

Title	実数型格子ガス法による熱流動解析に関する研究
Author(s)	今川, 洋造
Citation	
Issue Date	2001-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	author
URL	<a href="http://hdl.handle.net/10119/1478">http://hdl.handle.net/10119/1478</a>
Rights	
Description	Supervisor:松澤 照男, 情報科学研究科, 修士

# 修士論文

## 実数型格子ガス法による熱流動解析に関する研究

指導教官 松澤 照男 教授

審査委員主査 松澤 照男 教授

審査委員 丹 康雄 助教授

審査委員 堀口 進 教授

北陸先端科学技術大学院大学  
情報科学研究科情報システム学専攻

910013 今川 洋造

2001年2月

## 要旨

本稿では、近年開発された数値流体解析法の一つである実数型格子ガス法を用いて、具体的な Reynolds 数に対応した流体解析を行うことを目的とする。そして、熱流動解析への拡張に関する調査を行う。

# 目次

<b>1</b>	<b>はじめに</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>格子ガス法</b>	<b>2</b>
2.1	HPP モデル	2
2.2	FHP モデル	4
2.3	粗視化	4
<b>3</b>	<b>実数型格子ガス法</b>	<b>6</b>
3.1	衝突過程	7
3.2	並進過程	9
3.3	平衡状態	11
3.4	物理量	11
<b>4</b>	<b>Navier-Stokes 方程式の導出</b>	<b>13</b>
4.1	実数型格子ガス方程式	13
4.1.1	並進過程	13
4.1.2	衝突過程	14
4.1.3	実数型格子ガス方程式	15
4.2	Chapman-Enskog 展開	15
4.2.1	Navier-Stokes equation	17
<b>5</b>	<b>境界条件</b>	<b>21</b>
5.1	滑りなし境界条件	21
5.2	周期境界条件	22
5.3	温度を持つ境界	22
5.4	境界衝突後の粒子位置	26

5.5	実数位置の適用 . . . . .	27
5.6	空間平均 . . . . .	29
5.7	格子点の配置 . . . . .	29
5.8	乱数生成について . . . . .	30
5.9	粒子の初期配置 . . . . .	32
<b>6</b>	<b>実験結果</b>	<b>33</b>
6.1	2次元クエット流れ . . . . .	33
6.2	2次元キャビティ流れ . . . . .	36
6.3	熱伝導の計算 . . . . .	41
6.4	2次元サーマルキャビティ流れ . . . . .	45
6.5	2次元ベナール対流 . . . . .	50
<b>7</b>	<b>まとめ</b>	<b>53</b>

# 第 1 章

## はじめに

格子ガス法は、差分法や有限要素法といった流体運動を数値的に解析する手法とは異なり、流れ場を規則的な格子で区切り、仮想的な粒子を運動させることにより、ミクロなレベルから流れ場を解析する非圧縮性流れの解析手法である。

この手法は、空間と速度を離散化するため、粒子の速度方向の制限、同一格子上には同じ速度を持つ粒子は存在しない、という排他則が生じる。そのため、粒子の衝突のルールに特別な配慮をする必要があり、また、3次元においては格子の対称性のため、複雑な格子を用いる必要がある等の問題点がある。

実数格子ガス法は A.Malevanets 氏 によって提唱された非圧縮性流れ解析の手法 (文献 [1]) である。この手法は従来の格子ガス法とは異なり、速度を実数値で持つ。また、衝突過程は同一格子上に存在する全ての粒子の運動量を、その重心の回りで回転させるという操作で記述される。この衝突過程の計算の容易さから、3次元計算への拡張が容易であるという特徴がある。

また、この手法の導出過程において、熱流動解析に必要なエネルギー方程式などが導出されている。適切な条件を与えることで、熱流動解析が出来るのではないかと考えることができる。

しかし、この手法による熱流動現象の具体的な計算を扱った研究は、まだなされていない。本研究では、この実数型格子ガス法による熱流動問題のシミュレートと、その考察を目的とする。

## 第 2 章

# 格子ガス法

格子ガス法の計算法について簡単に説明する。

計算で取り扱う変数が、0 と 1 の Bool 変数であるというのが大きな特徴である。このことは、コンピュータのビット演算を用いれば、数 bit で 1 格子点の状態を記述できる。つまり、実数を扱う数値計算法に比べ、この点については記憶容量を小さくとれるし、計算の効率化も図れる。また、極めて並列計算に向いており、実際、ハードウェアで計算を行う LGA チップも製作された。そのうえ、計算に伴う丸め誤差がおよび打ち切り誤差も、計算の過程では生じないなど、大きな利点がある。

しかし、当然予想されるように、計算値は時間、空間的にノイズが極めて大きく、このままでは、巨視的に見て、どのような流れになっているかわからない。そこで、粗視化（平均化）を行う必要があり、そのために非常に多くの格子点をとることになって、全体として多くの記憶容量を必要とする。従って、計算時間も結局、それほど短縮にはならないし、平均化を行うので、結果の誤差評価は難しくなる。

これらは、これまでの流体の数値計算法にない特色を持っており、一見極めて初歩的なモデルのように思われる。しかし、このモデルにより計算される連続体としての流体のもつ保存則や、等方性といった性質は、粒子の衝突則や格子の形状に依存している。これらを正確に決めないと流体の計算にはならないのであって、これらの関係を明らかにする十分な論理的基礎と、応用に関して広い一般性を持った計算法である。

### 2.1 HPP モデル

格子オートマトンを流体の数値計算に応用するにあたり、最初に考えられたモデルは Hardy, Pomeau, Pazzis らによって提唱された HPP モデル である。このモデルは、2 次

元の空間を正方形の格子で細かく区切り、その格子上を粒子が動き回るが、この運動を追跡することにより、流体の運動をシミュレートしようとする。

この粒子は、流体を構成する分子ではなく、この数値計算手法に都合の良いように考えられた、全くの仮想的なモデル粒子である。ここで、導入された粒子はすべて同じ質量を持つ質点として取り扱われる。格子幅も単位長さとし、時間も離散的に整数であるもの時間も離散的に整数であるものとする。そして、格子ガスモデルに特有な排他律を適用する。この排他率は、1つの格子点で粒子は、上下左右の4方向の速度を持ち得るが、ある方向の速度粒子は2個以上あってはならないというものである。この排他率は Bool 演算を用いるために、便宜上導入したもので、物理的な意味は全くない。

具体的な粒子の運動は、気体の分子同様に、衝突、移動を繰り返す。その際、衝突は格子点 (node) のみで生じるとする。また、衝突は図に示すような、2つの粒子の正面衝突のみを考える (2つの粒子の衝突は、2体衝突といわれる)。衝突後の粒子はそれぞれ、それまで粒子のなかった方向へ跳ね返る。衝突と跳ね返りは瞬間的に瞬間的に起こり、次に粒子の移動により次の時間ステップに隣のステップに移動するのである。つまり、考えている時間ステップには粒子はつねに格子点上にあり、隣の格子点に移った粒子はそこで衝突をするならば衝突をし、しないならば、そのまま次の時間ステップでその次の格子点に移動する。

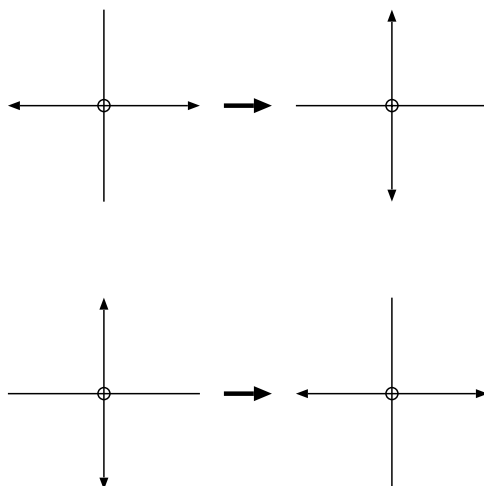


図 2.1: HPP モデルの格子と衝突則

この粒子の衝突において、質量と運動量が保存されるのは明らかである。また、各粒子の速度の 2 乗に  $1/2$  を掛けたものを運動エネルギーとすると、運動エネルギーも保存する



ことがわかる。しかし、運動エネルギーの保存則は、他の2つの保存則と独立ではなく、何ら意味を持たない。また、このモデルの大きな欠点は、Navier-Stokes 方程式を導く際に必要となる4階のテンソルが等方的にはならないということである。従って、このモデルでは、流体の正しい運動を再現することは無理である。

## 2.2 FHP モデル

HPP モデルの4階のテンソルに関する問題点を解決するモデルとして、Frish, Haslacher, Pomeau らが提唱したのが、正六角形格子を用いて空間を離散化するモデルで、FHP モデルと呼ばれる。この手法は、2次元空間を図のように、単位長さ1を持つ変を持つ正六角形で離散化する。この格子線に沿って、単位質量の粒子が隣近接の格子点へ単位長さ1で移動する。時間は整数値をとり、各時刻で、全ての粒子は格子点上に存在するとする。つまり、格子線の途中に粒子が存在するようなことはない。これらの性質はHPP モデルと同様である。

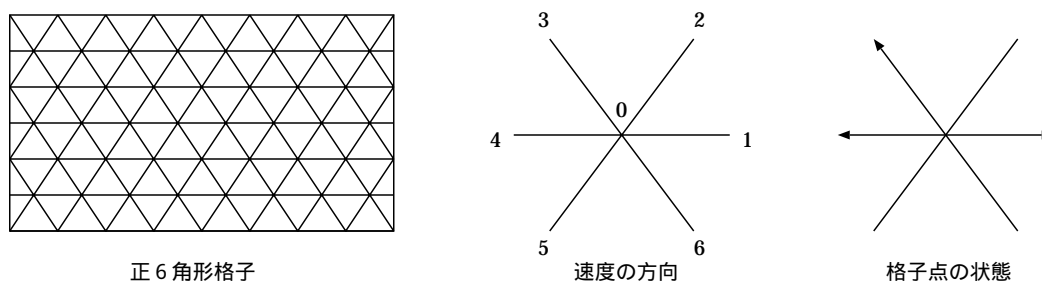


図 2.2: FHP モデルの格子

## 2.3 粗視化

密度や流速といった連続体としての変数は、多数の格子点を含む有限領域での粒子の平均化として表せる。

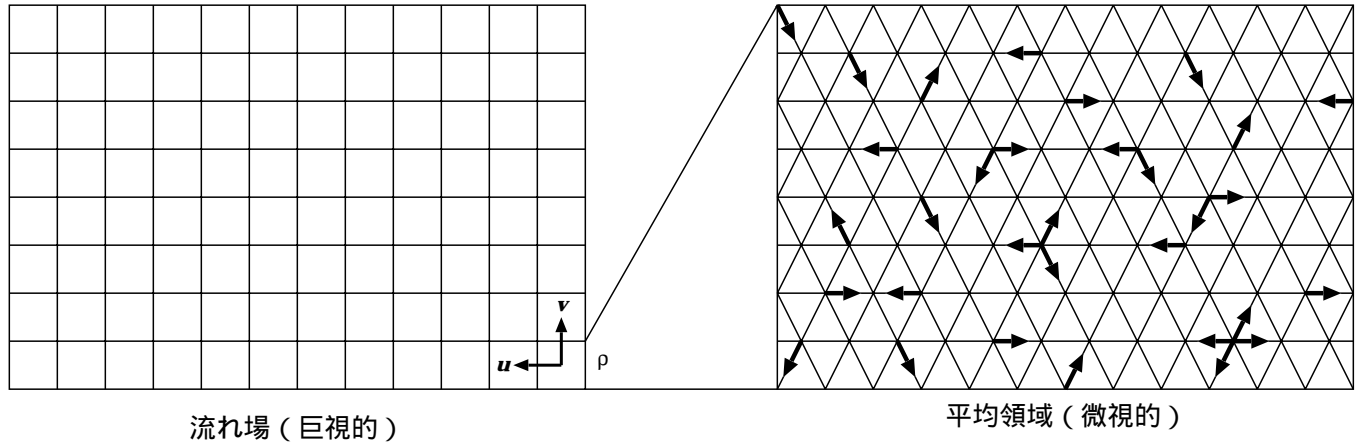


図 2.3: 粗視化 (平均化) 領域

今、格子点  $\mathbf{r}_*$  を含む有限領域において、 $i$  方向の速度を持つ粒子の数の平均値  $N_i$  を考え、

$$N_i(t_*, \mathbf{r}_*) = \langle n_i(t_*, \mathbf{r}_*) \rangle$$

と書くと、この領域では粒子数および運動量の平均値はそれぞれ、

$$\rho(t_*, \mathbf{r}_*) = \sum_i N_i(t_*, \mathbf{r}_*)$$

$$\mathbf{j}(t_*, \mathbf{r}_*) = \sum_i \mathbf{c}_i(t_*, \mathbf{r}_*)$$

と表される。

また、この領域での流速は粒子の平均速度として次式で定義される。

$$\mathbf{u}(t_*, \mathbf{r}_*) = \frac{\mathbf{j}(t_*, \mathbf{r}_*)}{\rho(t_*, \mathbf{r}_*)}$$

以上の手順から、ブール代数で記述される各格子点の微視的状态から、連続体としての巨視的変数である密度と流速 (図の例では  $(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ ) を求めることができる。なお、平均の操作としては、ある格子点での時間についての平均操作でもよいし、空間および時間平均を組み合わせたものでもよい。

# 第 3 章

## 実数型格子ガス法

実数型格子ガス法は、従来の格子ガス法と同様に、粒子の並進と衝突の過程を繰り返すことにより計算が進行する。粒子の並進と衝突には、それぞれ乱数を用いた確率的な  
また対象となる気体は、理想気体を仮定している。

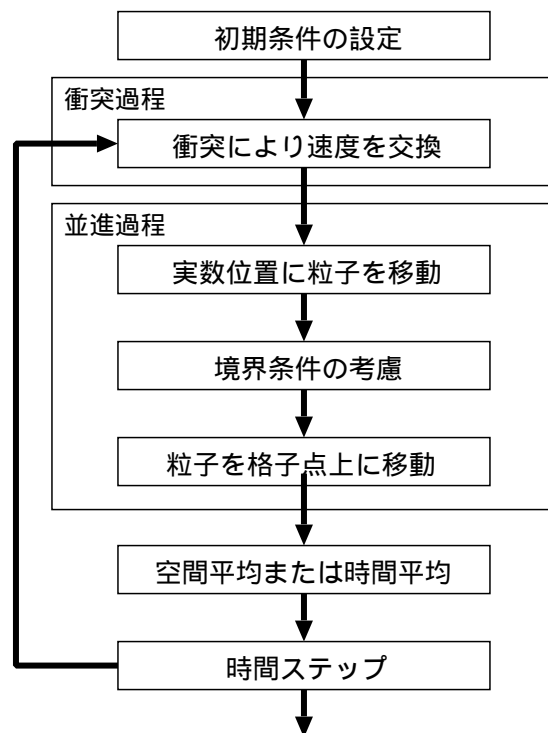


図 3.1: 実数型格子ガス法のフローチャート

### 3.1 衝突過程

同一格子上にある粒子同士が衝突を行い、運動量と運動エネルギーを交換するプロセスである。衝突過程において、運動量と運動エネルギーは保存される。衝突過程は、運動量の重心を中心として、各粒子への速度とのベクトルとの差をとり、その差をランダムな回転角で回転させることにより表される。 $v_i$  と  $v'_i$  を衝突前と衝突後の衝突粒子の速度、 $V$  は同一格子上の粒子の速度の平均とする。ランダムな回転行列  $\sigma$  は格子毎に異なる。

$$v'_i = V + \sigma(v_i - V)$$

また、ランダムな回転角  $\sigma$  をベクトル  $v$  に対して、 $(v^T \sigma v) = 0$  となるように決めるとき、ずり粘性係数の値が最も小さくなり、高い Reynolds 数の流れをシミュレートすることが出来る。2次元の場合は、衝突の際の回転角をランダムに  $\pm\pi/2$  と決定すればよい。

