

Title	格子ボルツマン法による二成分熱流体解析アルゴリズムの開発
Author(s)	廣川, 雄一
Citation	
Issue Date	2002-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	author
URL	http://hdl.handle.net/10119/1579
Rights	
Description	Supervisor: 松澤 照男, 情報科学研究科, 修士

修 士 論 文

格子ボルツマン法による二成分熱流体
解析アルゴリズムの開発

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

廣川 雄一

2002 年 3 月

修 士 論 文

格子ボルツマン法による二成分熱流体 解析アルゴリズムの開発

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 堀口進 教授

審査委員 敷田幹文 助教授

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

010096 廣川 雄一

提出年月: 2002 年 2 月

概 要

格子ボルツマン法は流体を仮想的な粒子の集合として捕らえ、粒子の並進運動及び衝突を計算する事で流体の解析を行う手法である。粒子運動の記述はボルツマンの輸送方程式の衝突項を BGK 項で近似した物が用いられ、局所的な物理量の伝搬は粒子運動により行われるために流れ場全体を記述する事なく流れ場の解析を行うことが可能である。現在、格子ボルツマン法では一成分熱流体による気液二相流、二成分非熱流体解析が行われているが二成分熱流体を扱った論文は少ない。そこで本稿では、従来の格子ボルツマン法を多成分流体解析モデルへ拡張する手法を示す。本拡張法は格子ボルツマン法における粒子速度制限及び平衡分布関数に依存しないため、格子ボルツマンモデルに依存せず適用することが可能である。また、本拡張法では各成分毎に衝突前後で質量保存が成立し、各成分の総和において衝突前後の運動量保存及びエネルギー保存が成立する。

本拡張法の妥当性の検討の為、拡張前の格子ボルツマンモデル及び拡張法を適用し二成分流体モデルに拡張した格子ボルツマンモデルを用い数値実験を行った。拡張法を適用した二成分流体格子ボルツマンモデルにおいて二成分が同等である場合、拡張前の一成分流体格子ボルツマンモデルによる解析結果と同じ結果が得られなければならない。非熱流体格子ボルツマンモデルによる 2 次元キャビティ流れ及び熱流体格子ボルツマンモデルによる 2 次元ベナール対流で拡張法を適用した格子ボルツマンモデルを用い検証を行った結果、いずれの計算例とも拡張前の一成分流体モデルと拡張後の二成分流体モデルで同様な結果が得られた。これらの結果から本拡張法の妥当性を確認する事が出来た。

これらを踏まえて拡張法を用いた二成分熱流体解析を行った結果、自律的な相分離及び境界相の変形等定性的な熱流動解析が行えた。

目次

第1章	はじめに	1
第2章	格子ボルツマン法	2
2.1	ボルツマンの輸送方程式	2
2.2	ボルツマン方程式の離散化	3
2.3	格子ボルツマンモデルの例	3
2.3.1	非熱流体格子ボルツマンモデル	3
2.3.2	熱流体格子ボルツマンモデル	5
2.4	境界条件	7
2.4.1	滑りなし条件	7
2.4.2	滑りあり条件	7
2.4.3	周期境界条件	8
2.4.4	境界の実装例	8
2.5	格子ボルツマンのアルゴリズム	9
第3章	格子ボルツマン法の拡張	10
3.1	多成分流体モデルへの拡張法	10
3.1.1	二成分流体モデルへの拡張例	10
3.1.2	二成分流体の相互作用	11
3.1.3	衝突前後の各保存について	13
3.2	外力の導入	16
3.2.1	外力の導入例	16
3.2.2	外力導入時の問題点	18
3.3	二成分非熱流体による拡張法の検証	18
3.3.1	ボルツマン方程式	19
3.3.2	計算条件	19
3.3.3	計算結果及び考察	20
3.4	外力導入に関する検証	20
3.5	二成分熱流体による拡張法の検証	22
3.5.1	ボルツマン方程式	22
3.5.2	計算条件	23

3.5.3	計算結果及び検証	24
第 4 章	数値実験	27
4.1	二成分自然対流	27
4.1.1	ボルツマン方程式	27
4.1.2	計算条件	28
4.1.3	計算結果	28
4.2	考察	36
第 5 章	まとめ	37
5.1	結論	37
5.2	検討課題	38

