様子を見ることで、移流および拡散についての理解を深めよう。

1.1 理論的背景

1 次元の線型移流拡散方程式を考える：

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (1.1)$$

ここで、 $u = u(x, t)$ である。すなわち、ある物理量 u が 1 次元空間の位置座標 x と時刻 t の関数であるとする。また、 c は移流速度、 κ は拡散係数で、 c, κ ともに一定であるとする。 u が運動量の場合、その拡散は粘性である (κ が粘性係数)。係数 c, κ がゼロかそうでないかによって、この方程式は次の 3 通りに分けられる：線型移流 ($c \neq 0, \kappa = 0$)、拡散 ($c = 0, \kappa \neq 0$)、移流・拡散 ($c \neq 0, \kappa \neq 0$)。

1.1.1 線型移流

方程式 (1.1) で $\kappa = 0$ とする：

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (1.2)$$

ここで、初期条件を $u(x, 0) = \varphi(x)$ とすれば、この方程式の解析解は、

$$u(x, t) = \varphi(x - ct), \quad (1.3)$$

である。これは、 $c > 0$ の場合、 x 軸の正の方向に形を変えずに一定速度 c で進行する解である。

1.1.2 拡散

方程式 (1.1) で $c = 0$ とすると、拡散方程式になる：

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (1.4)$$

及川 (1997) を教科書にして、初期条件 $u(x, 0) = \varphi(x)$ ($-\infty < x < \infty$) の下でこの方程式を解く。

まず、変数分離法により特解を求める。 $u(x, t) = X(x)T(t)$ と変数分離すると、(1.4) 式より $X(x)T'(t) = \kappa X''(x)T(t)$ であるから、

$$\frac{T'(t)}{\kappa T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)}, \quad (1.5)$$

となる。左辺は t のみ、右辺は x のみの関数であるから、これらはある定数に等しくなければならない。その定数を、 $-\lambda^2$ とすると、

$$\begin{cases} T'(t) + \kappa \lambda^2 T(t) = 0, \\ X''(x) + \lambda^2 X(x) = 0, \end{cases} \quad (1.6)$$

となる。ゆえに、

$$T(t) = e^{-\kappa \lambda^2 t}, \quad (1.7)$$

である。このとき、 $X''(x) + \lambda^2 X(x) = 0$ が恒等的に 0 でない解を持つならば、 $u(x, t) = e^{-\kappa \lambda^2 t} X(x)$ が恒等的に 0 でない特解である。ところが、境界条件がない ($-\infty < x < \infty$) ため、この方程式の固有値を求めることが不可能である。よって固有関数は次のようにしか表せない：

$$X(x) = A(\lambda) \cos \lambda x + B(\lambda) \sin \lambda x, \quad (1.8)$$

ここで、 $A(\lambda), B(\lambda)$ は λ の関数であることに注意。ゆえに、特解は、

$$u(x, t) = e^{-\kappa \lambda^2 t} (A(\lambda) \cos \lambda x + B(\lambda) \sin \lambda x), \quad (1.9)$$

となる。固有値がないので特解の足し合わせは積分となり、 $\lambda > 0$ とすれば、 $t \geq 0$ のとき、

$$u(x, t) = \int_0^\infty e^{-\kappa \lambda^2 t} (A(\lambda) \cos \lambda x + B(\lambda) \sin \lambda x) d\lambda, \quad (1.10)$$

となる。ここで初期条件 $\varphi(x)$ について、フーリエの定理を使うと、

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\lambda \int_{-\infty}^\infty \varphi(\xi) \cos \lambda(x - \xi) d\xi, \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \left\{ \cos \lambda x \int_{-\infty}^\infty \varphi(\xi) \cos \lambda \xi d\xi + \sin \lambda x \int_{-\infty}^\infty \varphi(\xi) \sin \lambda \xi d\xi \right\} d\lambda, \end{aligned} \quad (1.11)$$

である。また、 $t = 0$ のとき、(1.10) は、

$$u(x, 0) = \int_0^\infty \{A(\lambda) \cos \lambda x + B(\lambda) \sin \lambda x\} d\lambda, \quad (1.12)$$

となる。 $u(x, 0) = \varphi(x)$ であるから、式 (1.11) と (1.12) を比較すると、

$$A(\lambda) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty \varphi(\xi) \cos \lambda \xi d\xi, \quad B(\lambda) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty \varphi(\xi) \sin \lambda \xi d\xi, \quad (1.13)$$

である。これらを (1.10) に代入して変形すると次の解が得られる：

$$u(x, t) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\xi) \left\{ \int_0^{\infty} e^{-\kappa \lambda^2 t} \cos \lambda(x - \xi) d\lambda \right\} d\xi. \quad (1.14)$$

さらに、関係式

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha \lambda^2} \cos \beta \lambda d\lambda = \sqrt{\frac{\pi}{4\alpha}} e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha}}, \quad (\alpha > 0), \quad (1.15)$$

を用いて変形すると、(1.14) 式は最終的に次のようになる：

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\kappa t}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\xi) \exp \left[-\frac{(x - \xi)^2}{4\kappa t} \right] d\xi, \quad (t > 0). \quad (1.16)$$

この被積分関数は、振幅が $\varphi(\xi)$ のガウス関数である。初期に $\varphi(\xi)$ であった ξ 成分は、時間とともに分布幅が広がり振幅が減少する。つまり、 $u = u(x, t)$ は $t \rightarrow \infty$ としたとき 0 に漸近することになる。結局、初期値として与えた任意の u 分布は、拡散により時間の発展とともにいたるところで一樣になろうとする。時間発展により拡散する割合は、拡散係数 $\kappa (> 0)$ の大きさに依存している。

1.1.3 移流・拡散

方程式 (1.1) をもう一度書いておく：

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (1.17)$$

まず、解析解を求めるにあたって、次の座標変換を行なう：

$$\begin{cases} X = x - ct, \\ T = t. \end{cases} \quad (1.18)$$

(X, T) は、一定速度 c で動く移動座標系である。 $U(X, T) = u(x, t)$ とすると、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial U}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = -c \frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial U}{\partial T}, \quad (1.19)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial U}{\partial X} \frac{\partial X}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial U}{\partial X}, \quad (1.20)$$

である。同様に、

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 U}{\partial X^2}, \quad (1.21)$$

であるので、これらを (1.17) 式に代入すると、

$$\frac{\partial U}{\partial T} = \kappa \frac{\partial^2 U}{\partial X^2}, \quad (1.22)$$

を得る。すなわち、移流拡散方程式 (1.17) は移動座標系でみると拡散方程式となる。拡散方程式の解は式 (1.16) で与えられるので、

$$U(X, T) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\kappa T}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\xi) \exp \left[-\frac{(X - \xi)^2}{4\kappa T} \right] d\xi, \quad (1.23)$$