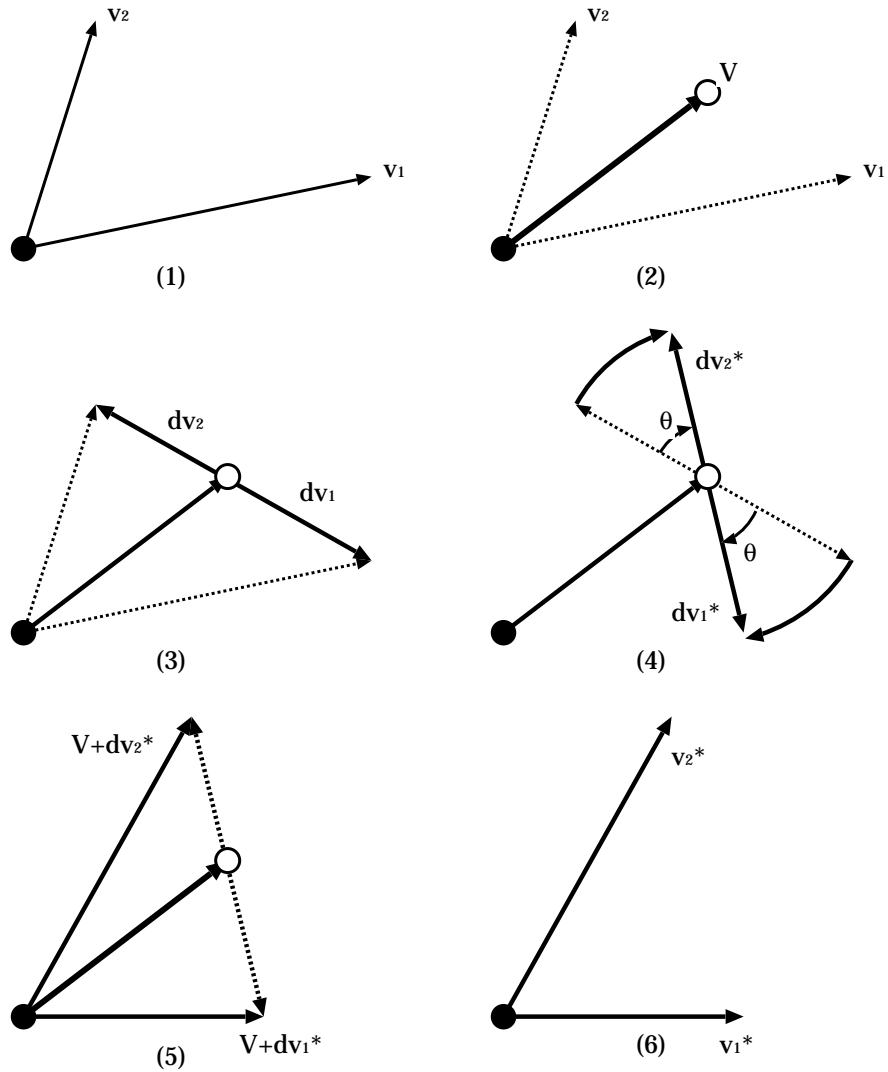


図 3.2: 2次元における衝突過程のアルゴリズム (粒子数が2の場合)

1. 同一セル内に存在する粒子の速度ベクトル  $v_i$  がある場合、
2. セル内の粒子の平均速度  $V$  を求める
3. 各粒子の速度について、平均速度からの差分  $dv_i$  を求める
4. 速度の差分をセル毎に決められた角度  $\theta$  だけ回転する
5. 回転された差分速度  $dv_i^*$  に平均速度  $V$  を加える
6. 衝突後の速度  $v_i^*$  が求まる。

## 3.2 並進過程

粒子が格子から格子へと移動する過程である。1ステップ毎に粒子は速度分だけ移動する。衝突は格子上で行われるため、実数座標を整数座標に変換して、格子上に移動する必要がある。

整数座標  $\boldsymbol{x} = (x_1, \dots, x_D)$  ( $D$  は次元数) に存在する粒子が速度  $\boldsymbol{v} = (v_1, \dots, v_D)$  を持つとき、速度成分  $v_i$  を整数部分  $[v_i]$  と小数部分  $\{v_i\}$  に分離する。

$$v_i = \{v_i\} + [v_i]$$

移動後の座標  $\boldsymbol{x}' = (x'_1, \dots, x'_D)$  の成分は、 $[0, 1)$  の一様乱数  $\xi_i$  を用いて

$$x'_i = \begin{cases} x_i + [v_i] & (\xi_i > \{v_i\}) \\ x_i + [v_i] + 1 & (\xi_i < \{v_i\}) \end{cases}$$

と表すことが出来る。

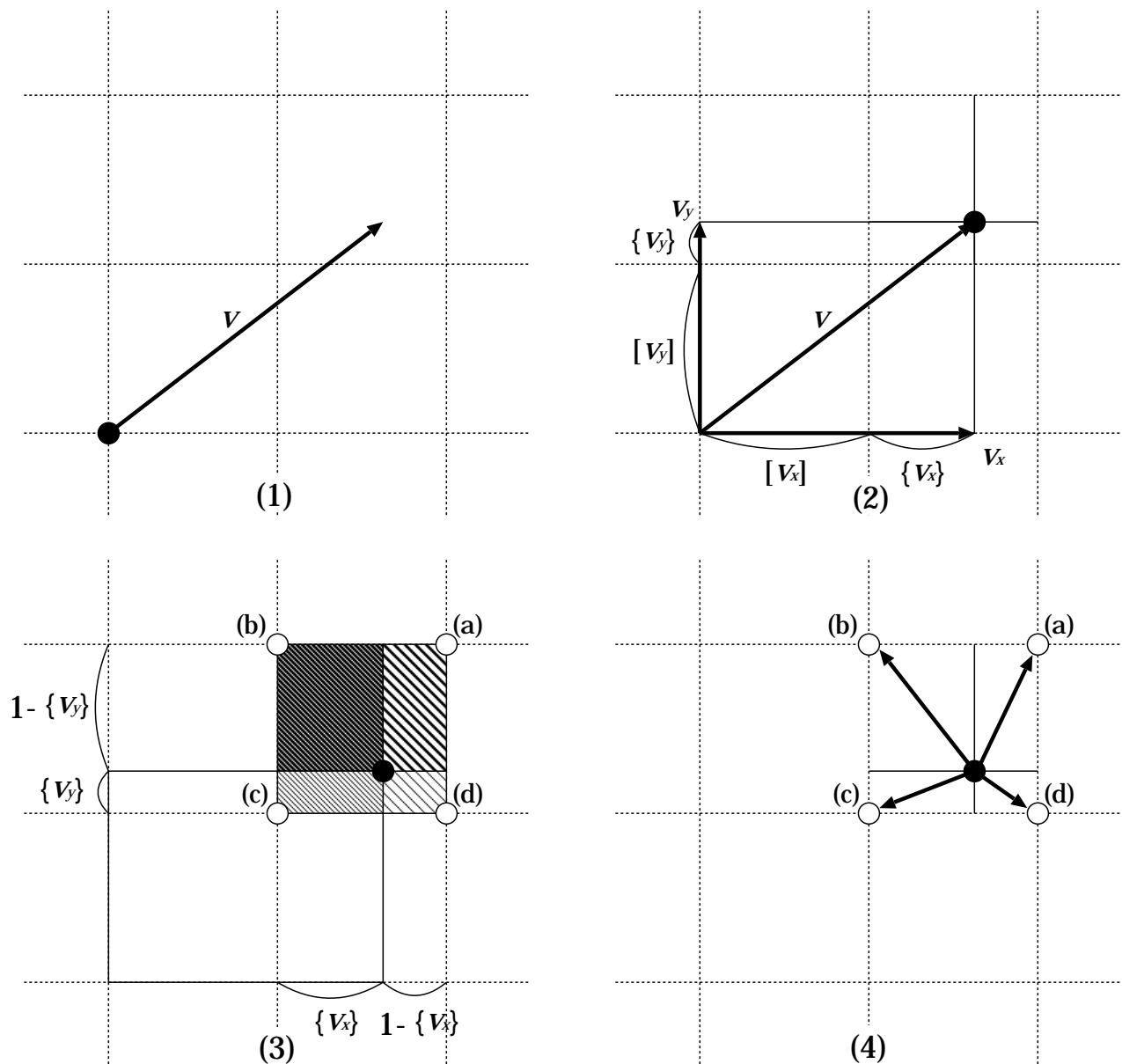


図 3.3: 2次元における並進過程のアルゴリズム

1. 速度  $v$  を持つ粒子がある場合を考える。
2.  $v$  の各成分を整数部分と小数部分に分ける。
3. 各格子点に移動する確率を計算する。2次元の場合は、格子点へ移動する確率は、対角成分の面積で表される。
4. 3で求めた確率に従って、粒子は a,b,c,d のいずれかの格子点に移動する。

### 3.3 平衡状態

以上の衝突側と並進側を用いることで、実数型格子ガス法では、平衡状態において粒子の速度分布が、Maxwell-Boltzmann 分布

$$f(\mathbf{v}) = (1/(\sqrt{2\pi T}))^d \exp(-\|\mathbf{v}\|^2/2T)$$

に従う。 $d$  は次元数である。これにより、実数型格子ガス法のシミュレートを行う際の粒子速度の初期条件として、この Maxwell-Boltzmann 分布に従う速度を与える。

### 3.4 物理量

動粘性係数  $\nu$  は

$$\nu = \frac{1}{12} + T \frac{\rho + 1 - e^{-\rho}}{2(\rho - 1 + e^{-\rho})} \quad (3.1)$$

で与えられ、Reynolds 数  $Re$  は代表長さを  $L$ 、代表速度を  $U$  とすると

$$Re = LU/\nu \quad (3.2)$$

で与えられる。ここで、 $T$  は体系の平均温度、 $\rho$  は粒子の格子点あたりの平均数密度である。

また、動粘性係数を最小にする衝突を用いた場合、動粘性係数は  $\nu_{min}$  は

$$\nu_{min} = \frac{1}{12} + T \frac{1 - e^{-\rho}}{2(\rho - 1 + e^{-\rho})} \quad (3.3)$$

となる。

格子点  $l$  における物理量（密度  $\rho$ 、運動量  $\mu$ 、運動エネルギー  $\varepsilon$ ）については、計算空間全体の粒子数を  $N$  とすると、以下のように与えられる。

$$\rho(l) = \sum_{i=1}^N m_i \delta(l - \xi_i) \quad (3.4)$$

$$\mu(l) = \sum_{i=1}^N m_i \zeta_i \delta(l - \xi_i) \quad (3.5)$$

$$\varepsilon(l) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i \|\zeta_i\|^2 \delta(l - \xi_i) \quad (3.6)$$

$\zeta_i, \xi_i$  は、それぞれ  $i$  番目の粒子の速度と位置である。今回は、1種類の粒子だけを扱うので、粒子の質量は  $m_i = 1$  に正規化している。



系内の温度は、全粒子の運動エネルギーの平均を用いて、系内粒子数を  $N$  とすると、2次元の場合

$$T = \frac{1}{N} \sum_i \frac{v_i^2}{2}$$

と与えられる。

流体の音速  $c_s$  は、

$$c_s = \sqrt{\frac{5}{3}T}$$

で与えられる。

圧力は理想気体を仮定しているため、

$$p = \rho T_{local}$$

となる。 $T_{local}$  は局所温度である。

熱流動の計算の評価を行うために、熱伝導率を求める必要がある。今回は、熱伝導率  $\kappa$  について

$$\kappa = \mu C_v$$

という関係を用いることにした。 $\mu$  は粘性係数であり、密度  $\rho$  と動粘性係数  $\nu$  に関して

$$\mu = \rho\nu$$

という関係がある。また、 $C_v$  は定積比熱であり、実数型格子ガス法では、 $C_v = \frac{\xi}{2}$  である。 $\xi$  は粒子運動の自由度であり、2次元の場合は  $\xi = 2$  である。

これにより熱伝導率  $\kappa$  は、

$$\kappa = \mu$$

と計算できる。

熱伝導率を用いて、熱流動におけるレイリー数  $Ra$  は以下のように計算できる。

$$Ra = \frac{\lambda g L^3 \Delta T}{\nu \kappa} \quad (3.7)$$

$$= \frac{g L^3 \Delta T}{\nu^2 \rho} \quad (3.8)$$

ここで、

$\lambda$  : 熱膨張係数

$g$  : 重力加速度

$\Delta T$  : 温度差

であり、熱膨張係数  $\lambda$  に関しては、実数型格子ガス法では常に 1 である。

## 第 4 章

# Navier-Stokes 方程式の導出

ここでは、実数型格子ガス法による粒子運動を表す方程式である、実数型格子ガス方程式を導出し、その方程式を変形することで、流体運動の方程式 (Navier-Stokes 方程式) を導くことができることを示す。また、流体の性質を示す際に必要になる Reynolds 数を計算するために必要になる粘性係数についての導出も行う。

### 4.1 実数型格子ガス方程式

ここでは、実数型格子ガス法で行われる 2 種類の粒子運動、並進と衝突それぞれについて、その運動を表す演算子について説明し、実数型格子ガス方程式を示す。

#### 4.1.1 並進過程

粒子の速度から決定される確率分布によって、流れの演算子は格子上の粒子を確率的に動かす。具体的に言うと、速度  $\mathbf{v}$  を持ち、格子線を通して和に拡張された  $\mathbf{v} = \sum_i v_i \mathbf{e}_i$  粒子の伝播は、整数の乱数  $\xi_i(v_i)$  によって与えられる格子線に沿った移動の集合によって決定される： $\mathbf{n} = \sum_i \xi_i(v_i) \mathbf{e}_i$ 。粒子の伝播と粒子の運動量の値を関係付けるため、粒子の移動 (1 単位時間あたり) の期待値が、粒子の速度によって与えられるということを必要とする。そのため、以下のように  $\xi_i$  を選ぶ。

$$E(\xi_i(v_i)) = v_i. \quad (4.1)$$

対称性を満たすために、乱数  $\xi_i$  が、全ての  $i$  に対して等しく分布している必要がある。乱数を以下の分布に適用する。

$$P(\xi(v) = n) = \begin{cases} \{v\}, & n=[v]+1 \\ 1 - \{v\}, & n=[v] \\ 0, & \text{else,} \end{cases} \quad (4.2)$$

ここで  $\{v\}$  と  $[v]$  は  $v$  の小数部分と整数部分である。上記の乱数選択によって式 (4.1) が成り立つことを確かめるのは率直である。つまり、 $v > 0$  の場合、

$$v = [v] + \{v\}$$

となり、この確率による粒子速度の期待値は、

$$\langle v \rangle = (1 - \{v\})[v] + \{v\}([v] + 1) = v$$

となり、平均をとることで、粒子速度が変わらないことがわかる。

Boltzmann 近似において、流れと衝突の変換を連続して適用する条件下の系の振る舞いは、1 粒子の規約確率分布  $P_1$  に関して記述される。確率分布における流れの演算子の振る舞いは

$$\mathcal{S}P_1(\mathbf{l}, \mathbf{v}) = \sum_{\mathbf{r}} W(\mathbf{r}, \mathbf{v}) P_1(\mathbf{l} - \mathbf{r}, \mathbf{v}), \quad (4.3)$$

ここで  $\mathbf{l}$  と  $\mathbf{r}$  は格子の座標であり、 $W$  は式 (4.2) で定義されたランダムな過程を表す遷移確率行列である。上の公式はキュムラント展開を用いることで有用な形に書き変わる：

$$\sum_{\mathbf{r}} W(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \exp[-\mathbf{r} \cdot \nabla] = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{m_j}{j!} \odot (-\nabla)^j = \exp \left[ \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\kappa_j}{j!} \odot (-\nabla)^j \right] \quad (4.4)$$