第1章 はじめに

数値流体解析にはナビアストークス方程式及びポアソン方程式を離散化する有限差分法や有限要素法が良く用いられるが、これらの手法では二成分流体の解析に境界相をあらかじめ設定しなければならず混和二成分流体を解析する事は難しい。

一方、粒子法に基づく解析手法では粒子の運動により流れ場を解析するために従来の有限差分法の様に流れ場全体を記述する必要がない。その為、有限差分法で扱う事が困難な混和二成分流体の解析や自律的な二成分流体の境界相形成が行えるという利点がある。

粒子法には粒子の運動を詳細に追跡する分子動力学法やモンテカルロ法があるが、粒子に作用する力を1タイムステップ毎に解かなければならない為計算資源の制約から計算可能な粒子の個数がある程度限られてしまう。

粒子の詳細な運動の情報が必要ない場合には粒子の統計情報を用いた格子ボルツマン法が有用である。格子ボルツマン法は粒子の運動を格子に当てはめあらかじめ衝突則を規定した格子ガス法が基になっている。

格子ガス法は粒子の速度を制限し、あらかじめ衝突則を規定した事で計算効率が向上したが、衝突判定の為に1格子点上に同じ速度を持つ粒子が2つ以上存在出来ないという計算上の制約がある為に観測した物理量にノイズが発生する。

格子ボルツマン法は粒子の速度制限を設けるという事に関しては格子ガス法と同様であるが、粒子運動の記述にボルツマンの輸送方程式を用いる。この為格子ガス法の様な粒子の排他則は存在せず観測した物理量のノイズを除去する事が可能である。

格子ボルツマン法では非熱流体による二成分流体の解析、熱流体による一成分気液二相流の解析等が行われてきたが、二成分熱流体を扱った論文は少ない。本研究では従来の1成分流体モデルを多成分流体モデルへ拡張する手法を提案し、非熱流体および熱流体への適用を行った。拡張手法の妥当性を検討するため非熱流体モデルを二成分非熱流体モデルに拡張し、二成分の差異をなくした時に一成分非熱流体モデルと同じ振る舞いをするかどうかを検証する。次に熱流体モデルを二成分熱流体モデルに同様の手法で拡張し、二成分の差異がない時に一成分熱流体モデルと同じ振る舞いをするかどうかを検証した。また、この拡張法を適用した二成分熱流体モデルによる重力下における二成分自然対流の解析を行った。

第2章 格子ボルツマン法

2.1 ボルツマンの輸送方程式

まず, 格子ボルツマン法の基礎となるボルツマン方程式について説明する. ボルツマンの輸送方程式は

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)}{\partial t} = \left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)}{\partial t} \right)_{drift} + \left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)}{\partial t} \right)_{coll} \quad (2.1)$$

である [1]. ここで, $f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)$ は位置と速度の位相空間における時刻 t , 位置 $\mathbf{r}$ において速度 $\mathbf{e}$ をもつ粒子の数である¹. 式 (2.1) の左辺は単位時間当りの粒子数変化, 右辺第 1 項は粒子の並進運動による単位時間当りの粒子数変化, 右辺第 2 項は粒子の衝突による単位時間当りの粒子数変化を表す. また, 粒子の並進運動による粒子数変化は

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)}{\partial t} \right)_{drift} = -\mathbf{e} \cdot \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t) - \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{e}} f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t) \quad (2.2)$$

である. ∇ は空間微分, $\nabla_{\mathbf{e}}$ は速度に関する微分を表す. $\mathbf{a}$ は外力による粒子速度 $\mathbf{e}$ の時間変化を表し衝突による影響は含まない. 故に一般的なボルツマンの輸送方程式は

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)}{\partial t} + \mathbf{e} \cdot \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t) + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{e}} f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t) = \left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)}{\partial t} \right)_{coll} \quad (2.3)$$

となる. 次に右辺の衝突項を緩和時間 $\tau_c(\mathbf{r}, \mathbf{e})$ を用いた BGK 項に近似する.