となる。ゆえに、これを (x, t) 座標に戻して、(1.17) の解は、

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\kappa t}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\xi) \exp \left[-\frac{(x - ct - \xi)^2}{4\kappa t} \right] d\xi, \quad (1.24)$$

となる。移動座標系でみると拡散方程式になることから明らかなように、この解は、 $c > 0$ の場合には、拡散しながら x 軸正の方向に一定速度 c で進行する解である。

1.2 標準実験

まず、実験条件設定ファイル `expar1.data` を編集する。パラメータ `ijk` で初期値の関数形を選ぶ。サイン関数 (`ijk=1`)、ステップ関数 (2)、コーン型関数 (3) が用意されている。 `amp` は初期値の大きさ (最大値)、 `rc` は移流速度、 `rkappa` は拡散係数である。これらの値を適当に与えて、 `euler1` を実行するだけで、対応する時間発展解のグラフが表示される。それぞれについてパラメータを変えて実行を繰り返し、その違いを見ることで、移流および拡散について理解を深めよう。

例 1：移流 (`euler1` 用 `expar1.data`)

```
3      4.0    4.0    0.0    ' 移流 (拡散なし) '
ijk    amp    rc    rkappa
```

例 2：拡散 (`euler1` 用 `expar1.data`)

```
3      4.0    0.0    4.0    ' 拡散 (移流なし) '
ijk    amp    rc    rkappa
```

例 3：移流拡散 (`euler1` 用 `expar1.data`)

```
3      4.0    4.0    4.0    ' 移流拡散 '
ijk    amp    rc    rkappa
```

例 1 では、移流速度、初期値、あるいはその最大値を変えて実行し、違いを見てみよう。次に、例 2 で拡散の様子を見てみよう。拡散係数や初期値を変えて実行し、拡散がどのような性質を持つかを考えてみよう。さらに、例 3 では移流しながら拡散する様子を見てみよう。 `rc` と `rkappa` の相対的な大きさによって結果はどのようなになるか。また、自然界で移流・拡散が重要な現象としてどのようなものがあるか考えてみよう。

1.3 発展

拡散方程式 (1.4) で、 x が区間 $[x_1, x_2]$ に限られ、 u の境界条件として、 $u(x_1, t) = u_1$ 、 $u(x_2, t) = u_2$ が与えられたとき、解 $u(x, t)$ はどうなるか？ 初期値は $u(x, 0) = \varphi(x)$ とする。

同様に、境界条件として、 $\partial u(x_1, t)/\partial x = u'_1$ 、 $\partial u(x_2, t)/\partial x = u'_2$ が与えられたとき、解 $u(x, t)$ はどうなるか？

一般に、前者をディリクレ型境界条件、後者をノイマン型境界条件と呼んでいる。

参考文献

及川 正行, 1997: 「偏微分方程式」, 理工系の基礎数学 4, 岩波書店, 254pp.

第 2 章

非線型移流・拡散

1 次元の非線型移流拡散問題を数値的に解き、移流・拡散の雰囲気を経験する。とくに、前章で調べた線型解と対比させることにより非線型移流の特徴をつかみ、Burgers 方程式の時間発展解の雰囲気を経味わう。

2.1 理論的背景

2.1.1 非線型移流方程式

流体中で空間的に一方向にのみ変化する波動、いわゆる平面波が有限振幅である状況を考える (巽, 1982; 第 10.2 節参照)。変化の方向を x 軸にとる。流体の粘性や熱伝導性、圧力勾配等を無視すると、運動方程式は、

$$\frac{Du}{Dt} = 0, \quad (2.1)$$

となる。ラグランジュ微分をオイラー的に書けば、(2.1) 式は

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (2.2)$$

となる。 $x-t$ 平面を考えると、(2.2) 式の解は、 $Dx/Dt = u$ の線上で、 u = 一定である。進行速度は波の部分によって異なり、 u の大きいところでは大きく、小さいところでは小さい。したがって、波形 $u(x, t)$ は、正勾配 $\partial u / \partial x > 0$ の発散領域では時間が経つにつれて次第に緩やかな勾配になり、逆に負勾配 $\partial u / \partial x < 0$ の収束領域では次第に急な勾配になる。このような波はとどまるところを知らないから、ついには図 2.1 に示すように負勾配が無限大となり、それ以降は正勾配となって 3 価の領域が発生する。このような領域では、解はもはや物理的意味を持たないから、方程式 (2.2) は少なくとも負の無限大の勾配の発生以降は現象を正しく記述し得ない。この物理的矛盾の原因は粘性等を無視したためである。

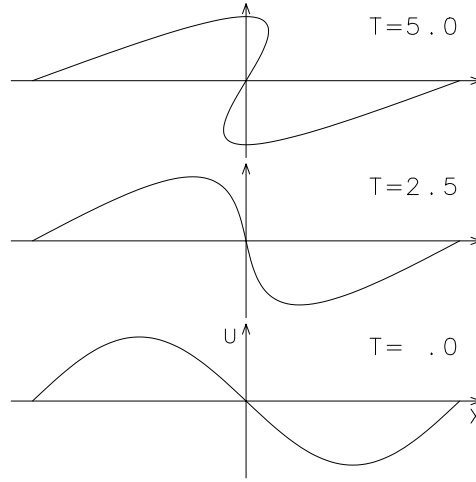


図 2.1: 有限振幅波の変形. 初期に正弦波であったものが時間とともに波形を変えていく.

2.1.2 Burgers 方程式

方程式 (2.2) で粘性項を陽に考える :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}. \quad (2.3)$$

方程式 (2.3) は, 非線型性と散逸性を兼ね備えた方程式であり, **Burgers 方程式**という (巽, 1982; 第 10.3 節参照). Burgers 方程式 (2.3) の解は解析的に求ることができる. (2.3) 式は, Hope(1950) および Cole(1951) による変換,

$$u = -2\nu \frac{\partial}{\partial x} \log \theta, \quad (2.4)$$

$$\theta(x, t) = \exp \left[-\frac{1}{2\nu} \int^x u(x', t) dx' \right], \quad (2.5)$$

によって,

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2}, \quad (2.6)$$

に帰着される. これは $\theta(x, t)$ に対する拡散方程式である. (2.6) 式の一般解は,

$$\theta(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\nu t}} \int_{-\infty}^{\infty} \theta(x', 0) \exp \left[-\frac{(x - x')^2}{4\nu t} \right] dx', \quad (2.7)$$

で与えられる (第 1.1.2 節参照). ここで $\theta(x, 0)$ は初期条件を表す. したがって, Burgers 方程式 (2.3) の一般解は,

$$u = -2\nu \frac{\partial}{\partial x} \log \left(\frac{1}{\sqrt{4\pi\nu t}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{1}{2\nu} \left\{ \frac{(x - x')^2}{2t} + U(x') \right\} \right] dx' \right), \quad (2.8)$$

$$U(x) = \int^x u(x', 0) dx', \quad (2.9)$$

である.