ここで、 $\odot$  はテンソル縮約であり、 $m_j$  はモーメント、 $\kappa_j$  はキュムラントであり、2 つ目の恒等式はキュムラント展開の定義からわかる。時間の変換作用素に  $f(t+1) = \exp[\partial_t]f(t)$ 、空間の変換作用素に  $f(\mathbf{r}+1) = [\mathbf{l} \cdot \nabla]f(\mathbf{r})$  という一般表現を使用する。 $\nabla$  のべき乗に関して、式 (4.4) のキュムラント展開を用いて式 (4.3) を書き直す。

$$\mathcal{S} = \exp \left[ \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\kappa_j(\mathbf{v})}{j!} \odot [-\nabla]^j \right] \quad (4.5)$$

#### 4.1.2 衝突過程

衝突変換は、場の粒子の集団に作用するが、粒子の位置を変えないという過程である。ここで、運動量やエネルギーや質量の合計や、付加的なランダム回転行列のような合計量にのみ依存する方法を考えてみる。この衝突ルールの類いは、とても豊かな現象学を与えてくれる。今回用いる方法は、重心に速度を持って運動する速度の回転は、過剰の運動

エネルギー、つまり全体のエネルギーを変化させないという事実に基づいている。以下の公式に基づいた衝突変換を考える：

$$\mathbf{v}'_i = \mathbf{V} + \sigma(\mathbf{v}_i - \mathbf{V})$$

ここで、 $\mathbf{v}_i$  と  $\mathbf{v}'_i$  は衝突前と衝突後の衝突粒子の速度であり、 $\mathbf{V}$  は衝突粒子の重心の速度である。ランダム回転行列  $\sigma$  は場所によって異なるが、ある場所にある全ての粒子に対しては同じである。輸送係数の値は、衝突モデルの詳細に依存し、理想気体の場合には、衝突行列群を選ぶことで定義される。ベクトル  $\mathbf{v}$  を直交ベクトル  $(\mathbf{v}^T \sigma_i \mathbf{v}) = 0$  に変換するランダムな回転  $\{\sigma_i\}$  の集合を選択することで、Boltzmann 近似において、ずり粘性係数の値が最も小さくなり、高い Reynolds 数の流れをシミュレートする際に有用な条件となる。

ここで衝突演算子  $\mathcal{C}$  は以下のように定義できる。

$$\mathcal{C}(P_1)(\mathbf{v}'_1) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\rho}}{(n-1)!} \int d\sigma \int \cdots \int \prod_{i=1}^n d\mathbf{v}_i \delta(\mathbf{v}'_1 - \mathbf{V} + \sigma[\mathbf{v}_1 - \mathbf{V}]) \prod_{i=1}^n P_1(\mathbf{v}_i),$$

であり、 $\rho$  はある地点における粒子数の期待値である。

### 4.1.3 実数型格子ガス方程式

このように、Boltzmann 近似における、1 粒子確率密度に対する発展方程式は以下の形で書くことができる。

$$\exp[\mathcal{X}]P_1(\mathbf{l}, \mathbf{v}, t) = \mathcal{C}(P_1), \quad (4.6)$$

$\mathcal{X}$  は以下の演算子である。

$$\mathcal{X} = \frac{\partial}{\partial t} - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\kappa_j(\mathbf{v})}{j!} \odot [-\nabla]^j,$$

## 4.2 Chapman-Enskog 展開

ゆっくりと変化する密度場において、既約確率分布の展開を用いることにより、流体方程式を導出する。この Chapman-Enskog の手続きは、任意の適切な汎関数は、保存場の部分的な微分の級数に展開される。 $\mathbf{x} \rightarrow \varepsilon \mathbf{x}$  と  $t \rightarrow \varepsilon t$  というスケーリングをすると、展開は  $\varepsilon$  の巾乗に展開される。

既約確率分布関数は、局所的な衝突の不変量  $\rho^\alpha$  の瞬間的な空間的分布により定義される。

$$f(x, v, t) = f(v, \rho(x)) = \sum_{n \geq 0} \varepsilon^n f_n(v, \rho(x))$$

局所的な衝突の不変量の密度は、平均値により与えられる。

$$\rho(x) = \langle \iota f(x, v, t) \rangle$$

一意性を保証するために、追加の要求を押しつける。

$$\langle \iota^\alpha f_n(x, v, t) \rangle = 0 \quad (\forall n > 0, \forall \alpha)$$

ここで、 $\iota$  は、式 (3.4-3.6) で示される密度、運動量、運動エネルギーの物理値である。

保存量の汎関数の時間発展は、微少パラメータ  $\varepsilon$  における展開として与えられる演算子によって支配される。

$$\frac{\partial}{\partial t} = \sum_{n \geq 0} \varepsilon^n \mathcal{D}_n$$

$\varepsilon$  の級数による衝突演算子の展開は、以下のように書ける

$$\mathcal{C}(f) = \sum_{n \geq 0} \varepsilon^n \mathcal{C}_n(f)$$

平均  $\langle \mathcal{C}(f) \rangle$  を 0 にするために、級数のいかなる項の平均値を  $\langle \mathcal{C}_n(f) \rangle = 0$  にしなければならない。

演算子  $\mathcal{X}$  は以下のようになる

$$\mathcal{X} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial t} - \sum_{i=1}^{\infty} \varepsilon^i \frac{\kappa_i(v)}{i!} \nabla^i$$

式 (4.6) の発展方程式を  $\varepsilon$  の級数に展開することにより、以下の方程式系が導かれる。

$$\mathcal{C}_0(f) = \mathcal{C}(f) = 0 \quad (4.7)$$

$$\mathcal{C}_1(f) = [\mathcal{D}_0 - \nabla \cdot \kappa_1(v)] f_0 \quad (4.8)$$

$$\mathcal{C}_2(f) = \mathcal{D}_1 f_0 - [\mathcal{D}_0 + \nabla \cdot \kappa_1(v)] f_1 + \frac{1}{2} [\mathcal{D}_0 - \frac{1}{2} \nabla \cdot \kappa_1(v)]^2 - \nabla^2 : \kappa_2(v) f_0 \quad (4.9)$$

式 (4.8) の解は、局所 Maxwell 分布が導かれる。

$$f_0 = \sqrt{\frac{m}{2\pi T}}^d e^{-\frac{m\|v-u\|^2}{2T}} \rho \quad (4.10)$$

$v$  に関する局所的な衝突の不変量の平均は、演算子  $\mathcal{D}_i$  と入れ替わる。そのため、式 (4.8) の積分により、以下が導かれる。

$$\mathcal{D}_0 \rho^\alpha = \nabla \cdot \langle \iota^\alpha \kappa_1(v) f_0 \rangle \quad (4.11)$$

式 (4.9) の平均は、Euler 方程式の 2 次の修正を与える。

$$\mathcal{D}_1 \rho^\alpha = \frac{1}{2} \nabla^2 : \langle \iota^\alpha \kappa_2(v) f_0 \rangle - \langle \iota^\alpha [\mathcal{D}_0 - \nabla \cdot \kappa_1(v)] (f_1 + \frac{1}{2} \mathcal{C}_1(f)) \rangle$$

変換後は

$$\mathcal{D}_1 \rho^\alpha = \frac{1}{2} \nabla^2 : \langle \iota^\alpha \kappa_2(v) f_0 \rangle + \nabla \cdot \langle \iota^\alpha \kappa_1(f_1 + \frac{1}{2} \mathcal{C}_1(f)) \rangle \quad (4.12)$$

ここで、 $\langle \iota^\alpha f_1 \rangle$  と  $\langle \iota^\alpha \mathcal{C}_1(f_1) \rangle$  上の条件を使用した。

#### 4.2.1 Navier-Stokes equation

この章では、一般的な公式 (4.7-4.9) を、いくつかの衝突モデルに適用する。衝突モデルに関わらず、0 次の展開項における方程式は、圧縮性流れのオイラー方程式を構成する。式 (4.11) の平均を計算することにより、保存量の発展に関する以下の結果が生じる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla_i \rho u_i = 0 \quad (4.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_j + \nabla_i \rho u_i u_j + \nabla_j \rho T^* = 0 \quad (4.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [\frac{1}{2} \rho \|\mathbf{u}\|^2 + \frac{3}{2} \rho T^*] + \nabla_i \rho u_i [\frac{1}{2} \rho \|\mathbf{u}\|^2 + \frac{5}{2} \rho T^*] = 0 \quad (4.15)$$

ここで  $T^* = T/m$  である。代数操作により、上の式を  $\rho, \mathbf{v}, T^*$  に対する発展方程式の集合に変換することができる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla_i \rho u_i = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} u_j + u_i \nabla_i u_j + \frac{1}{\rho} \nabla_j \rho T^* = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} T^* + u_i \nabla_i T^* + \frac{2}{3} T \nabla_i u_i = 0$$

式 (4.13-4.15) に Laplace-Fourier 変換をすることにより、以下の連立方程式を得ることができる。

$$\begin{bmatrix} z & k^T & 0 \\ \frac{T^*}{\rho} k & z & k \\ 0 & \frac{2}{3} k^T & z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \rho_k \\ u_k \\ T_k^* \end{bmatrix} = 0$$

上の連立方程式は、固有値が  $z_0 = 0$  と  $z_{\pm} = \pm |k| \sqrt{\frac{5}{3} T^*}$  である。このように、式 (4.13-4.15) により支配される連立方程式において、消散の過程がない、これは  $T^* \rho^{-2/3}$  が流線に沿って保存されているという事実からわかる。音速は理想気体では

$$c = \sqrt{\frac{5}{3} T^*}$$

で与えられる。式 (4.13-4.15) を使うことで、式 (4.8) を以下のような形に書き直すことができる。

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_1(f) = & f_0 \left( \frac{\partial \log(f_0)}{\partial \rho} [\nabla_i v_i \rho - \nabla_i u_i \rho] + \right. \\ & \left. \frac{\partial \log(f_0)}{\partial u_i} [\nabla_j v_j u_i - u_j \nabla_j u_i - \frac{1}{\rho} \nabla_i \rho T^*] + \right. \\ & \left. \frac{\partial \log(f_0)}{\partial T^*} [\nabla_i v_i T^* - u_i \nabla_i T^* - \frac{2}{3} T^* \nabla_i u_i] \right) \end{aligned}$$

式 (4.10) で与えられる  $f_0$  の陽的な形式を代入して、代数操作をすることで、以下の式を導出できる

$$\mathcal{E}_1(f) = f_0 \left( \left[ \frac{\|\mathbf{c}\|^2}{2} - \frac{5}{2} \right] c_i \nabla_i \log T^* + \frac{1}{T^*} [c_i c_j - \frac{1}{3} \|\mathbf{c}\|^2 \delta_{ij}] \nabla_j u_i \right) \quad (4.16)$$

ここで、 $\mathbf{c} = \mathbf{v} - \mathbf{u}$  である。

$h_1 f_0 = f_1$  という関係により関数  $h_1$  を定義する。衝突演算子  $\mathcal{E}_1$  は以下の形になる。

$$\mathcal{E}_1(f)(w) + f_1(w) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\rho^n}{(n-1)!} e^{-\rho} \sum_{\sigma \in O(d)} \int dV \delta(w - V + \sigma(V - v_1)) P_m(V) \sum_{i=1}^n h_1(v_i) \quad (4.17)$$

ここで  $\sum_{\sigma \in O(d)}$  は、回転の集合に対して、和または積分をとることを表している。

式 (4.17) と (4.16) は、関数  $h_1$  に関する線形積分方程式を形成する、これは、2つの方程式、一つは  $\nabla \log T^*$  の項を含む式、もう一つは速度場の勾配に依存する式、に分割できる

以上から、

$$h_1 = [c_i c_j - \frac{1}{3} \|\mathbf{c}\|^2 \delta_{ij}]$$

が、衝突演算子の固有関数であり、これに対応する固有値は粘性係数の値を定義することがわかる。すなわち、以下の恒等式

$$1 = n^d \int dV \exp(ik \cdot \sum_{i=1}^n (V - v_i))$$

と、そのあとの  $v_i, i = (2, \dots, n)$  に関する積分を用いることで、式 (4.17) は以下の積分の合計を減らすことができる。

$$I = \sum_{\sigma \in O(d)} \int dV d c_1 \delta(w - V + \sigma(V - c_1)) \frac{n^d}{(2\pi)^d} \int dk e^{-T^*(n-1)\|k\|^2/2 + ik \cdot (nV - c_1)} [(n-1)k_x k_y + \frac{1}{T^*} c_{1x} c_{1y}]$$

4.1.2章で議論した衝突モデルに対して上の積分を計算することにより、 $c_x c_y$  は固有関数であることがわかり、これにより固有値が求まる。

$$\gamma = \frac{1 - \rho - e^{-\rho}}{\rho}$$

$$\gamma = 2 \frac{1 - \rho - e^{-\rho}}{\rho}$$

それぞれ、一様に分散する衝突と、 $\frac{\pi}{2}$  の衝突における値である。

式(4.12)の平均を計算することにより、Chapman-Enskog展開の2次の項に対する以下の表現を得る。

$$\mathcal{D}_1 \rho = D \Delta \rho$$

$$\mathcal{D}_1 \rho u_i = D \Delta \rho u_i - \nabla_j \pi_{ij}$$

$$\mathcal{D}_1 [\frac{1}{2} \rho \|u\|^2 + \frac{3}{2} \rho T^*] = D \Delta [\frac{1}{2} \rho \|u\|^2 + \frac{3}{2} \rho T^*] - \nabla_i u_j \pi_{ij} + \frac{3}{2} \nabla_i \lambda \nabla_i T^*$$

ここで、 $\lambda$  は熱伝導率であり、圧力テンソルに対する不可逆な貢献が以下の表現で与えられる。

$$\pi_{ij} = \rho T^* [\frac{1}{2} + \frac{1}{\gamma}] (\nabla_i u_j + \nabla_j u_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla_k u_k)$$

上の式において、密度の連続方程式に流れ項  $D \Delta \rho$ 、これは簡単に書き直すと  $\nabla_i \rho D \nabla_i \log \rho$  となる、が付加している。このように、新たな変数の集合  $w = u - D \nabla \log \rho$  において、連続の式は、以下のなじみのある形を仮定できる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla_i w_i \rho = 0$$

連続の式の形により、新たな変数の集合  $(\rho, w, T^*)$  により流体方程式を求めているということの意味している。代数変換をすることで、以下の方程式の集合を得ることができる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla_i w_i \rho = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial t} w_i + w_j \nabla_j w_i + \frac{1}{\rho} \nabla_i \rho T^* = -\frac{1}{\rho} \nabla_j \pi'_{ij}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} T^* + w_i \nabla_i T^* + \frac{2}{3} T^* \nabla_i w_i = -\frac{2}{3\rho} \pi'_{ij} \nabla_i w_j \pi_{ij} - \frac{2D}{3} \nabla_i w_j \nabla_j w_i + \frac{1}{\rho} \nabla_i (D\rho + \lambda) \nabla_i T^* - \frac{2}{3} T^* \Delta \log \rho$$



新たな変数において、速度場、温度場、密度場の発展は、以下の圧力テンソル

$$\pi'_{ij} = \pi_{ij} - \rho D(\nabla_i w_j + \nabla_j w_i) \quad (4.18)$$

を持つ Navier-Stokes 方程式により支配される。

上の表現は、せん断粘性係数  $\eta' = \eta + D\rho$  と体積粘性係数  $\eta'_B = \eta_B + 2D\rho/3$  の値が付属している Newton 圧力テンソルをもっている。圧力テンソルは球形に対称であり、上で議論された衝突モデルにおいて、体積粘性係数  $\eta_B = 0$  のように 0 になる。