$$\left(\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)}{\partial t} \right)_{coll} = - \left(\frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t) - f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)}{\tau_c(\mathbf{r}, \mathbf{e})} \right) \quad (2.4)$$

ここで $f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)$ は平衡状態の粒子分布を示す. また, 緩和時間 $\tau_c(\mathbf{r}, \mathbf{e})$ は位置 $\mathbf{r}$ 及び速度 $\mathbf{e}$ の関数であるが, 簡単の為緩和時間が位相空間で全て同じ値を取ると仮定し

$$\tau_c = \tau_c(\mathbf{r}, \mathbf{e}) \quad (2.5)$$

とおくと最終的に

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)}{\partial t} + \mathbf{e} \cdot \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t) + \mathbf{a} \cdot \nabla_{\mathbf{e}} f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t) = - \left(\frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t) - f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)}{\tau_c} \right) \quad (2.6)$$

となる.

¹ここでの粒子数は時刻 t , 微少体積 $\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}$ において速度 $\mathbf{e} + \Delta\mathbf{e}$ を持つ粒子を発見する確率密度である.

2.2 ボルツマン方程式の離散化

本節では簡単の為 1 次元の場合のボルツマン方程式を扱う. 外力がない場合, 式 (2.6) は

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)}{\partial t} + \mathbf{e} \cdot \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t) = - \left(\frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t) - f^{\text{eq}}(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)}{\tau_c} \right) \quad (2.7)$$

となり, Δt で離散化すると

$$\frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t + \Delta t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)}{\Delta t} + \mathbf{e} \cdot \frac{f(\mathbf{r} + \Delta \mathbf{r}, \mathbf{e}, t + \Delta t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t + \Delta t)}{\Delta \mathbf{r}} = - \left(\frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t) - f^{\text{eq}}(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)}{\tau_c} \right) \quad (2.8)$$

ここで $\mathbf{e} = \Delta \mathbf{r} / \Delta t, \tau_c = \tau \Delta t$ と置くと

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{e} \Delta t, \mathbf{e}, t + \Delta t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t) = - \left(\frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t) - f^{\text{eq}}(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)}{\tau} \right) \quad (2.9)$$

となる. τ は平衡状態に達するまでに要する衝突回数を表す単一緩和係数と呼ばれるパラメータであり流体の動粘性係数と結び付けられる.

2.3 格子ボルツマンモデルの例

2.3.1 非熱流体格子ボルツマンモデル

ここでは S.Hou らによる 2D9V 非熱流体格子ボルツマンモデルを取り上げる [2]. このモデルでは粒子速度を以下の様に制限する. 尚, 粒子速度は位置及び時間に依存しない.

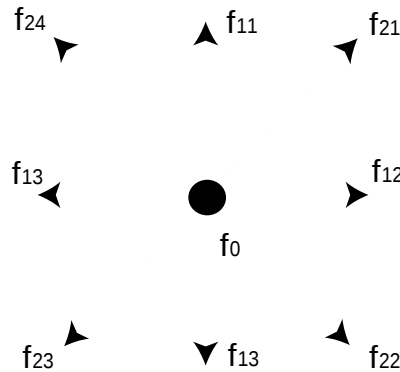


図 2.1: 2D9V

$$\begin{aligned}
\mathbf{e}_0 &= (0, 0) \\
\mathbf{e}_{1i} &= \left(\cos\left(\frac{i\pi}{2}\right), \sin\left(\frac{i\pi}{2}\right) \right) \\
\mathbf{e}_{2i} &= \sqrt{2} \left(\cos\left(\frac{i\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{i\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \right) \\
(i &= 1, 2, 3, 4)
\end{aligned} \tag{2.10}$$

ここで速度の下付きの添字 σi の σ は速さ, i は方向を表す. 格子ボルツマン法で一般的に用いられる表記は

$$f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{e}_{\sigma i}, t) \tag{2.11}$$

である. 以降, 粒子分布はこの表記に従う事とする.

局所物理量と粒子分布は以下のように対応付けられる.