2.2 標準実験

2.2.1 非線型移流方程式

非粘性の場合 ($\nu = 0$) について, (2.2) 式を数值的に解く. すなわち, 適当な初期条件 $u(x, 0)$ を与えて時間発展させる. まず, 実験条件設定ファイル `expar2.data` を編集して `rnu` の値を 0 とし, `euler2` を実行する. 時間が経つにつれて波が突っ立ち, ついには崩壊してしまう様子をみてみよう.

例 1: 非線型移流 (`euler2` 用 `expar2.data`)

```
1      4.0      0.0      ' 拡散なし: 有限時間で破綻 '
ijk    amp    rnu
```

このとき, 波の崩壊は数値解の破綻に起因したものであり, 数値解として意味があるものではない. 拡散項をゼロとした実験でも振幅が若干減衰するのは, 数値解法に起因する「拡散」のためである. とくに, 上流差分など精度の悪い解法ではこの数値拡散が著しい (堀之内 (1996) を参照のこと).

`amp` の値をいろいろ変えて実験し, 移流速度の大きさにより破綻の起こる時刻が変化することを確認しよう. また, 実験パラメータ `ijk` で初期値の関数形を変えて, サイン関数 (`ijk=1`), ステップ関数 (2), コーン型関数 (3) によって, 波形がどのような時間変化をするか見ておこう.

2.2.2 Burgers 方程式

つぎに, `rnu` の値がゼロでないとして, Burgers 方程式 (2.3) の世界を覗いてみよう.

例 2: Burgers 方程式 (`euler2` 用 `expar2.data`)

```
1      4.0      4.0      ' 移流拡散 (Burgers) '
ijk    amp    rnu
```

波が突っ立つにつれて局所的に拡散項が大きくなり, 破綻することなく時間経過するパラメータ領域がある. `amp` と `rnu` の相対比によってどのような違いになるかを見てみよう.

2.3 発展

1 次元非線型移流拡散問題の差分解法を解説したものに堀之内 (1996) がある. 彼の演習プログラムを本実験集の付録につける (`comp-GFD/demo/horinout/numflx/`). README の指示に従って `make` し, 実行するだけで, さまざまな数値解法を経験できる. 各種パラメータを変えて実験を繰り返せば, それぞれの長所短所を実践的に体得できよう. KdV 方程式でソリトンの衝突を観察する例題なども含まれている.

2.4 ノート

この数値実験では時間積分には4次のルンゲクッタギル法を使用し、空間差分には4次の中央差分を用いている。このスキームの安定性を調べると、 $\nu > 7$ で不安定となることがわかる (西澤, 1999)。ただし、差分法の安定性については、堀之内 (1996) を参考にして調べた。

参考文献

- Cole, J., 1951: On a quasi-linear parabolic equation occurring in aerodynamics. *Q. Appl. Math.*, **9**, 225-236.
Hopf, E., 1950: The partial differential equation $u_t + uu_x = u_{xx}$. *Commun. Pure Appl. Math.*, **3**, 201-230.
堀之内 武, 1996: 課題演習 D5 ノート & プログラム.
西澤 誠也, 1999: Burgers 方程式の数値計算に関するメモ.
巽 友正, 1982: 「流体力学」, 培風館, 453pp.

第 3 章

変形と回転—ラグランジュ的認識

定常な 2 次元の流れ場の中に置いた多粒子群が時間とともに移流されていく様子を見る。流体塊が変形していく過程が変形速度テンソルによって決まっていることを実感する。

3.1 理論的背景

3.1.1 流体の変形

流れ場が時間的に変化しない定常流の場合、流速を $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ とすると、流体粒子の運動方程式は、

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}), \quad (3.1)$$

で与えられる。これを時間積分すれば、流体粒子の動きを追うことができる。得られる粒子運動の解軌道を $\mathbf{x}(t)$ としよう。ここで、 $\mathbf{x}(t)$ から少しだけ離れた粒子の軌道の時間発展を考える (水田, 1999; p.5-8)。この微小な変位を $\mathbf{y}(t)$ とすると、その時間発展は、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\mathbf{x}(t) + \mathbf{y}(t)) &= \mathbf{u}(\mathbf{x}(t) + \mathbf{y}(t), t), \\ &= \mathbf{u}(\mathbf{x}(t), t) + (\nabla \mathbf{u})^T \mathbf{y}(t) + O(\mathbf{y}^2), \end{aligned} \quad (3.2)$$

で与えられる。これから (3.1) 式を減じ、 $O(\mathbf{y}^2)$ 項を無視して局所的に線型化すると、

$$\frac{d\mathbf{y}(t)}{dt} = J(\mathbf{x}(t))\mathbf{y}(t), \quad (3.3)$$

となる。ここで J は \mathbf{u} の $\mathbf{x}(t)$ におけるヤコビアン

$$J = (\nabla \mathbf{u})^T = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \frac{\partial u_1}{\partial x_2} & \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x_1} & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \\ \frac{\partial u_3}{\partial x_1} & \frac{\partial u_3}{\partial x_2} & \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

で、変形速度テンソルとよばれる。この J の性質を調べるにより、連続体の変形の様子を知ることができる。

3.1.2 2次元流体の変形—固有値解析による考察—

2次元流体中における変形を J の場合分けによって調べる。一般に 2×2 行列は、対角化を試みると次の3つの場合にわかれる：

$$A: \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \mu \end{pmatrix}, \quad B: \begin{pmatrix} a & -b \\ b & a \end{pmatrix}, \quad C: \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 1 & \lambda \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

これに基づいて、流れ場を次のように分類できる。

A : J が対角化でき、実固有値をもつ場合

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

$$y_1 = y_1(t_0)e^{\lambda t}, \quad y_2 = y_2(t_0)e^{\mu t}. \quad (3.7)$$

- A_1 : $\lambda = \mu$ のとき、点 x は焦点 (focus) である。
- A_2 : λ と μ が同符号のとき、点 x は結節点 (node) である。
- A_3 : λ と μ が異符号のとき、点 x は鞍点 (saddle) である。

B : 固有値が共役複素数の場合

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & -b \\ b & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

$$(y_1, y_2)^T = (y_1(t_0), y_2(t_0))^T e^{(a+ib)t}. \quad (3.9)$$

- B_1 : $a \neq 0$ のとき、点 x は渦状点 (spiral) である。
- B_2 : $a = 0$ のとき、点 x は渦心点 (center) である。