式 (4.18) により以下の値を得ることができる。

$$\eta'_1 = \rho D + \rho T^* \frac{1 + \rho - e^{-\rho}}{2(e^{-\rho} - (1 - \rho))}$$

$$\eta'_2 = \rho D + \rho T^* \frac{1 - e^{-\rho}}{2(e^{-\rho} - (1 - \rho))}$$

修正された体積粘性係数は両方のモデルで、 $\eta'_B = 2D\rho/3$  となる。

# 第 5 章

## 境界条件

格子ガス法において、境界条件の与え方は、流れ場の性格を決める重要な要素である。今回の計算においては、境界条件を以下のように考えた。

### 5.1 滑りなし境界条件

数値的解法の境界条件として、流体と壁面との間に摩擦があり、壁面における流速の垂直方向成分と水平方向成分がともに 0 になる境界条件がある。この境界条件は滑りなし (non-slip) 境界条件として知られている。

実数型格子ガス法におけるこの境界条件は、これまでの格子ガス法と同様に、粒子の各速度成分を逆にする、つまり

$$(v_x, v_y) \rightarrow (-v_x, -v_y)$$

滑りなし境界条件を用いることにより表現される。

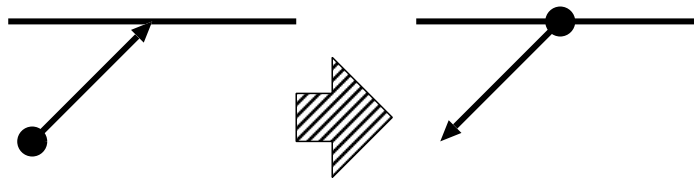


図 5.1: 滑りなし境界条件

## 5.2 周期境界条件

周期境界条件は、境界の外に飛び出した粒子が、その境界に相對した境界から入ってくることで表すことができる。この境界により、その境界方向（図 5.2 においては x 方向）に無限の広がりを持つ計算空間を作成することができる。計算空間の境界方向の大きさを  $L$  とすると、

$$x = \begin{cases} x + L & (x < 0) \\ x - L & (x > L) \\ x & \text{else} \end{cases}$$

とすることにより、周期境界条件を表すことができる。

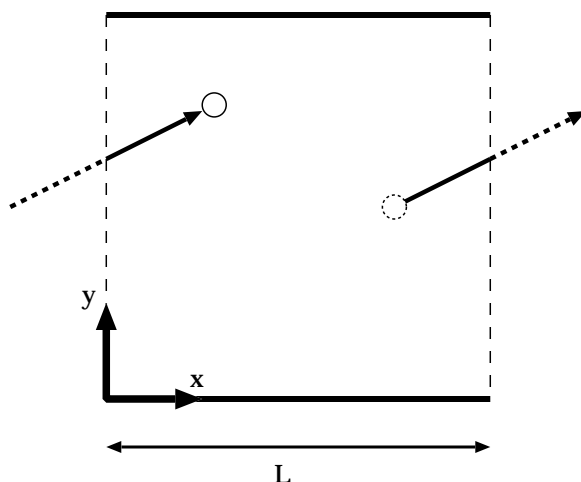


図 5.2: 周期境界条件

## 5.3 温度を持つ境界

温度を持つ境界条件との衝突について、今回の計算では、動分子力学における壁面への衝突と同様の手法、つまり Cosine 法則に従う速度分布を粒子に与えた。これは、Maxwell 分布に従う速度を持つ粒子が壁面に衝突すると、個体表面から散乱される粒子は  $\cos \theta_r$  ( $\theta_r$  は壁面表面から測った反射角 (下の図を参照)) に比例する速度分布を与えられるという法則である。

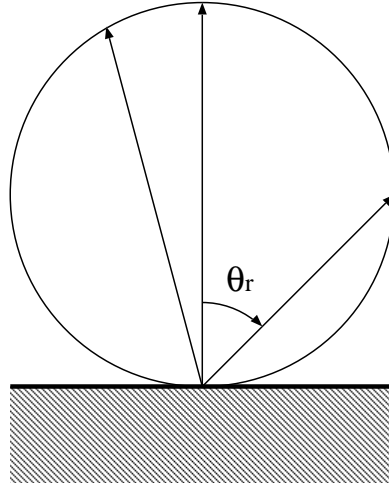


図 5.3: Cosine 法則による温度壁からの粒子の散乱

## 2次元空間における温度壁の導出

平衡状態にある粒子群の速さに対する速度分布関数  $f_c(c)$  は、Maxwell 分布となり、2次元における分布は次式で示される。

$$f_c(c)dc = \frac{m}{kT}c \exp\left(-\frac{mc^2}{2kT}\right)$$

速さ  $c \sim c+dc$  で移動する原子の単位面積当りの個数は、数密度を  $n$  とすると、 $nf_c(c)dc$  である。長さ  $dA$  の孔から 角度  $d\theta$  の方向に、 $dt$  時間内に流出する分子数を考える。

tbp]

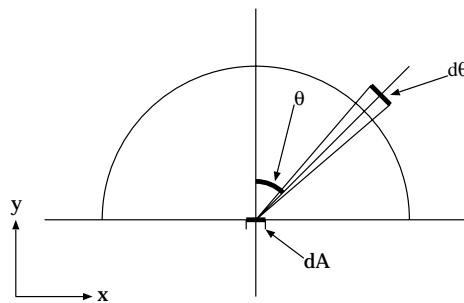


図 5.4: 座標系

速さ  $c \sim c+dc$  で  $d\theta$  の方向に流出する原子の個数は傾いた四辺形の面積  $dAcdt \cos \theta$  に存在するこれらの原子が  $d\Omega$  方向に  $\frac{d\theta}{2\pi}$  の確率で流出すると考えれば、

tbp]

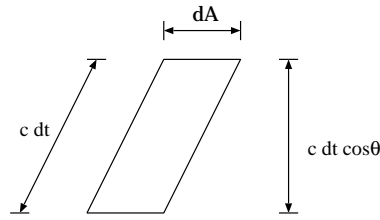


図 5.5: 面積

$$n(dAcdt \cos \theta) \frac{d\theta}{2\pi} f_c(c)dc$$

よって単位長さ、単位時間当り  $d\theta$  の方向に流出する速さ  $c \sim c + dc$  の原子数は、

$$nc \cos \theta \frac{d\theta}{2\pi} f_c(c)dc \quad (5.1)$$

ここで、

$$\int_0^\infty c f_c(c)dc = \bar{c}' = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\pi kT}{m}}$$

であることを考慮して積分すると、

$$\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_0^\infty nc \cos \theta \frac{d\theta}{2\pi} f_c(c)dc = \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{n \cos \theta}{2\pi} d\theta \int_0^\infty c f_c(c)dc \quad (5.2)$$

$$= \frac{n}{2\pi} [\sin \theta]_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \bar{c}' \quad (5.3)$$

$$= \frac{n\bar{c}'}{\pi} \quad (5.4)$$

よって式 (4.3) を  $\frac{n\bar{c}'}{\pi}$  で規格化する。

$$f_0(c)dc = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} c \cos \theta f_c(c) d\theta dc \quad (5.5)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{m}{kT}\right)^{\frac{3}{2}} c^2 \exp\left(-\frac{m}{2kT}c^2\right) \cos \theta d\theta dc \quad (5.6)$$

ここで、実数型格子ガス法の式と比較して、粒子の質量  $m = 1$  で正規化し、また、 $kT \rightarrow T$  とする。

この式を  $xy$  座標系で置き換える。 $y$  軸を回転の中心としていることを考慮して、極座標の半径を  $c$ 、角度を  $\theta$  とすると、

$$cdcd\theta = dx dy$$

$$y = c \cos \theta$$

$$x = c \sin \theta$$

$$c^2 = x^2 + y^2$$

を用いると、上式は

$$f_0(c)dc = \frac{1}{T\sqrt{2\pi T}} y \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{2T}\right) dx dy$$

ここで、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{x^2}{2T}\right) dx = \sqrt{2\pi T}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} y \exp\left(-\frac{y^2}{2T}\right) dy = T$$

であることを考慮し、

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left(-\frac{x^2}{2T}\right)$$

$$h(y) = \frac{1}{T} y \exp\left(-\frac{y^2}{2T}\right)$$

とすれば

$$f_0(c)dc = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left(-\frac{x^2}{2T}\right) \cdot \frac{1}{T} y \exp\left(-\frac{y^2}{2T}\right) dx dy \quad (5.7)$$

$$= g(x) \cdot h(y) dx dy \quad (5.8)$$

となる。

この導出のために、以下の公式を用いた。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_0^{\infty} x^{2x+1} \exp(-ax^2) dx = \frac{n!}{2a^{n+1}} \quad (n \geq 0)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^{2n} \exp(-ax^2) dx = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2n-1)}{2^n a^n} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (n \geq 1)$$

この Cosine 法則に従うような粒子速度を与えるために、温度  $T$  を持つ壁から反射した境界に垂直な方向の速度  $v$  の分布を

$$P(v) = \frac{v}{T} \exp\left(-\frac{v^2}{2T}\right)$$

とし、水平な方向の速度  $u$  の分布を

$$P(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left(-\frac{u^2}{2T}\right)$$

に従うように速度を与えればよい。

境界が速度を持つ場合は、上記の温度壁により発生した粒子の速度に、境界の速度を加えればよい。

この境界においては、粒子が境界に付着し、境界の持つエネルギーに十分平衡し、衝突前の粒子の速度とは無関係に、等方的に反射するモデルである。つまりこの境界モデルは、粒子の速度が境界の影響を完全に反映するモデルである。

## 5.4 境界衝突後の粒子位置

境界と衝突して跳ね返った粒子の位置については、粒子と壁面との衝突が瞬間で起こるものと仮定し、1ステップの時間割合を考慮することにより、粒子位置を決定した。

説明のため、境界は  $y = L (L > 0)$  とし、 $t = t_0$  での粒子の位置を  $(x_0, y_0)$ 、速度を  $(c_x, c_y)$  とし、境界衝突後の粒子速度を  $(c'_x, c'_y)$ 、 $t = t_0 + 1$  での粒子の位置を  $(x_1, y_1)$  (但し、 $y_1 < L$ ) とする。粒子が境界に衝突しない場合、1タイムステップ後の粒子の位置は

$$x_1 = x_0 + c_x$$

$$y_1 = y_0 + c_y$$

となる。

$t = t_0$  から  $t = t_0 + 1$  間の粒子間の衝突は考慮しないが、境界との衝突は考慮する必要がある。境界と衝突した後の粒子位置は、

$$y_1 = L + c'_y \left(1 - \frac{L - y_0}{c_y}\right)$$

$$x_1 = x_0 + c_x \frac{y_0 - L}{c_y} + c'_x \left(1 - \frac{L - y_0}{c_y}\right)$$

となる。ここで、 $\frac{y-L}{c_y}$ 、 $(1 - \frac{y-L}{c_y})$  は、それぞれ衝突までの時間の割合、衝突後に移動する時間の割合を示している。

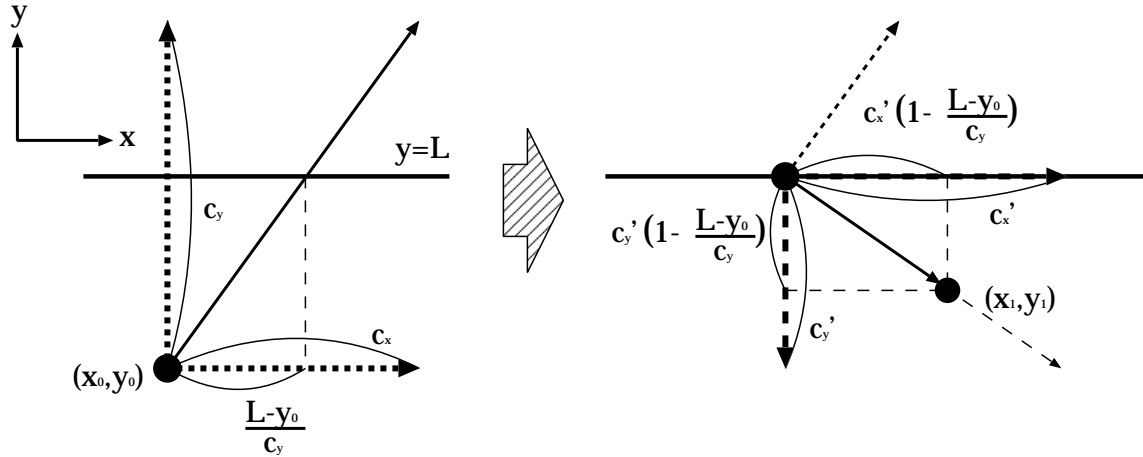


図 5.6: 境界での衝突がある場合の粒子位置の決定

## 5.5 実数位置の適用

この実数型格子ガス法は、ステップ毎に衝突を発生させる必要があるため、確率を用いて実数位置を整数位置（格子点）に移動させている。この衝突を発生させるための確率を用いる移動を行わずに、粒子は位置を整数ではなく実数で保持し、粒子が最寄りの格子点において衝突ルールに従い、速度を変換するというルールを用いた場合でも、整数位置を用いた場合と物理量は変化しないという報告がなされている（文献 [[7]]）。つまり以下の図において、斜線部の内部にある粒子について、衝突過程では、同一格子点上にあるものとして衝突ルールにより衝突を行い、並進過程では各粒子が持つ速度分の移動のみを行い、確率を用いた移動は行わない。この移動ルールを用いることで、確率を用いて粒子を格子に移動させる計算が省略でき、粒子の移動過程での計算量が減り、計算速度が上がる利点がある。そのため本研究では、粒子の位置を実数位置でもつこのルールを採用した。



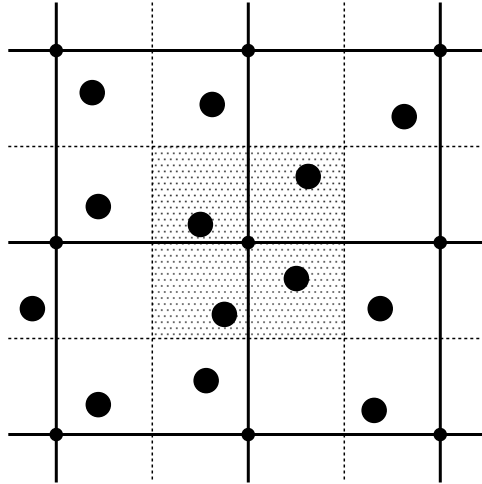


図 5.7: 実数位置を用いた場合

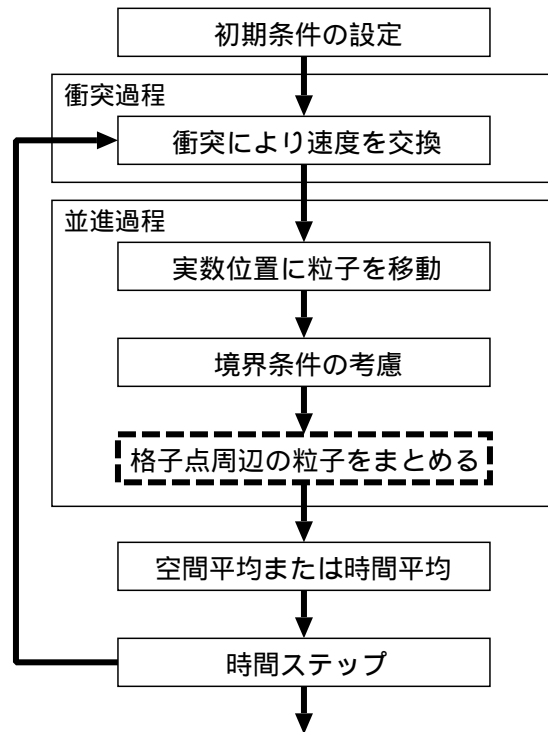


図 5.8: 実数位置を用いた場合のフローチャート

## 5.6 空間平均

従来の格子ガス法と同様に、空間平均をとることで、その地点での流れ場の物理量を表す。

空間平均には移動平均を適用した。平均をとる格子点を中心として、一辺  $2n + 1$  の正方形領域内にある格子点に存在する粒子について空間平均をとる。この平均の取り方は、境界付近では平均をとるための格子点が少ないため、境界付近の物理量の十分な平均をとることができないという欠点がある。しかし、普通の空間平均に比べて、サンプル点を多くとることができるという利点がある。そのため、速度について調べる流れ場に関しては、この条件を使用している。