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) \tag{2.12}$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i} \tag{2.13}$$

式 (2.12) は位置 $\mathbf{r}$ に存在する粒子数の和で局所密度を表す. 式 (2.13) は各粒子の速度の集合平均を取った物理量であり局所流速を示す.

粒子の平衡状態における粒子分布 $f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)$ はボルツマン方程式の定常解である Maxwell の速度分布に従う分布を仮定し, Chapman-Enskog 展開から求められ

$$\begin{aligned}
f_0^{eq}(\mathbf{r}, t) &= \frac{4}{9} \left[1 - \frac{3}{2} \mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t) \right] \\
f_{1i}^{eq}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{9} \left[1 + 3(\mathbf{e}_{1i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)) + \frac{9}{2} (\mathbf{e}_{1i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))^2 - \frac{3}{2} \mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t) \right] \\
f_{2i}^{eq}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{36} \left[1 + 3(\mathbf{e}_{2i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)) + \frac{9}{2} (\mathbf{e}_{2i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))^2 - \frac{3}{2} \mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t) \right]
\end{aligned} \tag{2.14}$$

となる. 式 (2.14) は $\rho(\mathbf{r}, t)$, 及び $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ を再現する粒子分布を求める式である. 従って, 粒子分布の非平衡量の減衰は式 (2.13) 及び式 (2.9) によって表される. 尚, 局所物理量の伝搬 (拡散) は粒子の並進によって行われる. また, 局所物理量とパラメータの関係は

$$Re = \frac{UL}{\nu} = \frac{6UL}{\Delta t(2\tau - 1)} \tag{2.15}$$

となる. ここで, Re はレイノルズ数, U は代表速度, L は代表長さを表す.

2.3.2 熱流体格子ボルツマンモデル

本節では薦原, 高田らによって提案された 2D21V 熱流体格子ボルツマンモデルを取り上げる [3]. このモデルでは以下の様に粒子速度を制限する. C は最小速さを指定するパラメータである. また, 粒子速度は位置及び時間に依存しない.