C : 対角化不可能な場合

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 1 & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

- C_1 : $\lambda \neq 0$ のとき、点 x は変格結節点 (improper node) である。
- C_2 : $\lambda = 0$ のとき、点 x は単純シア (simple shear) である。

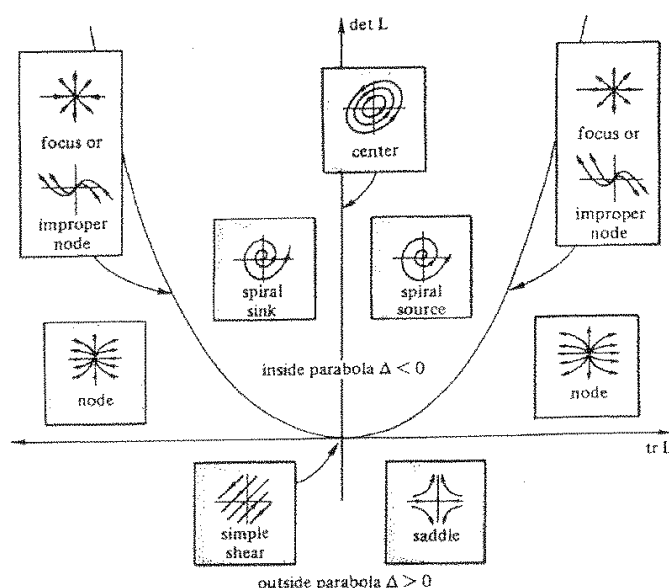


図 3.1: 変形速度テンソルによる流れの分類. Ottino(1989; Fig.E2.5.2, p.27) より.

固有値方程式の判別式 $\Delta = (\text{tr} J)^2 - 4\det J$ をもとに、これらの分類を整理できる。すなわち、 A は $\Delta \geq 0$ 、 B は $\Delta < 0$ 、 C は $\Delta = 0$ の場合である。これらの関係を、 $\text{tr} J$ 、 $\det J$ を両軸とする 2 次元平面上に示したのが図 3.1 である。まず、 $\text{tr} J = \sum \partial u_i / \partial x_i$ なので、 y 軸上が非発散の流れであり、それより右では流れは発散的、左では収束的である。原点を通る放物線は $\Delta = 0$ の曲線を示している。この線上は焦点 (A) か変格結節点 (C) であり、原点が単純シア (C) になる。この線より上では $\Delta < 0$ であり、渦状点か渦心点である。一方、線より下では $\Delta > 0$ であり、この領域のなかで x 軸より上 ($\det J > 0$) が結節点、下 ($\det J < 0$) が鞍点である。

3.1.3 歪み速度テンソルと回転を表すテンソル

異 (1995; p.43-48) に基づいて、さらに変形速度テンソルの考察を続ける。

前小節でみたように運動による変形効果は変形速度テンソル $\nabla u = \partial u_i / \partial x_j$ によって表される。これを対称成分と非対称成分に分けると、

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = e_{ij} + \omega_{ij}, \quad (3.11)$$

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.12)$$

$$\omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.13)$$

となる。 e_{ij} は局所的変形を伴うので歪み速度テンソルという。一方、 ω_{ij} は局所的変形を伴わない剛体的な回転変位をもたらす。

歪み速度テンソルの対角成分 $e_{ii} = \partial u_i / \partial x_i$ ($i = 1, 2, 3$) は x_i 軸方向の伸縮歪み速度を表す。また、対角和

$$\sum_i e_{ii} = \sum_i \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \operatorname{div} \mathbf{u}, \quad (3.14)$$

は体積歪み速度を表す。これは伸縮変形による体積の変化率である。2次元の運動では伸縮歪みによる面積変化を表すことになる。一方、非対角成分 e_{ij} は x_i 軸と x_j 軸の間の角の変化速度を表し、これをずれ歪み速度という。

変形速度テンソルの反対称成分 ω_{ij} はベクトル $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ とエディントンの記号 ϵ_{ijk} を用いて

$$\omega_{ij} = -\frac{1}{2} \sum_k \epsilon_{ijk} \omega_k, \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (3.15)$$

$$\omega_k = -\sum_i \sum_j \epsilon_{ijk} \omega_{ij}, \quad (3.16)$$

と書くことができる。この式はまた

$$\omega_k = -\frac{1}{2} \sum_i \sum_j \epsilon_{ijk} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (3.17)$$

と書けるが、これはベクトル形式で

$$\boldsymbol{\omega} = \operatorname{rot} \mathbf{u}, \quad (3.18)$$

となる。 $\boldsymbol{\omega}$ は速度 \mathbf{u} の回転成分であり渦度とよばれる。回転角をベクトル $\boldsymbol{\theta}$ で表すと、(3.18) 式は、

$$\boldsymbol{\omega} = 2\dot{\boldsymbol{\theta}}, \quad (3.19)$$

である。渦度 $\boldsymbol{\omega}$ は変位ベクトル \mathbf{r} の回転角速度の2倍であり、 $\boldsymbol{\omega}$ の各座標成分 $(\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ は各座標軸のまわりの回転角速度の2倍に等しい。

3.2 標準実験

線型な流れ場および回転軸対称な流れ場を与えて、流体塊が変形していく様子を見てみよう。

3.2.1 線型流

定常で線型な流れ場を考える：

$$u(x, y) = u_0 + \frac{du}{dx}x + \frac{du}{dy}y, \quad v(x, y) = v_0 + \frac{dv}{dx}x + \frac{dv}{dy}y, \quad (3.20)$$

ここで、 $u_0, \frac{du}{dx}, \frac{du}{dy}, v_0, \frac{dv}{dx}, \frac{dv}{dy}$ はそれぞれ定数である。線型な流れ場なので、流体の変形の特徴はどこも同じであり、流体塊の大きさにも依らない。すなわち、(3.3) 式が厳密に成り立っている。

実験条件設定ファイル `expar1.data` で各定数を与える。`lagra1` を実行すると、初期に円状に配置した流体粒子群を時間的に追跡できるので、流体塊が変形していく様子を観察できる。

例 1：一様流 (lagra1 用 expar1.data)

10.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	’ 一様流 ’
u0	dudx	dudy	v0	dvdxdx	dvdxdy	

この場合、変形速度テンソルの全成分が 0 である。流体の歪み、回転はなく、非発散流なので面積の変化もない。流体塊は初期の円形を保ちながら一定速度 u_0 で x 軸に沿って流されていく。

例 2：発散流 (lagra1 用 expar1.data)