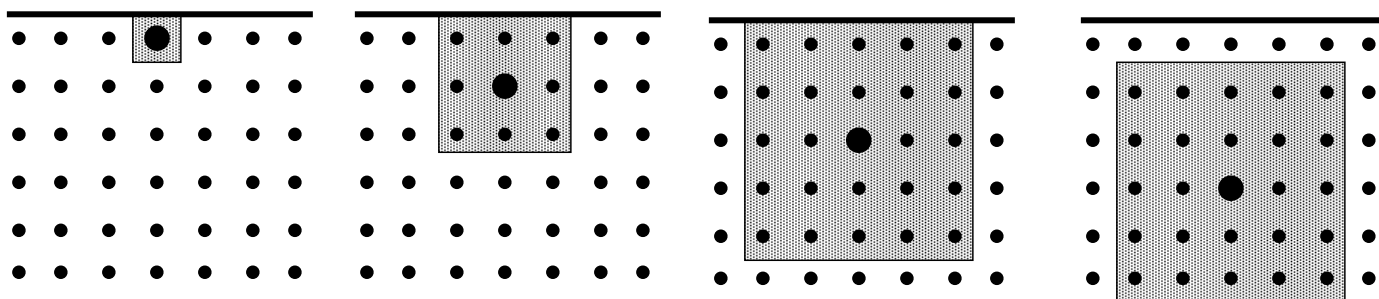


図 5.9:  $n=2$  における移動平均

格子ガス法は統計的なばらつき（ノイズ）が生じる。そのため、流れ場の平衡状態においては、必要であれば時間平均をとることにより、統計的ノイズを取り除くことができる。

## 5.7 格子点の配置

実数型格子ガス法では、格子は正方格子を用いる。格子点については、境界上に格子点を配置した場合、境界上での物理量、例えば密度などが領域内の物理量に比べて低くなる。これにより、空間平均をとる際に影響をおよぼす可能性がある。そのため今回の計算では、境界においては、境界上に格子点を配置せず、図 5.10 のように格子点で境界を挟むように格子点を配置した。また、粒子の位置を実数位置で表現する手法と併用すると、境界近傍にある速度の小さい粒子が、境界の影響を受けることができない、という矛盾がなくなる。

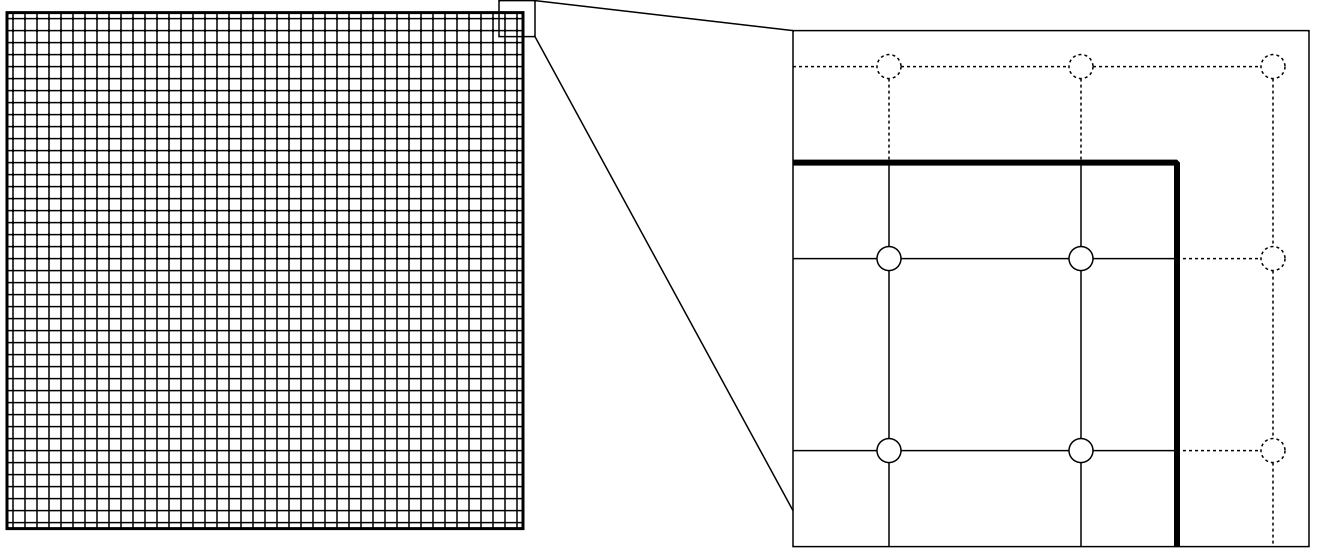


図 5.10: 境界部分の格子点

## 5.8 乱数生成について

### Maxwell 分布

粒子の速度は、平衡状態において Maxwell 分布、つまり正規分布に従う。実数型格子ガス法における Maxwell 分布に従う確率密度は以下の式で表される。

$$f(x) = \left(\frac{1}{2\pi T}\right)^d \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2\pi T}\right)$$

$d$  は次元数である。初期状態の粒子速度の初期化の際には、この分布に従う乱数を生成する必要がある。

本研究では 2 次元における流れ場のみを扱うので、2 変量の正規乱数、つまり  $d = 2$  の場合を考える。上記の式は、平均  $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \mu_2) = (0, 0)$ 、分散が  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2) = (\sqrt{T}, \sqrt{T})$ 、2 変数の相関係数  $\rho = 0$  である正規分布の確率密度関数である。

正規分布に従う乱数を生成するためには、一様乱数  $u_i, u_{i+1}$  を作成し、

$$x_i = \mu_1 + \sigma_1 (-2 \log_e u_i)^{\frac{1}{2}} \left\{ (1 - \rho^2)^{\frac{1}{2}} \cos 2\pi u_{i+1} + \rho \sin 2\pi u_{i+1} \right\} \quad (5.9)$$

$$= \sqrt{T} (-2 \log_e u_i) \cos 2\pi u_{i+1} \quad (5.10)$$

$$y_i = \mu_2 + \sigma_2 (-2 \log_e u_i) \sin 2\pi u_{i+1} \quad (5.11)$$

$$= \sqrt{T}(-2 \log_e u_i) \sin 2\pi u_{i+1} \quad (5.12)$$

とすることにより、2変量の正規乱数  $x_i, y_i$  が求まる。

## Cosine 散乱の場合

Cosine 散乱の、水平方向速度の確率密度関数  $g(x)$  と垂直方向速度の確率密度関数  $h(x)$  は、それぞれ

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left(-\frac{x^2}{2T}\right) \quad (5.13)$$

$$h(y) = \frac{1}{T} y \exp\left(-\frac{y^2}{2T}\right) \quad (5.14)$$

となる。 $g(x)$  は 1 変量正規分布の確率密度関数であり、 $h(y)$  は正規分布の確率密度関数に、重み  $y$  を掛けたものになっている。

$g(x)$  に従う乱数は、中心極限定理を利用する方法を用いた。これは、 $k$  個の一樣乱数  $u_1, u_2, \dots, u_k$  を生成し、変換式として、

$$z_i = \frac{\frac{1}{k}(u_1 + u_2 + \dots + u_k) - \frac{1}{2}}{\sqrt{\frac{1}{12k}}}$$

を用いることで、確率密度が

$$f(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{z^2}{2}\right) \quad (5.15)$$

である、平均  $\mu = 0$ 、分散  $\sigma = 1$  の正規乱数を生成する。文献 [10] によると、経験的に  $k \geq 5$  で十分実用的である乱数が生成できる。生成した正規乱数を、さらに

$$x_i = \sigma z_i + \mu \quad (5.16)$$

と変換することにより、平均  $\mu$ 、分散  $\sigma$  の正規乱数を生成することができる。Cosine 散乱においては、分散については  $\sigma = \sqrt{T}$  であり、平均  $\mu$  については、水平方向の速度が当てはまる。

確率密度  $h(y)$  に従う乱数は、一樣乱数を  $u_i$  を用いて、

$$y_i = \sqrt{-2T \log_{10} u_i} \quad (5.17)$$

とすることにより確率密度  $h(y)$  に従う乱数  $y_i$  を生成することができる。ここで、 $T$  は境界の温度である。

## 5.9 粒子の初期配置

粒子法によるシミュレートを行うにあたり、粒子の初期配置をする必要がある。今回のシミュレートにおいて、粒子の初期配置は、

1. 各格子点において密度  $\rho$  (粒子数) を一定に与える。
2. 粒子の速度は系内初期温度  $T$  (自分で与える)、平均速度 0 の Maxwell 分布に従う乱数を生成し、それを初期速度とする。

としている。2. においては、式 (5.10), 式 (5.12) を用いる、つまり、一様乱数  $u_1, u_2$  を生成し、

$$\begin{aligned}v_x &= \sqrt{T}(-2 \log_e u_1) \cos 2\pi u_2 \\v_y &= \sqrt{T}(-2 \log_e u_1) \sin 2\pi u_2\end{aligned}$$

とすることで、粒子の速度  $(v_x, v_y)$  を与える。

# 第 6 章

## 実験結果

### 6.1 2次元クエット流れ

移動境界の効果調べるため、クエット流れのシミュレーションを行った。上の境界は一定の速度  $U$  で  $x$  の正の方向に走っており、下の境界は静止している。上下の境界は平行であり、境界間の距離を  $L$  とする。気体は上下の境界に引きずられるので、境界の間に流れが生じる。

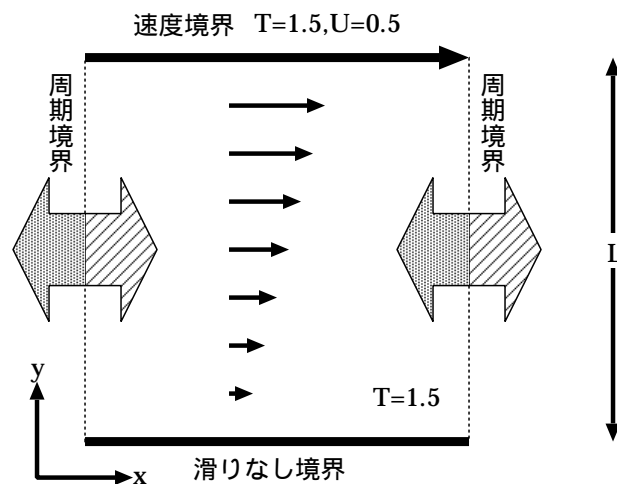


図 6.1: クエット流れにおける初期条件

$y$  座標が  $y_0$  における  $x$  方向の流速を  $u_y$  とすると、 $u_y$  は  $y$  のみの関数になり、以下の式

で表される。

$$u_y = \frac{U}{L}y$$

この式からわかる通り、速度  $u_y$  は  $y$  に対して線形に変化している。

## 計算条件

格子については第 5.7 節のように、正方格子を用いており、境界付近においては、境界から半分ずれた格子を用いた。格子点の数は  $128 \times 128$  である。

左右境界は、無限な広がり仮定するため、第 5.2 節の周期境界条件を与えた。

上境界については、温度  $T = 1.5$  とし、右方向に  $U = 0.5$  の速度を与えた。上境界の粒子への水平方向と垂直方向の速度の与え方は第 5.2 節にある温度壁の条件を用いた。詳しくは、以下の通りである。

水平方向の速度  $v_x$  については式 (5.15) と式 (5.16) において、 $\sigma = \sqrt{T} = \sqrt{1.5}$ ,  $\mu = U = 0.5$  とする、つまり一様乱数  $u_1, \dots, u_5$  を生成し、

$$v_x = \sqrt{1.5} \frac{\frac{1}{k}(u_1 + u_2 + \dots + u_5) - \frac{1}{2}}{\sqrt{\frac{1}{12 \cdot 5}}} + 0.5$$

とすることで  $v_x$  が生成できる。

垂直方向の速度  $v_y$  については、式 (5.17) において、 $T = 1.5$  とする、つまり一様乱数  $u$  を生成し、

$$v_y = \sqrt{-2 \times 1.5 \log_{10} u}$$

とすることで  $v_y$  が生成できる。

下境界は第 5.1 節の滑りなし境界条件を適用した。

粒子の初期分布は、第 5.9 節にあるように初期配置を行う。今回は、温度  $T = 1.5$ , 密度  $\rho = 4$  とした。

各物理量について、最大  $9 \times 9$  の移動平均 (第 5.6 節参照) をとり、さらに、7500 から 10000 ステップの時間平均をとる。つまり、各タイムステップにおいて物理量の空間平均をとった値について、さらに時間平均をとっている。

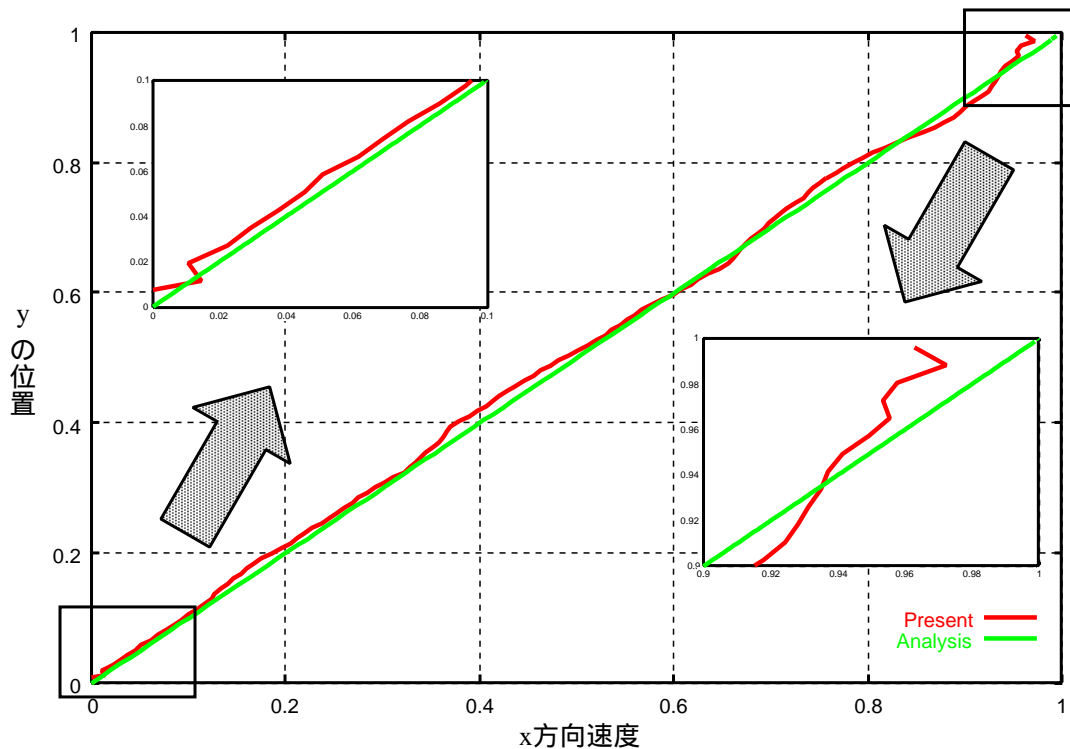


図 6.2:  $x$  方向速度分布

図 6.2 に  $x$  方向の速度分布を示す。流れと垂直な方向に対して、速度の大きさが線形に変化するという解析解がある。図 6.2 を見る限り、解析解と比較しても、解がほぼ一致していることが確認できる。これにより、滑りなし境界条件と速度壁の条件が適当である、ということが確認できる。

