

Subject: Re: 論文出版のご連絡とお礼

From: Ryoichi Yamamoto <ryoichi@cheme.kyoto-u.ac.jp>

Date: 2013/07/05 11:01

To: 松岡 佑樹 <ymatsuoka@sumibe.co.jp>

松岡様

早速ありがとうございます。OCTA本のための情報整理の一環として、自分の理解と一致していて安心しました。

論文中ではエネルギー単位 ϵ_0 を、格子幅・流体密度・流体粘度の基本量の組み合わせで表現しております。

これでOKです。UDFの温度(k_{BT})と ϵ の単位は両方とも ϵ_0 でコードでも確認しました。

しかしこの定義のもと、「半径 1 μm の粒子が常温の水中に存在する」条件で計算してみますと、 $\epsilon_0=2.5\text{e-}16\text{J}$ となり、論文で用いた $k_{BT}=7\epsilon_0$ は126811594Kと非常に大きな値となりました。ですので、このエネルギー単位の定義は不適当と思われます。

これが正しいのか自信がありませんが、実際の温度条件での k_{BT} を計算し、その値に合うように ϵ_0 を決定するのがよいのではと思います。

たとえば298.15°Cですと、 $\epsilon_0=k_{BT}/7=k_B\times 298.15/7=5.88\text{e-}22\text{ J}$ となります。

この値を用いてLJ相互作用パラメータを計算しますと、 $\epsilon=42\epsilon_0=2.469\text{e-}20\text{ J}$ となります。

これもその通りでOKです。物性値をそのまま入れると、流体の時定数(τ)が粒子の拡散の時定数 ($a^2/D\propto\Delta^3\mu/k_{BT}$) より何桁も短くなります。それでは粒子が動かないので、拡散の時定数を大きくして対応することになります。 k_{BT} を大きくするか、同じことですが μ を小さくするかになります。 $k_{BT}=126811594\text{K}$ というとびっくりしますが、その分 ϵ も大きくしており、単にシミュレーションが加速されるだけで物理的な状況は変わりません。

「流体の時定数(τ) \ll 粒子の拡散の時定数」であることは必要ですが、現実系のように何桁も小さい必要はないのです。1～2桁差があれば十分だと思います。ナビエストークスの慣性項を落としてストークス近似にすると流体の運動方程式は解かないことになり、この場合は $\tau=0$ となります。

このようにKAPSELでは、物理状況を変えないように「そのままでは出来ない問題」を「なんとか出来る問題」に置き換えているので、シミュレーションと現実系の対応は注意を要します。これが外部の人にわかりにくいと言われる原因なんだろうと思います。KAPSELについては、今後はもっと応用（共同研究）に力を入れていきますので、何かあればよろしくお願いします。

山本量一

--

Ryoichi Yamamoto, Professor

Department of Chemical Engineering, Kyoto University

KAPSEL-3.0 Released <<<<

<http://www-tph.cheme.kyoto-u.ac.jp/kapsel>