0.0	0.05	0.0	0.0	0.0	0.05	’ 焦点 ’
u0	dudx	dudy	v0	dvdxdx	dvdxdy	

第 3.1.2 節の固有値による分類に従うと、この場合の原点は焦点に対応する。変形速度テンソルを歪み速度テンソルと回転を表すテンソルに分けると、後者は 0 なので回転はない。歪み速度テンソルの対角成分 e_{ii} により、 x 軸、 y 軸方向にそれぞれ $dudx$, $dvdxdy$ で伸縮歪みが起きる。 $\text{div} u \neq 0$ であり、この値で流体塊の面積が変化する。 $dudx$ と $dvdxdy$ を同符号で異なる値にすると、原点は結節点になる。

例 3：変形場 (lagra1 用 expar1.data)

0.0	0.05	0.0	0.0	0.0	-0.05	’ 鞍点：非発散の場合 ’
u0	dudx	dudy	v0	dvdxdx	dvdxdy	

固有値による分類では、原点は鞍点に対応する。歪み速度テンソルおよび回転を表すテンソルは例 2 と同じだが、非発散のため面積変化率が 0 である。流体塊は面積を一定に保ったまま、 x 軸、 y 軸方向に伸縮歪みが起きる。また、 $dvdxdy$ の大きさを変えて、発散のある場合の鞍点の様子も見ておこう。

例 4：回転変位 (lagra1 用 expar1.data)

0.0	0.05	-0.15	0.0	0.15	0.05	’ 渦状点 ’
u0	dudx	dudy	v0	dvdxdx	dvdxdy	

歪み速度テンソルおよび回転を表すテンソルともに 0 でなく、回転しながら発散する流れである。 $dudx$ と $dvdxdy$ が 0 ならば非発散で渦心点となる。初期の円形は保たれ続ける。

例 5：単純シア (lagra1 用 expar1.data)

0.0	0.0	0.15	0.0	0.0	0.0	’ 単純シア ’
u0	dudx	dudy	v0	dvdxdx	dvdxdy	

単純シアの場合、変形速度テンソルを歪み速度テンソルと回転を表すテンソルに分けると、

$$\nabla u = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial y} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial y} \\ -\frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial y} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

となる。歪み速度テンソルの非対角成分 e_{ij} は x 軸と y 軸の間の角の変化速度を表しており、 x - y 平面に垂直な方向 (z 軸) の回りにずれ歪みが起きる。一方、回転を表すテンソルの非対角成分 ω_{ij} は、(3.20) 式より x - y 平面に垂直な方向の回りに角速度 $\frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial x}$ で回転することを表す。非発散流であるため面積の変化はない。

3.2.2 回転軸対称流

2次元非圧縮流で渦度が円内に一様に分布している状況「ランキンの結合渦」を考える (巽, 1982; p.188-199). 渦領域の半径を a , 渦度 (の垂直成分) を ω とし, 流れの場を回転対称として流れ関数を半径 r だけの関数と考える. このとき, 速度場は円周速度成分 $v_\theta(r)$ のみを持ち, 半径 r の値によって次のようになる:

$$v_\theta = \begin{cases} \frac{\omega r}{2} & (r \leq a), \\ \frac{\omega a^2}{2r} & (r > a). \end{cases} \quad (3.22)$$

実験条件設定ファイル `expar2.data` の `omega`, `edge` で, ω と a を与える. `lagra2` を実行すると, 初期に正形状に配置した流体粒子群を時間的に追跡できるので, 流体塊が変形していく様子を観察できる. また, `xoffst`, `yoffst` で流体塊 (正方形) の初期位置 (x, y) 座標を陽に指定できる.

例6: 剛体回転渦領域 (`lagra2` 用 `expar2.data`)

```
0.15    200.0    50.0    0.0    , 剛体回転,
omega   edge    xoffst  yoffst
```

渦領域内 ($r < a$) では, 速度を直交直線座標 (x, y) で表すと $\mathbf{u} = (-\frac{\omega r}{2} \sin \theta, \frac{\omega r}{2} \cos \theta) = (-\frac{\omega}{2}y, \frac{\omega}{2}x)$ となる. ここで $r = (x^2 + y^2)^{1/2}$ である. $\text{div} \mathbf{u} = 0$ であるので, 非発散流である (2次元非圧縮を仮定して流線関数を導入したので, 当然そうである). 第3.1.2節の固有値による分類に従うと, $\text{tr} J = 0$, $\det J > 0$, $\Delta < 0$ より, この場合の原点は渦心点に対応する. 変形速度テンソルを歪み速度テンソルと回転を表すテンソルに分けると, 歪み速度テンソルの成分は全て0, ω_{ij} の非対角成分が残るので, 歪みは全く存在せず x - y 平面に垂直な方向 (z 軸) の回りに一定角速度 $\frac{\omega}{2}$ の剛体回転を行なう.

例7: 渦領域の外側 (`lagra2` 用 `expar2.data`)

```
0.15    50.0    50.0    0.0    , ランキン渦,
omega   edge    xoffst  yoffst
```

渦領域の外側 ($r > a$) では, 速度を直交直線座標で表すと $\mathbf{u} = (-\frac{\omega a^2}{2r} \sin \theta, \frac{\omega a^2}{2r} \cos \theta) = (-\frac{\omega a^2}{2r^2}y, \frac{\omega a^2}{2r^2}x)$ となる. $\text{tr} J = 0$, $\det J < 0$, $\Delta > 0$ であり, 鞍点に対応する. 変形速度テンソルは,

$$\nabla \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \frac{\omega a^2}{r^4}xy & \frac{1}{2} \frac{\omega a^2}{r^4}(y^2 - x^2) \\ \frac{1}{2} \frac{\omega a^2}{r^4}(y^2 - x^2) & -\frac{\omega a^2}{r^4}xy \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

と変形できる. 右辺第1項の歪み速度テンソルの各項が x, y に依存した値をもつ. 対角成分 (e_{ii}) から, x 軸, y 軸方向へ伸縮歪みが起き, x - y 平面内に r^{-2} に比例した歪みが存在する. また回転については, e_{ij} 成分から流体は z 軸の回りに歪みを伴う回転運動を行なうが, $\omega_{ij} = 0$ より渦度は z 軸自身を除いて0である. また非発散流であるから, 流体塊の面積変化はない.