実数型格子ガス法は、粒子の衝突ルールなど、数値解法にないランダムな要素があり、それにより流れ場を再現している。そのランダムな要素により生じる数値のばらつきをなくすために、空間平均や時間平均をとることが必要になっている。境界付近では時間平均しか取ることができないため、実際の値とずれてしまうことがある。このクエット流れの結果において、境界部分の値が解析解に比べてずれていることがわかる。これはそのことを表していると考えられる。時間平均をもっと大きく、つまりもっと多くの平均をとることによって、解析解との差はなくなっていくものと考えられる。

また、空間平均に移動平均をとることで、普通の空間平均をとる場合に比べて計算時間が増大してしまった。



## 6.2 2次元キャビティ流れ

2次元キャビティ流れのシミュレーションを行った。キャビティ流れは、上境界を一定速度で水平方向に移動させることによって、正方形計算空間内に渦が生じる流れである。

### 計算条件

粒子に速度を与えている。その他の境界では、滑りなし境界条件を適用した。格子数は  $256 \times 256$  であり、

上境界の温度は  $T = 1.45$  とし、水平方向に速度  $0.5$  という上境界においては、 $T = 1.45, u = 0.5$  というクエット流れの移動境界条件とほぼ同じ条件を与えた。

粒子の初期分布を決定するのに使用する温度  $T$  は  $1.45$  とした。粒子の密度は、初期条件として一様に  $\rho = 4$  とした。

30000 ステップまで計算を行い、各物理量について最大  $11 \times 11$  の移動平均 (第 5.6 節参照) をとり、さらに 28000 から 30000 ステップの時間平均をとった。

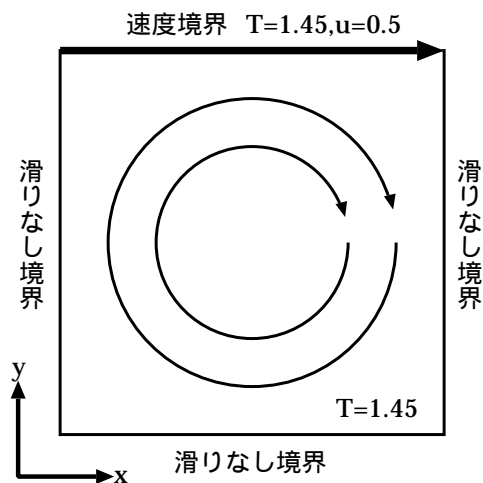


図 6.3: 2次元キャビティ流れ

時間平均をとった間の系全体の温度は、ほぼ  $T = 1.5$  となっている。正確には、時間平均をとる間の温度の最大値は  $T_{max} = 1.507$ 、最小値は  $T_{min} = 1.499$ 、この間の時間平均をとった温度は、 $T = 1.503$  となっていた。

この温度を用いて Reynolds 数の計算を行う。式 (3.1) に、温度  $T = 1.503$  と平均密度  $\rho = 4$  を代入することにより、動粘性係数  $\nu$  が求まる。代表長さは格子点数から  $L = 256$

であり、代表速度は境界上部の速度  $U = 0.5$  であるから、式 (3.2) から  $Re \approx 100$  と計算できる。この計算モデルにおける流速と音速の比であるマッハ数は、 $Ma \approx 0.3$  となっている。

流線図と中心における速度分布図を以下に示す。速度分布図については、比較のために現在最も精度が良いとされている GHIA 等の文献 [5] による  $Re = 100$  の結果も合わせて記した。

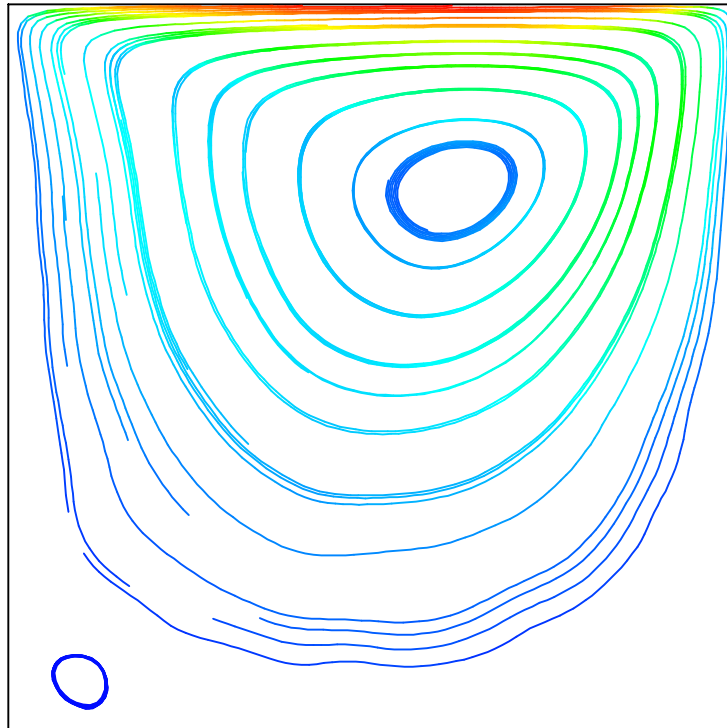


図 6.4:  $Re=100$  における流線

空間平均に加えて、時間平均をとることにより、比較的良好な結果が得られた。計算空間の左下に、2次渦の発生が確認できる。

今回の計算では、GHIA の論文の結果と比較するために、空間平均に移動平均を用いている。そのため、空間平均のための十分な格子数が確保できないため、境界付近の物理量が不安定になる可能性があった。しかしこの結果を見る限り、境界付近の速度についてはとても良く一致している。

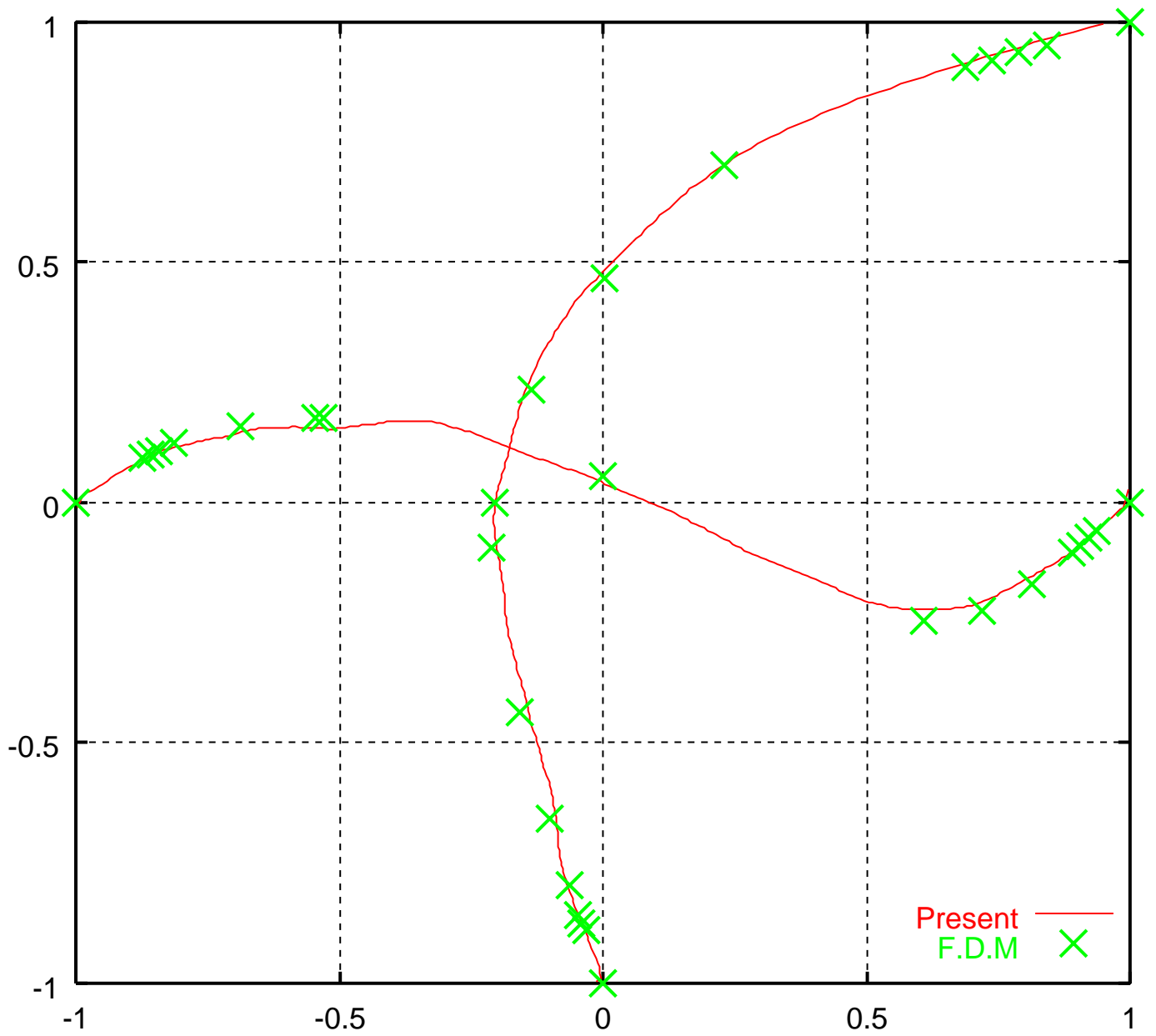


図 6.5:  $Re=100$  における速度分布

また、動粘性係数を最小にする衝突ルールを用いることで、他の条件を変更することなく、高い Reynolds 数の流れ場をシミュレートできる。この衝突ルールを用いて同じ計算を行った。動粘性係数は式 (3.3) で表され、そのため Reynolds 数は  $Re \approx 400$  となる。

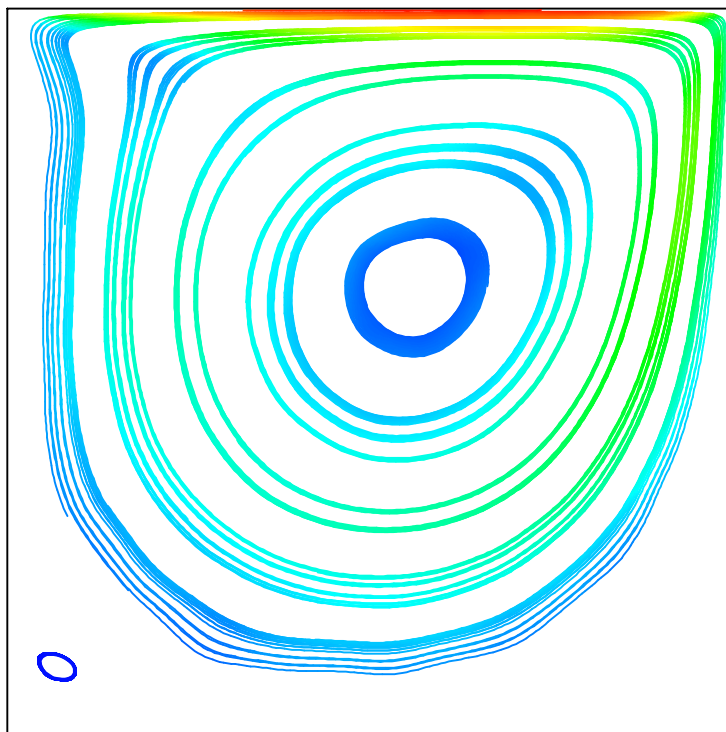


図 6.6:  $Re=400$  における流線

$Re = 400$  の場合も 2 次渦が流線に現れた。速度の大きさを正規化して見ることで、小さな渦らしいものも確認することができた。このような小さな渦は、格子点を増やすことによって、明確に発生するであろうと思われる。

$Re = 100$  の場合と比較して、1 次渦の中心の位置が、計算空間の中心に移動しているのが確認できる。渦の中心の位置や、2 次渦の発生などにより、定性的にも一致していることが確認できる。しかし、 $Re = 100$  の場合に比べ、境界付近の速度が一致していない。これは前のクエット流れの境界部分の流速と同様、十分な空間平均をとることが出来ないことが影響を与えていると考えることができる。

29000 ステップから 30000 ステップにおける時間平均、つまり時間平均をとる時間を半

分にした場合は、解が振動し、解析解との一致は見られなかった。時間平均をとるための指標が必要であると考えられる。

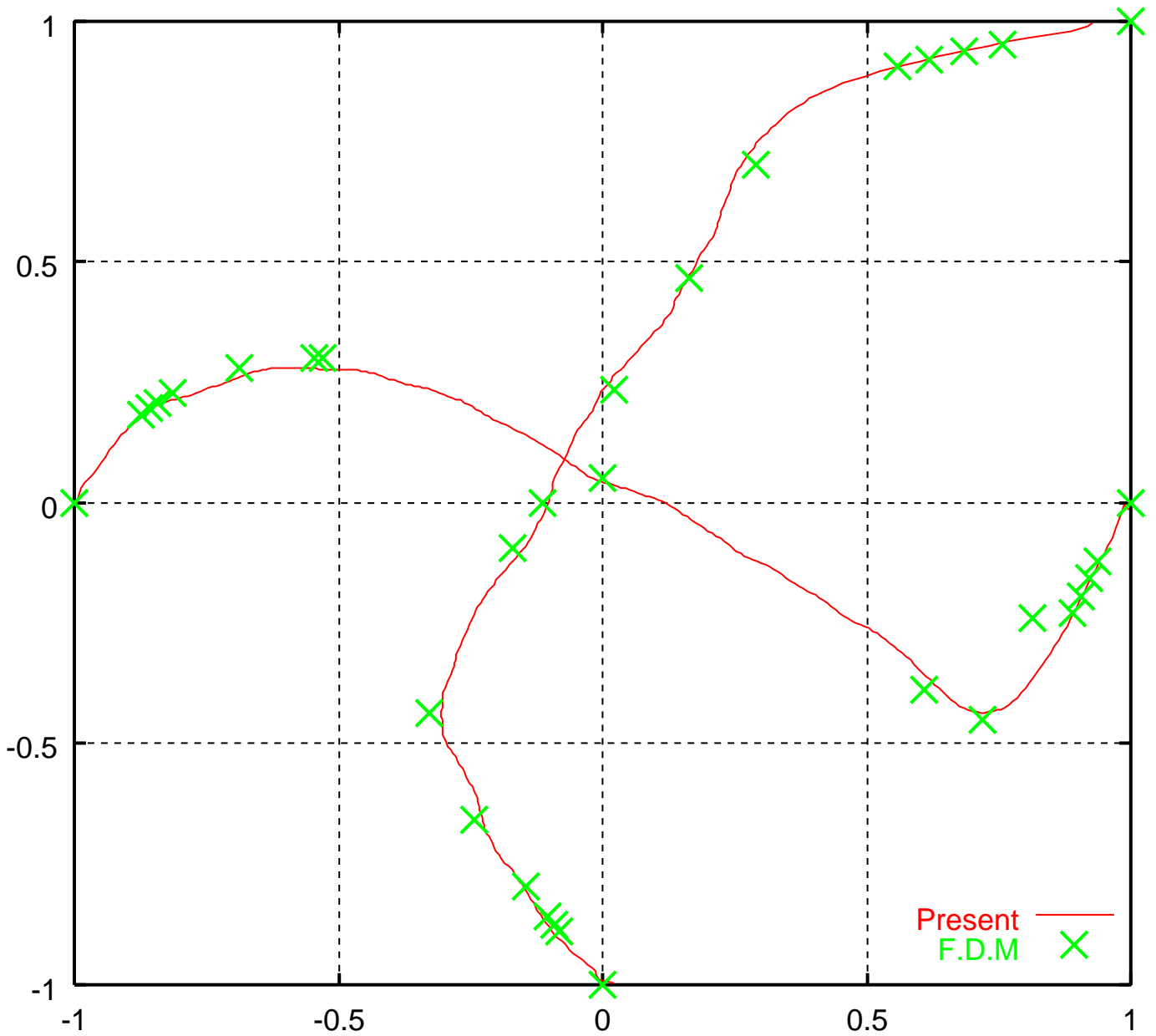


図 6.7:  $Re=400$  における速度分布

## 6.3 熱伝導の計算

熱の伝導に関する実験を行うため、はじめに以下の図のように、左右境界に温度の異なる境界、上下境界に断熱境界を用いて、温度の分布がどのようになるか計算を行った。

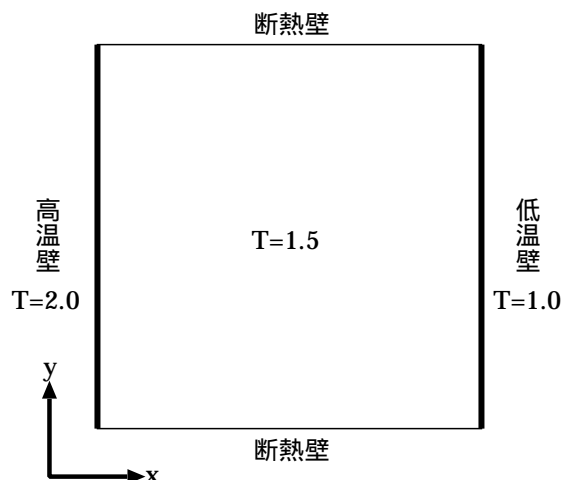


図 6.8: 熱伝導の初期条件

### 初期条件

格子は  $128 \times 128$  の正方格子とした。

境界条件は、上下の境界条件が第 5.1 節の滑りなし境界条件、左境界と右境界はそれぞれ  $T = 2.0$  と  $T = 1.0$  の温度壁境界 (第 5.3 節参照) を用いた。