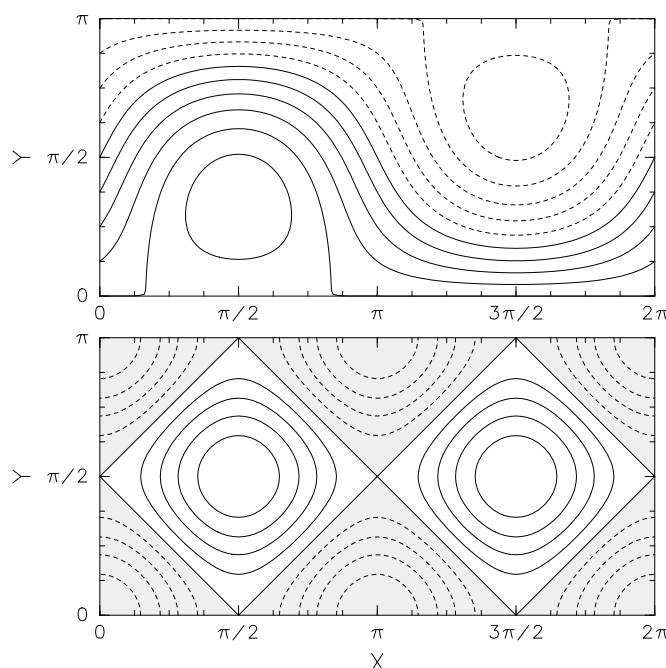


図 3.2: ロスビー波をイメージした 2 次元非発散流 (上) と $\det J$ の分布 (下). 陰影部は $\det J < 0$ 領域.

3.3 発展

前節の線型な流れ場では、領域のどこでも変形速度テンソルが同じであった。しかし、現実の流れは変形速度テンソルが空間的・時間的に複雑に変化しているのが普通である。ここでは、Pierrehumbert(1991) がカオス的混合の論文で取り上げた、ロスビー波をイメージした 2 次元非発散流で流体塊の変形の様子を調べよう。

流れ関数を $\psi(x, y) = A \sin k_1 x \sin l_1 y - u_0 y$ とする (図 3.2 上)。このとき、速度は、

$$\begin{cases} u(x, y) = -\frac{\partial \psi}{\partial y} = -Al_1 \sin k_1 x \cos l_1 y + u_0, \\ v(x, y) = \frac{\partial \psi}{\partial x} = Ak_1 \cos k_1 x \sin l_1 y. \end{cases} \quad (3.24)$$

である。非発散流なので $\text{tr} J = 0$ である。また、 $\det J = -\cos^2 x \cos^2 y + \sin^2 x \sin^2 y$ であり、場所によって渦心点 ($\det J > 0$)、単純シア ($\det J = 0$)、あるいは鞍点 ($\det J < 0$) となる (図 3.2 下)。 $y = 0, \pi$ 上の淀み点のまわりでは流体塊の変形が卓越し、一方、正負の渦域では流体塊の回転が卓越する。

変形速度テンソルは、

$$\nabla \mathbf{u} = \begin{pmatrix} -\cos x \cos y & 0 \\ 0 & \cos x \cos y \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sin x \sin y \\ -\sin x \sin y & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

であり、歪み速度テンソルの対角成分 e_{ij} 、回転を表す ω_{ij} の非対角成分がともに残って、それぞれの位置に依存した x 軸、 y 軸方向への伸縮と角速度 $\sin x \sin y$ での回転が見られる。

実験条件設定ファイル `expar3.data` で、初期円の位置 (`px, py`)、初期円の半径 (`pr`)、背景の一樣流速 (`u0`)

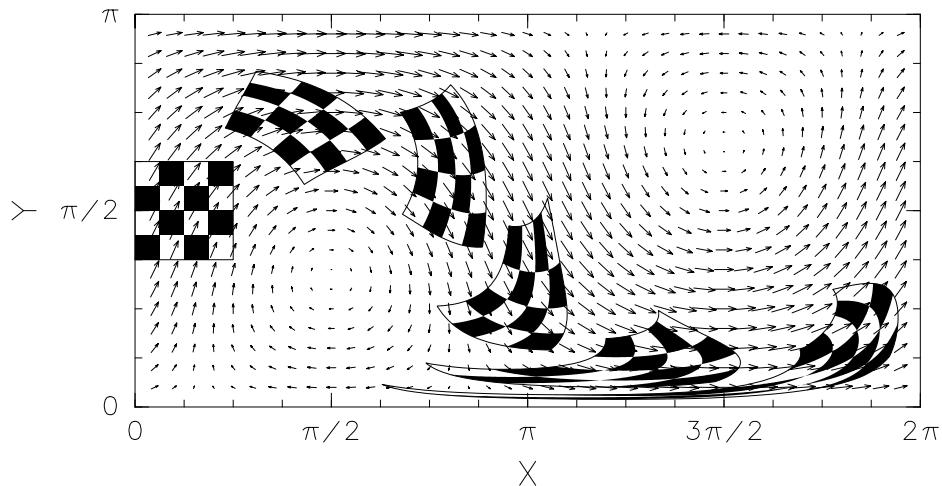


図 3.3: ロスピー波をイメージした 2 次元非発散流中におけるチェッカーフラッグパターンの変形.

を与えて, `lagra3` を実行すると, 初期に円状に配置した流体粒子群を時間的に追跡できるので, 流体塊が変形していく様子を観察できる.

例 8: 蛇行ジェット (`lagra3` 用 `expar3.data`)

```
0.9      1.6      0.1      0.5      ' 蛇行ジェット: ジェットの縁から淀み点へ '
px      py      pr      u0
```

初期には流体塊はほとんど歪みを受けずにジェット流に流されて行く. やがて, 変形の卓越する領域に入り, 激しい変形をうける. 初期円をジェットの中央付近や渦領域に置いて, 場所による違いを見てみよう.

例 9: 渦列 (`lagra3` 用 `expar3.data`)

```
0.1      1.6      0.1      0.0      ' 渦列: 周辺部 '
px      py      pr      u0
```

背景の一樣流速 (u_0) を 0 として同様の実験を行ない, 前例と比較しよう.

例 10: チェッカーフラッグ模様 (`lagra4` 用 `expar4.data`)

```
0.41      1.56      0.7854  0.5      ' 蛇行ジェット: ジェットの中央付近 '
xoffst  yoffst  rlen      u0
```

同じ 2 次元非発散流でチェッカーフラッグ模様をつけた流体塊を追跡し, 変形の様子を調べよう (図 3.3). 実験条件設定ファイル `expar4.data` を編集して, `lagra4` を実行すれば良い. 条件を変えて実験することにより, 流れ場と変形の関係を実感しよう.

3.4 ノート

Weiss(1990) は, 変形速度テンソルを $A = \nabla \mathbf{u}$ として $\text{tr} A^2$ によって流れ場を分類した. $\text{tr} A^2 > 0$ の場合は, 運動は双曲型で, 流体塊の変形が卓越する. 一方, $\text{tr} A^2 < 0$ の場合には, 運動は楕円型となり, 流体塊の回転が卓越する.

$$\text{tr} A^2 = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \cos^2 x \cos^2 y - \sin^2 x \sin^2 y = -\det J, \quad (3.26)$$

なので, 第 3.1.2 節での分類と全く対応する. すなわち, 双曲型が鞍点に, 楕円型が渦心点にあたる.