粒子の初期配置は、温度  $T = 1.5$  で密度は一様に  $\rho = 4$  とした。

各物理量について、 $8 \times 8$  の空間平均をとり、さらに 48000 ステップから 50000 ステップまでの時間平均をとった。

### 平均ヌッセルト数

この計算は、 $x$  方向の温度が線形に変化するという解析解がある。

また、今回は熱流動の数値解析との比較のために、平均ヌッセルト数の計算を行った。

平均ヌッセルト数は、熱伝導特性を評価するために用いられる数であり、高温壁における垂直温度勾配の平均をとったものである。

平均ヌッセルト数は以下のように定義できる。

$$Nu = \int_0^1 \left(-\frac{\partial T^*}{\partial x^*}\right)_{x^*=0} dy^*$$

ここで、 $T^*$  は、温度の値を  $[0, 1]$  にとるように正規化した値、 $x^*, y^*$  は、それぞれ  $x$  座標と  $y$  座標の値を  $[0, 1]$  にとるように正規化した値である。熱流動による温度の輸送が無い場合、つまり、この計算条件による平均ヌッセルト数は 1 となる。

この平均ヌッセルト数について、今回は以下のように計算する。積分の中の微分の部分は、Taylor 展開

$$T^*(0 + \Delta x^*) = T^*(0) + \Delta x^* T'^*(0) + O((\Delta x)^2)$$

を用いることで、

$$T'^*(0) = \frac{T^*(0 + \Delta x^*) - T^*(0)}{\Delta x^*}$$

と表すことができる。そこで、

$$\begin{aligned} & \int_0^1 \left(-\frac{\partial T^*}{\partial x^*}\right)_{x^*=0} dy^* \\ &= \sum_{i=0}^{y_{max}} (T(0) - T(\Delta x)) \frac{\Delta y}{\Delta x} \frac{1}{T_{max} - T_{min}} \end{aligned}$$

のように、積分を和に置き換える。ここで、 $y_{max}$  は、 $y$  方向に物理量を持つ粗視化格子数である。 $\Delta x$  は境界から最も近い格子点への距離を正規化したものであり、 $\Delta y$  は、正規化された積分区間を和の数  $y_{max}$  に分割した値である。 $T_{max}, T_{min}$  は、左右境界の温度壁の温度であり、温度の値を  $[0, 1]$  に正規化するために、それらの差を割っている。

計算結果は以下の通りである。

	解析解	計算解
Nu 数	1	1.3092

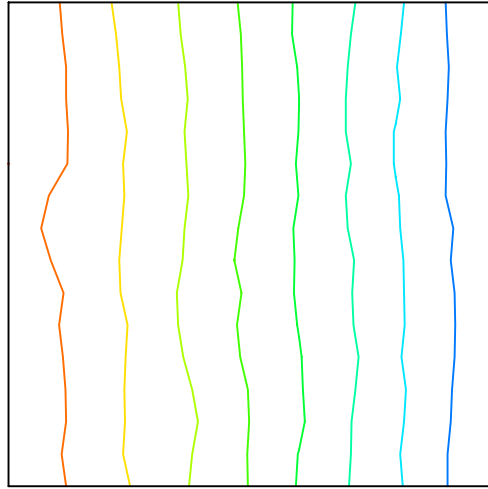


図 6.9: 等温線



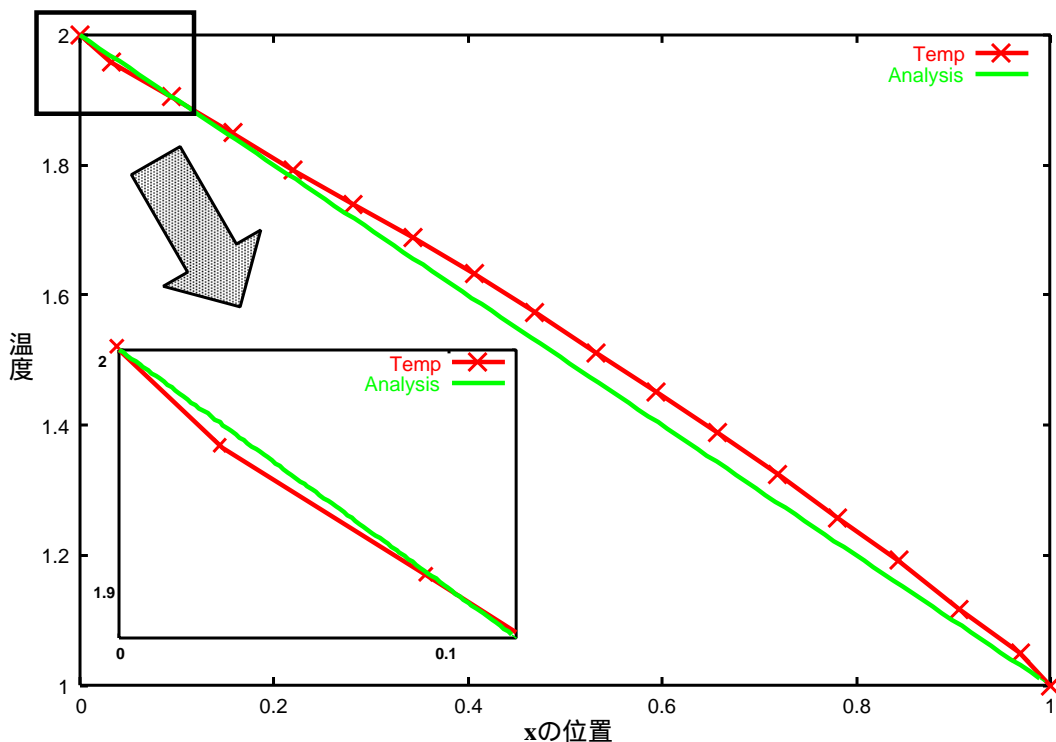


図 6.10: x 方向温度分布

温度分布のグラフ (6.10) は、 $y$  方向の温度分布について平均をとったものを、各  $x$  における温度とした。また、高温と低温の温度境界における温度は強制的にそれぞれ 2.0, 1.0 とした。対流が発生しない場合においては、温度分布が線形的に変化するため、平均ヌッセルト数の理論値が 1 になるのは明らかである。しかし、今回の平均ヌッセルト数が理論値と一致しない。温度分布のグラフにおいて、高温壁付近の理論値との温度差が生じていることが、平均ヌッセルト数に影響している。

平均ヌッセルト数は、その定義からわかるとおり、高温壁境界付近の温度勾配に関する値である。乱数を用いて確率的にシミュレートしている実数型格子ガス法において、数値計算により求まっている平均ヌッセルト数との比較は、それほど重要ではなく、温度がどのように分布しているか、という定性的な部分の方が重要であろう。

図 6.9 の等温線を見る限り、定性的には一致していると考えられる。

## 6.4 2次元サーマルキャビティ流れ

2次元サーマルキャビティ流れは、前章で用いた熱伝導の条件に、重力の影響を加えることにより、キャビティ内に生じる自然対流である。形状や境界条件が簡単であり、かつ、2次元自然対流であるので、プログラムの検査やベンチマーク問題によく取り上げられる。

### 初期条件

高温壁の温度  $T_{max} = 2.0$ , 低温壁の温度  $T_{min} = 1.0$  とし、格子数は  $128 \times 128$  であり、物理量の空間平均は  $8 \times 8$  であり、さらに 48000 から 50000 ステップの時間平均をとる。粒子の初期分布については、温度  $T = 1.5$  の Maxwell 分布で与え、密度  $\rho = 4$  で一様に配置した。重力加速度は  $g = 0.003$  とした。重力加速度については、次ページに詳細を記す。これらの条件により、レイリー数は式 (3.8) を用いて、ほぼ  $Ra = 1000$  と予測できる。

また、衝突ルールに垂直衝突ルールを用いることで、粘性係数を小さくすることができる。これにより、熱伝導率も小さくなる。その結果、他の条件を変える事なくレイリー数を大きくすることができると考えられる。垂直衝突ルールを用いた場合のレイリー数は、おおよそ  $Ra = 16000$  と予測できる。

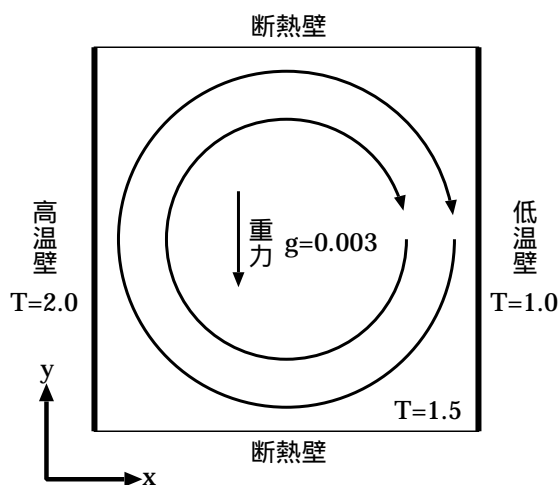


図 6.11: 2次元サーマルキャビティ流れ

## 重力の影響

重力の影響は、各タイムステップの並進過程において、粒子の鉛直方向の速度成分から、重力加速度を引くことにより表現した。重力の影響を考慮したフローチャートを示す。

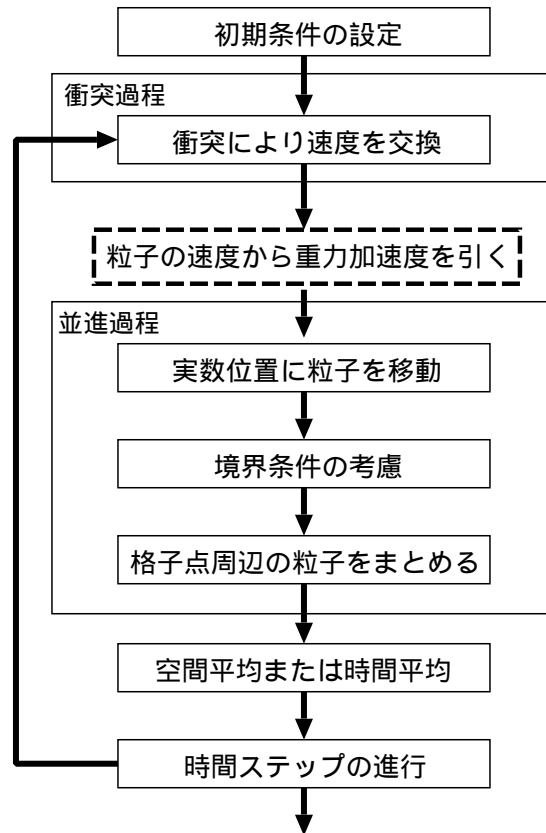


図 6.12: 重力の影響を考慮したフローチャート

このフローチャートでは、衝突過程の後に粒子の速度から重力加速度を引いているが、実際の計算では、衝突過程で格子点での平均速度を計算しているが、平均速度から重力加速度を引くことにより、多少計算が簡単になる。

重力の影響を考慮した後、境界条件を適用している。境界条件により速度を変換された粒子について、厳密には1タイムステップにおける衝突前後の時間割合を考慮して、重力の影響を考えなければならないが、計算の簡略化のために、今回は境界への衝突前のみ重力の影響を考慮することにした。

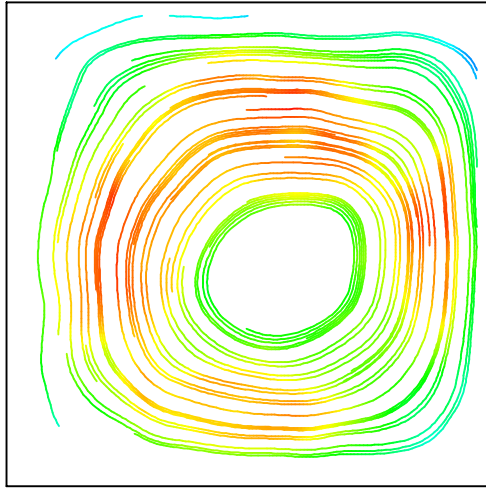


图 6.13:  $Ra=1000$  流线

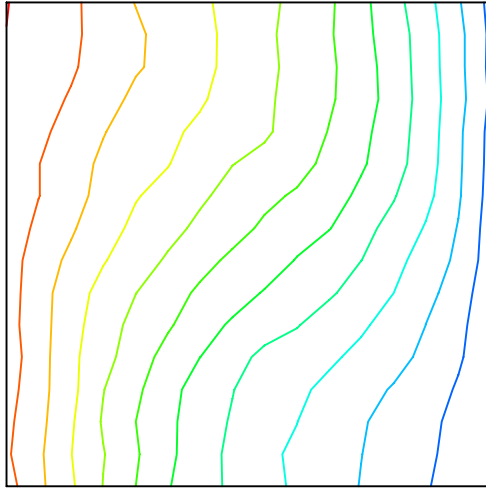


图 6.14:  $Ra=1000$  温度分布

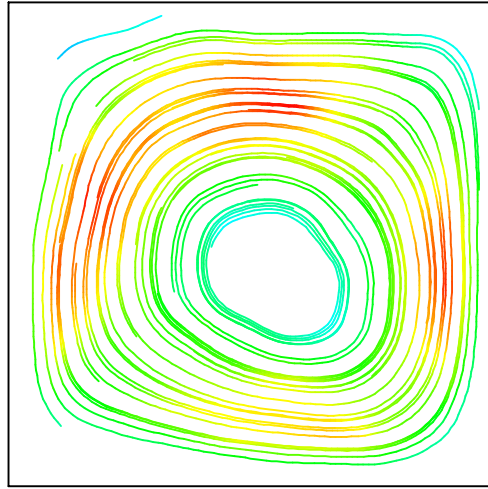


図 6.15:  $Ra=16000$  流線

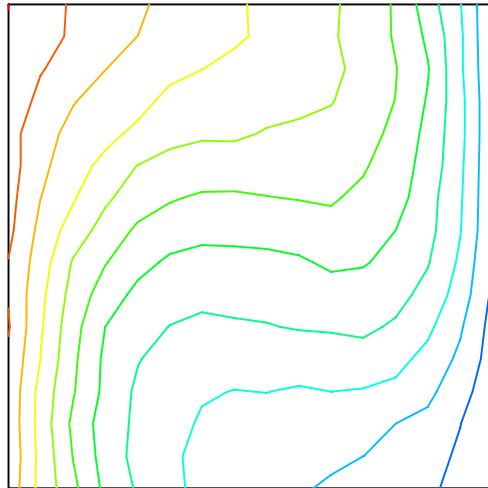


図 6.16:  $Ra=16000$  温度分布

前に行った熱伝導の計算条件に、重力を与えることにより計算空間に熱流動が発生しており、重力の設定が妥当であると考えられる。

この条件で平均ヌッセルト数の計算を行った。

レイリー数	解析解	計算解
1000	1.116	1.9036
10000	2.242	
16000		3.143

サーマルキャパシティ流れにおいても、平均ヌッセルト数が解析解から大きくずれてしまった。これは、前に行った重力が無い場合の計算において解析解と計算値がずれていることから、ある程度予想できることであった。

格子点数が  $128 \times 128$  であるにも関わらず、温度の計算のために、 $8 \times 8$  の空間平均をとっているため、物理量を持つ点は  $16 \times 16$  になっている。この物理量を持つ点の少なさが、平均ヌッセルト数の値に幾らか影響している可能性があると考えられる。

$Ra = 1000$  での温度分布図において、対流が発生した場合においても、滑りなし境界条件から等温線がほぼ垂直に発生していることから、温度分布の垂直方向の勾配がほぼ 0 になっていることが確認できる。このことは、滑りなし境界条件により垂直方向の温度分布が 0 になる境界条件がうまく再現できるということを示していると思われる。

また、文献 [11] における  $Ra = 1000$  における等温線と比較することにより、温度分布が、定性的にほぼ一致していることが確認できる。

動粘性係数を小さくすることにより、 $Ra$  数を大きくできる。その結果として、対流の影響が強くなり、温度が輸送されていることが確認された。また、 $Ra$  数の増加による平均ヌッセルト数の増加も確認できる。このことから、実数型格子ガス法による熱流動の解析が定性的に可能であると考えられることができる。

## 6.5 2次元ベナール対流

重力が存在する場において、水平な流体層を下から加熱するか上から冷やして温度差を与えると、温度差が小さい間は熱伝導により熱が下から上に伝達され、流体は静止したままである。温度差がある臨界値を超えると流体中に対流が発生し、熱は熱伝導以外に対流によっても輸送されるようになる。このときの流体運動は鉛直面内ではおよそ円運動を行っている。この対流はベナール対流と呼ばれている。

### 計算条件

上の境界には  $T = 1.0$  の温度壁、下の境界には  $T = 2.0$  の温度壁、左右の境界には周期境界条件を適用した。格子数は  $256 \times 256$  とし、空間平均は  $8 \times 8$  の普通の空間平均をとる。さらに 58000 ステップから 60000 ステップにおいて、時間平均をとった。重力加速度は鉛直方向  $g = 0.002$  とし、粒子の鉛直方向速度を、ステップ毎に重力加速度だけ引いている。

40000 ステップまで計算を行い、各物理量について最大  $8 \times 8$  の空間平均をとり、さらに 38000 から 40000 ステップの時間平均をとった。

また、格子数を水平方向に 3 倍にした計算も行った。この場合の計算条件は、上記のものと同じであるが、時間平均については、18000 から 20000 ステップの時間平均をとった。

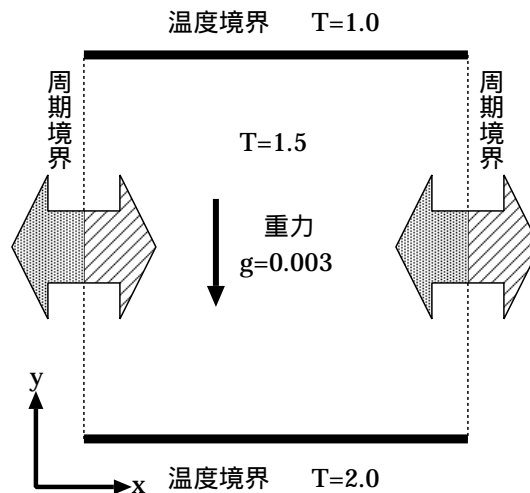


図 6.17: ベナール対流の初期条件

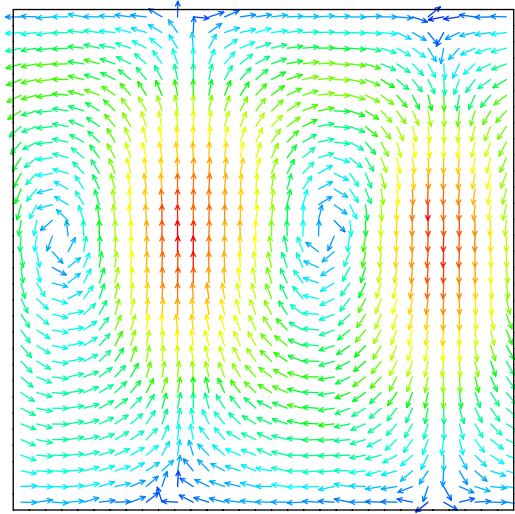


図 6.18: 縦:横=1:1 におけるベナール対流の速度ベクトル

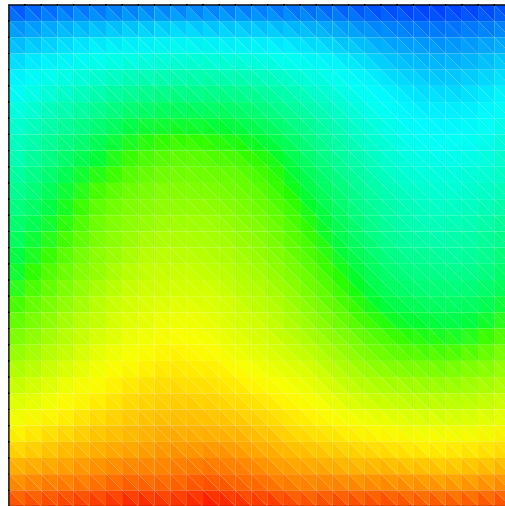


図 6.19: 縦:横=1:1 におけるベナール対流の温度分布

2つの対流が発生しているのが確認できる。温度分布を見ると、対流によって境界の温度が輸送されていることが確認できる。

計算空間に対して、渦の位置がずれているが、これは、左右境界に周期境界条件を用いていることから、どの位置に渦が発生してもおかしくないことを意味している。



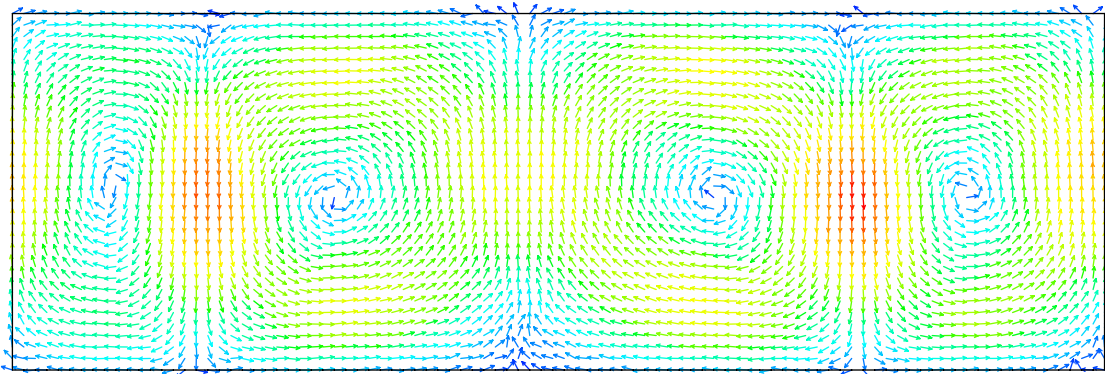


図 6.20: 縦:横=1:4 におけるベナール対流の速度ベクトル



図 6.21: 縦:横=1:4 におけるベナール対流の温度分布

左右の境界に周期境界条件を用いていることから、発生する渦の個数は必ず偶数個になると考えられる。水平方向に格子数を3倍にした場合については、4つの渦が確認できた。また、発生した渦により温度が輸送されていることも確認できる。

壁が持つ温度から得られるエネルギーのみで流れを形成するこのモデルでの各点の流速は、粒子に流速を与えているキャビティ流れに比べて、流速は非常に小さい。そのため、この図では速度の大きさを正規化している。

# 第 7 章

## まとめ

- 本研究では、一般的に流体解析に用いられる数値解法とは異なり、流体を形成する粒子の運動をシミュレートすることにより、流れ場を解析する手法である粒子法の一つである実数型格子ガス法を用いて、流れ場のシミュレーションを行い、さらに、熱流動解析の可能性を示した。
- 実数での粒子位置の表現と、本研究での提案手法である、格子点を境界からずらして設置することを併用することにより、境界付近の物理量の空間平均、特に熱流動解析に必要とされる温度においては安定して計算が出来ることが判明した。
- 速度に関する流れ場における 2 つのシミュレーションを行った。上面に速度を与える速度境界、下面に速度を 0 にする滑りなし境界、左右境界に周期境界条件を用いて、2次元クエット流れをシミュレートした。流体が境界により引きずられ、流体の速度が垂直方向に線形に変化する現象が確認できた。それにより、滑りなし境界条件と速度境界が有用であることを示した。
- 境界上面に速度境界、その他の境界に滑りなし境界条件を適用して 2次元キャピティ流れのシミュレートを行った。現在最も精度が良いとされている GHIA の数値解法の結果と比較することにより、定性的、定量的にも有効な結果が得られることを示した。
- 重力がない状態で、熱伝導による温度の伝達のシミュレートを行った。また、平均ヌッセルト数による定量的な比較を行った。境界付近の温度が解析解と一致せず、定量的には一致したとは言えないが、定性的には一致していると考えられる。
- 1 タイムステップの計算において、衝突過程と並進過程の間に、全粒子の鉛直速度成

分から重力加速度を引くことにより、計算空間内にかかる重力の影響を与えた。また、重力がある場において、粒子が壁から与えられた熱により対流ができる熱流動キャビティ流れのシミュレートを行った。熱伝導の計算と同様に平均ヌッセルト数による定量的な比較を行ったが、解析解との一致は確認できなかった。しかし、レイリー数の増加に従う平均ヌッセルト数が増加と温度輸送の度合いが大きくなっていることが確認でき、また、文献との比較から定性的には一致していると考えられる。このことから、温度境界条件による計算空間内への影響は適切なものであることを示した。

- 鉛直方向境界の温度差の影響と重力の影響により、対流が発生するベナール対流の現象をシミュレートした。その結果、対流の発生とそれによる温度の輸送現象が確認できた。さらに、計算領域を水平方向に大きくとることにより、対流の数の増加が確認された。

## これからの課題

- 流れ場のシミュレーションにおける問題点は、音速と動粘性係数が温度に比例して大きくなっているため、非圧縮性を維持したまま、大きな Reynolds 数の流れ場を計算するためには、格子数を多くする必要がある。また、この手法は 3 次元への拡張が容易であるものの、計算のためには、より多くの格子が必要である。この手法は、格子数と粒子数に比例して計算時間が増大するため多くの計算時間が必要になる。しかし、実数型格子ガス法における計算は局所的である。そのため、領域分割による計算の並列化を用いることにより、計算時間の短縮が比較的容易に行うことができると考えられる。
- 実数型格子ガス法は、計算空間に正方格子を用いている。今回の実験は、計算空間が正方形、または長方形の整った領域における流れ場であった。しかし、実際問題として、複雑形状まわりの流れ場の計算が必要とされる。従来の格子ガス法により複雑形状物体の周りの流れ場を解析する場合は、細かい格子を用いて、階段状に曲線または曲面を表現していた。実数型格子ガス法においても、同様の手法を用いることができると考えられる。しかしこの場合、計算コストが莫大になる。そのため、複雑形状の境界をどのように設定するかが問題になると考えられる。

# appendix

## 3次元における温度壁境界条件の導出

平衡状態にある分子群の速さに対する速度分布関数は Maxwell 分布に従う。

$$f_c(c)dc = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{m_g}{2kT_0}\right)^{\frac{3}{2}} c^2 \exp\left(-\frac{m_g}{2kT_0}c^2\right)dc$$

平均速さ  $\bar{c}$  および平均エネルギー  $\bar{E}$  は以下ようになる。

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{8kT_0}{\pi m_g}}$$

$$\bar{E} = \frac{3}{2}kT_0$$

表面に入射した気体分子が完全に表面温度の平衡状態になった (表面に完全に適応した) 後に表面から散乱される分子群の速度分布は、表面温度  $T_0$  の平衡状態にある気体が孔から流出する分子群の速度分布と考えられる。速度分布関数が 1 で与えられるとき、速さ  $c \sim c + dc$  で移動する分子の単位体積当りの個数は、数密度を  $n$  とすると、 $n f_c(c)dc$  となる。いま、図に示すように、面積  $dA$  の孔から、 $dA$  の法線から  $\theta$  の角度を有する立体角  $d\Omega$  の方向に  $dt$  時間内に流出する分子数を考える。速さ  $c \sim c + dc$  で  $d\Omega$  の方向に流出する分子の個数は、図の傾いた円柱内 (体積  $dAcdt \cos \theta$ ) に存在するこれらの分子が  $d\Omega$  方向に  $d\Omega/4\pi$  の確率で流出すると考えれば、 $n(dAcdt \cos \theta)(d\Omega/4\pi)f_c(c)dc$  で与えられる。したがって、単位面積、単位体積当り  $d\Omega$  の方向に流出する速さ  $c \sim c + dc$  の分子数は  $nc \cos \theta (d\Omega/4\pi)f_c(c)dc$  となる。これを  $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ ,  $\int_0^\infty c f_c(c)dc = \bar{c}$  であることを考慮して積分すれば、単位時間当りに単位面積から流出する分子数は  $n\bar{c}/4$  となる。したがって、 $n\bar{c}/4$  で規格化した孔から流出する分子群、すなわち個体表面から散乱する分子群の速度分布関数は次のようになる。

$$f_0(c)dc = \frac{2}{\pi} \left(\frac{m_g}{2kT_0}\right)^2 c^3 \exp\left(-\frac{m_g}{2kT_0}c^2\right) \cos \theta d\Omega dc$$

上式から、平均速度  $\bar{c}$  および平均エネルギー  $\bar{E}$  は次のように計算される。

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{9\pi kT_0}{8m_g}}$$

$$\bar{E} = 2kT_0$$

## 参考文献

- [1] A.Malevanets, Statistical mechanics of hydrodynamic lattice gases, Thesis for the degree of Ph.D, Dept. of Chemistry, Univ. of Tronto,1997.
- [2] A.Malevanets, R.Kapral, Continuous-velocity lattice-gas model of fluid flow Europhys. Lett. 44(5), pp. 552-558,1998.
- [3] 日本機械学会編, 原子・分子の流れ-希薄気体力学とその応用-, 共立出版,1996.
- [4] F.O.Goodman, H.Y.Wachman, Dynamics of Gas-Surface Scattering, ACADEMIC PRESS,1976.
- [5] U.GHIA, K.N.GHIA, and C.T.SHIN, High-Re Solusions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method, Journal of Computaional Physics48,387-411(1982).
- [6] 保原 充,大宮司 久明, 数値流体力学 - 基礎と応用, 東京大学出版会,1992.
- [7] 橋本 康弘 他, 実数型格子ガス法を用いた3次元混相流解析, 流体マイクロシミュレーションの大規模体系の適用研究, 日本原子力学会 報告書, 2000.
- [8] 秋丸 春夫,鳥脇 純一郎, 現代 確率論の基礎, オーム社,1983.
- [9] 阿部 龍蔵, 統計力学 [第2版], 東京大学出版会,1966.
- [10] 宮武 修,脇本和昌共著, 乱数とモンテカルロ法, 森北出版,1978.
- [11] 秋山 守,高橋 亮一,  $\alpha$ -FLOW による熱と流れのシミュレーション朝倉書店 1997

# 謝辞

本研究を行なうにあたり、ご指導、ご鞭撻をいただいた皆様に心より厚くお礼申し上げます。