参考文献

- 水田 亮, 1999: 成層圏周極渦を想定した準周期的な流れにおけるカオスの混合. 京都大学大学院理学研究科 修士論文, 60 pp.
- Ottino, J., 1989: *The kinematics of mixing: Stretching, chaos, and transport*. Cambridge University Press, 364 pp.
- Pierrehumbert, R.T., 1991: Large-scale horizontal mixing in planetary atmospheres. *Phys. Fluids A*, **3**, 1250-1260.
- 巽 友正, 1982: 「流体力学」, 培風館, 453pp.
- 巽 友正, 1995: 「連続体の力学」, 岩波書店, 334pp.
- Weiss, J., 1990: The dynamics of enstrophy transfer in two-dimensional hydrodynamics. *Physica D*, **48**, 273-294.

第 4 章

ブラウン運動—ストカスティック強制による粒子拡散

ラグランジュ的な粒子運動が決定論的に決まるのではなく、確率論的 (stochastic) に決まる状況を実際に計算する。ブラウン運動として知られる内容である。乱数列で与えられる強制によって運動する少数あるいは多数の粒子群を追跡する。

4.1 歴史的経緯

ブラウン運動の発見と研究について、小林 (1983; 第 2-8 節) に基づきまとめる。

スコットランドの植物学者で植物の細胞核の発見者としてもよく知られている R.Brown は、液体中に浮かんだ花粉を顕微鏡で観察している際に、花粉から出た微粒子がふらふらと乱雑な運動をしていることを発見した。1827 年のことである。彼はこの花粉の微粒子の運動を個々の生きた細胞の運動と考えた。しかし、まもなく、無機物質の微粒子や墨の溶液中での炭の微粒子の運動も同じような振る舞いを示すことがわかり、この運動は単に巨大な分子の熱運動に過ぎないことがフランスの L.G.Gouy により確かめられた。実際、この運動の速度は媒質の液体の粘性係数が小さいほど大きく、また浮遊粒子の大きさが小さいほど大きく、さらに温度が高いほど大きいことが示された。1905 年には A.Einstein によって、また 1906 年には M.von Smoluchowski によって、この運動に対する熱分子運動論が展開された。

4.2 モデル

ブラウン運動を記述する基本的なモデルには、ランジュヴァンモデルとランダム変位モデルがある。ランジュヴァンモデルでは、ラグランジュ速度のランダムな変化を時間積分することによって、粒子の軌跡が定義される。一方、ランダム変位モデルでは、粒子の軌跡がランダムな変位ベクトルの和によって定義される。

99/06/01 金尾 学・水田 亮, 99/06/02 余田 成男

ここでは、ランジュヴァンモデルを考える。Langevin は、1908 年に次のような方程式を導入し、ブラウン運動の解析を行った (Rodean, 1996; Section 2.1)。ブラウン粒子が外力の作用なしに運動し、受ける力は完全にランダムである場合を考える。ブラウン粒子は、平均としては速度に比例する粘性 (レーリー摩擦) を受けるが、各瞬間でみると、このほかに媒質分子との衝突によるランダムな力を受ける。すなわち、ブラウン運動の運動方程式として、次のような定式化ができる：

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -a_1\mathbf{u} + b\xi(t), \quad (4.1)$$

ここで、 t は時刻、 \mathbf{u} はブラウン粒子の速度、 a_1 は粒子に働く粘性に関する係数である。 b とランダム関数 ξ の積は分子の衝突によるブラウン粒子の不規則な加速の成分をあらわす。Langevin はこの式から次のような結果を導いた：

- $t \ll 1/a_1$ ならば、粒子の変位の 2 乗平均は t^2 に比例する。
- $t \gg 1/a_1$ ならば、粒子の変位の 2 乗平均は t に比例する。

このような結果は、物質の拡散現象と密接な関係をもっている。

後の研究では、ランジュヴァンの方程式 (4.1) に、重力場や電場による加速の項がつけ加えられた：

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \mathbf{a}_0 - a_1\mathbf{u} + b\xi(t), \quad (4.2)$$

ここでは、ランジュヴァン方程式 (4.2) を差分化し、数値的に発生させた乱数列を用いて、ブラウン運動の実験を行なう。 i 番目の時刻における、あるブラウン粒子の速度を \mathbf{u}_i とし、(4.2) 式を次の差分式で表現する：

$$\mathbf{u}_{i+1} = \mathbf{u}_i + (\mathbf{a}_0 - a_1\mathbf{u}_i + b\xi_i)\Delta t, \quad (4.3)$$

ここで、ランダム関数 ξ_i は、 i 番目の正規乱数である。また、ブラウン粒子の位置 \mathbf{x}_i は、後方差分で与えられるとする：

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \mathbf{u}_{i+1}\Delta t. \quad (4.4)$$

4.3 標準実験

まず、brown1 で個々の粒子について時間発展を行ない、それぞれの軌跡を追ってみる。実験条件設定ファイル `expar1.data` を編集して `a_0` と `a_1` の値を 0 とし、重力場や電場による加速項がなく粘性も働かない状況から始めよう。

例 1：ブラウン運動軌跡 (brown1 用 `expar1.data`)

```
0.0      0.0      1.0      1      , ブラウン運動：基本形'
a_0      a_1      b        iseed
```

6 個の粒子の軌跡を見比べてみる。グラフが表示されたウインドウ内でマウスをクリックすると、別の乱数列を使った結果が次々と表示される (10 例)。定常外力がある場合、レーリー摩擦がある場合など、`a_0` と `a_1`

の値をいろいろ変えて、軌跡の違いを観察しよう。各粒子は外力の方向に移動しながらランダムな運動をしていることがわかる。iseed としてゼロでない整数を与えると別の乱数列ができる。

各粒子はそれぞれ全く独立に、ランダムな軌跡を描くことがわかる。このような粒子運動は、ひとつ手前の時刻における状態にしか依存せず、さらに過去の状態にまで依存することはない。このような確率過程をマルコフ過程という（例えば、北原 (1997); 第 4-6 節）。

次に、brown2 で 3000 個の粒子群がどのように動くか見てみよう。初期条件として、ある大きさの円内に乱数を用いて一様に粒子を分布させている。やはり、a_0 と a_1 の値を 0 として、基本的な状況から見てみよう。

例 2：粒子拡散 (brown2 用 expar2.data)

```
0.0      0.0      1.0      1      10      , ブラウン運動：基本形'
a_0      a_1      b      iseed  istep
```

個々の粒子がランダムな運動をする結果、初期に局在していた粒子群は次第に空間的に広がっていく。いわゆる拡散現象である。 x 軸および y 軸に射影した粒子群の分布関数は、それぞれ次第に正規分布に近づいていく。つぎに、a_0 と a_1 の値をいろいろ変えて、粒子群が拡散していく様子の違いを観察しよう。istep はグラフ出力するステップ間隔である。

4.4 発展

コンピューターに余力があれば、プログラム brown2.f の parameter 文で nmax の値を増やして実験してみよう（変更は 5 箇所）。分布関数がよりなめらかになるであろう。各軸に射影した粒子分布を計算する際のボックス数 jbox も、デフォルト値 40 から増やすとよい。

粒子群の変位の 2 乗平均を計算し、その時間変化をプロットして、Langevin の理論を確かめてみよう。

4.5 ノート

Press et al.(1986) の “Numerical Recipes” 第 7.2 節およびその日本語版 (丹慶ほか, 1993) を教科書として、一様乱数から正規乱数を作る方法 (Box-Muller 法) をまとめておく。実際の計算では、サブルーチン random の中で一様乱数生成ルーチンと呼ばび、ここに記す方法で正規乱数に変換している。

(0, 1) 区間の一様乱数 x において、 x と $x + dx$ の間の数を生成する確率 $p(x)dx$ は次の式で与えられる：

$$p(x)dx = \begin{cases} dx & (0 < x < 1), \\ 0 & (\text{それ以外}), \end{cases} \quad (4.5)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(x)dx = 1. \quad (4.6)$$

いま、一様乱数 x を生成し、それをある関数で $y(x)$ に変換したとする。この y の確率密度 $p(y)$ は、確率の基本変換則

$$|p(y)dy| = |p(x)dx|, \quad \text{すなわち,} \quad p(y) = p(x) \left| \frac{dx}{dy} \right|, \quad (4.7)$$

で決定できる。

y のある任意の分布 $p(y)$ を変換則により生成する方法を考える。この分布が関数 $f(y)$ (ただし、 $f > 0$ でその積分は 1) で与えられるとき、(4.7) 式より次の微分方程式を解く必要がある：

$$\frac{dx}{dy} = f(y). \quad (4.8)$$

ここで、 $f(y)$ の不定積分を $F(y)$ とすると、この解は $x = F(y)$ であるので、一様乱数から確率密度が $f(y)$ の乱数への変換は、

$$y(x) = F^{-1}(x), \quad (4.9)$$

で与えられる。この変換がプログラムとして実現できるかどうかは、 $F(y)$ の逆関数の計算が可能かどうかにかかっている。

また、この変換法は 2 次元以上の場合にも一般化できる。もし、 x_1, x_2, \dots が同時確率密度 $p(x_1, x_2, \dots)dx_1dx_2\dots$ を持ち、さらに y_1, y_2, \dots の一つ一つがすべての x_i の関数であり、 x_i と y_j とが同数だけあれば、 y_j の同時確率密度は

$$p(y_1, y_2, \dots)dy_1dy_2\dots = p(x_1, x_2, \dots)|J|dx_1dx_2\dots, \quad (4.10)$$

で与えられる。ここで $|J|$ はヤコビ行列式 ($J_{ij} = \partial x_i / \partial y_j$) である。

2 次元の (4.10) 式をもとに正規乱数を生成する方法に Box-Muller 法がある。正規乱数とは、その確率密度が正規分布

$$p(y)dy = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-y^2/2} dy, \quad (4.11)$$

で与えられる乱数である。いま、 $(0, 1)$ 区間の 2 個の一様乱数 x_1, x_2 と 2 個の量 y_1, y_2 との間の変換

$$\begin{cases} y_1 = \sqrt{-2 \ln x_1} \cos(2\pi x_2), \\ y_2 = \sqrt{-2 \ln x_1} \sin(2\pi x_2), \end{cases} \quad (4.12)$$

を考える。これらより x_1, x_2 は

$$\begin{cases} x_1 = \exp \left[-\frac{1}{2}(y_1^2 + y_2^2) \right], \\ x_2 = \frac{1}{2\pi} \arctan \frac{y_2}{y_1}, \end{cases} \quad (4.13)$$

であるので、これらをもとにヤコビ行列式を計算すると、

$$|J| = \frac{\partial x_1}{\partial y_1} \frac{\partial x_2}{\partial y_2} - \frac{\partial x_1}{\partial y_2} \frac{\partial x_2}{\partial y_1} = - \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-y_1^2/2} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-y_2^2/2} \right), \quad (4.14)$$

となる。これは y_1 だけの関数と y_2 だけの関数との積だから、おのおのの y は独立に正規分布 (4.11) に従うことがわかる。

$(0, 1)$ 区間の 2 個の一様乱数 x_1, x_2 を生成して (4.12) 式に代入すれば良いのだが、ちょっと工夫すると、 \cos , \sin の計算をしなくても正規乱数に変換できる。 x_1, x_2 のかわりに、原点を中心とする単位円の内側のランダムな点を選び、その座標を (v_1, v_2) とする。この各成分の 2 乗和 $R \equiv v_1^2 + v_2^2$ は $(0, 1)$ 区間で一様分布す

る. また, 点 (v_1, v_2) の偏角も $[0, 2\pi)$ で一様分布する. すなわち, (4.12) 式の x_1 および $2\pi x_2$ をこれらで置き換えることができる:

$$\begin{cases} y_1 = \sqrt{-2 \ln R} v_1 / \sqrt{R} = \sqrt{-2(\ln R)/R} v_1, \\ y_2 = \sqrt{-2 \ln R} v_2 / \sqrt{R} = \sqrt{-2(\ln R)/R} v_2. \end{cases} \quad (4.15)$$

これらをもとに, 正規乱数を生成するサブルーチン `random` は書かれている.

参考文献

- 北原 和夫, 1997: 「非平衡系の統計力学」, 岩波基礎物理シリーズ 8, 岩波書店, 279pp.
 小林 謙二, 1983: 「熱統計力学 I」, 朝倉書店, 239pp.
 Press, W.H., B.P. Flannery, S.A. Teukolsky and W.T. Vetterling, 1993: *Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, 818pp.
 Rodean, H.C., 1996: *Stochastic Lagrangian models of turbulent diffusion*, Meteorological Monographs **26** (No.48), American Meteorological Society, 84pp.
 丹慶 勝市・奥村 晴彦・佐藤 俊郎・小林 誠, 1993: Numerical Recipes in C. [日本語版] C 言語による数値計算のレシピ, 技術評論社, 685pp.