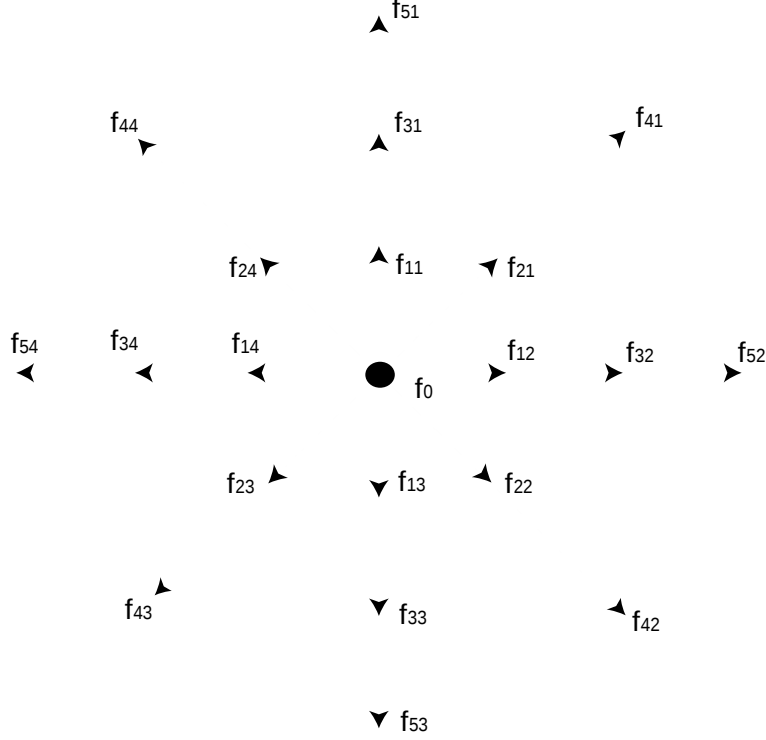


図 2.2: 2D21V

$$\begin{aligned}
 \mathbf{e}_0 &= (0, 0) \\
 \mathbf{e}_{1i} &= C \left(\cos \left(\frac{i\pi}{2} \right), \sin \left(\frac{i\pi}{2} \right) \right) \\
 \mathbf{e}_{2i} &= \sqrt{2}C \left(\cos \left(\frac{i\pi}{2} + \frac{\pi}{4} \right), \sin \left(\frac{i\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \right) \\
 \mathbf{e}_{3i} &= 2C \left(\cos \left(\frac{i\pi}{2} \right), \sin \left(\frac{i\pi}{2} \right) \right) \\
 \mathbf{e}_{4i} &= 2\sqrt{2}C \left(\cos \left(\frac{i\pi}{2} + \frac{\pi}{4} \right), \sin \left(\frac{i\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \right) \\
 \mathbf{e}_{5i} &= 3C \left(\cos \left(\frac{i\pi}{2} \right), \sin \left(\frac{i\pi}{2} \right) \right) \\
 (i &= 1, 2, 3, 4)
 \end{aligned} \tag{2.16}$$

また, 局所物理量と粒子分布は以下のように対応付けられる.

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) \quad (2.17)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)\mathbf{e}_{\sigma i} \quad (2.18)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + T(\mathbf{r}, t) \right] = \sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i}^2 \quad (2.19)$$

式 (2.17) は位置 $\mathbf{r}$ に存在する粒子数の和で局所密度を表す. 式 (2.18) は各粒子の速度の集合平均を取った物理量であり局所流速を示す. また, 式 (2.19) は粒子の運動エネルギーと局所温度を関係付ける式である. 平衡分布関数はボルツマンの速度分布を基本として

$$\begin{aligned} f_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) &= \rho(\mathbf{r}, t) F_{\sigma}(\mathbf{r}, t) \left[1 + \frac{\mathbf{e}_{\sigma i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)}{T(\mathbf{r}, t)} + \frac{(\mathbf{e}_{\sigma i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))^2}{2T^2(\mathbf{r}, t)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2T(\mathbf{r}, t)} + \frac{(\mathbf{e}_{\sigma i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))^3}{6T^3(\mathbf{r}, t)} - \frac{(\mathbf{e}_{\sigma i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)) \cdot (\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))}{2T^2(\mathbf{r}, t)} \right] \\ F_0(\mathbf{r}, t) &= 1 - \frac{85T^3(\mathbf{r}, t)}{48C^6} + \frac{175T^2(\mathbf{r}, t)}{48C^4} - \frac{49T(\mathbf{r}, t)}{18C^2} \\ F_1(\mathbf{r}, t) &= \frac{13T^3(\mathbf{r}, t)}{16C^6} - \frac{71T^2(\mathbf{r}, t)}{48C^4} - \frac{3T(\mathbf{r}, t)}{4C^2} \\ F_2(\mathbf{r}, t) &= \frac{T^2(\mathbf{r}, t)}{3C^4} - \frac{T^3(\mathbf{r}, t)}{4C^6} \\ F_3(\mathbf{r}, t) &= -\frac{5T^3(\mathbf{r}, t)}{32C^6} + \frac{25T^2(\mathbf{r}, t)}{96C^4} - \frac{3T(\mathbf{r}, t)}{40C^2} \\ F_4(\mathbf{r}, t) &= -\frac{T^2(\mathbf{r}, t)}{192C^4} + \frac{T^3(\mathbf{r}, t)}{64C^6} \\ F_5(\mathbf{r}, t) &= -\frac{T^3(\mathbf{r}, t)}{48C^6} + \frac{T^2(\mathbf{r}, t)}{48C^4} - \frac{T(\mathbf{r}, t)}{180C^2} \end{aligned} \quad (2.20)$$

となる. 最小速さ C は 1 格子点上で計算可能な流速及び温度の範囲に関わるパラメータである. $C=1$ の場合, 1 格子点上で再現可能な 1 方向の流速最大値は粒子速度の最大値以下なので $0 \leq U_x \leq 3$ である. 計算実行時に 1 格子点でも流速がこの計算可能範囲を外れた場合, 粒子の平衡分布が負になり流れ場が発散する. 一方, $C=n$ の場合 1 格子点上で扱える流速の範囲は $0 \leq U_x \leq 3n$ となる為, 最小速さを n 倍すれば扱える流速も n 倍となる. しかしながら n を大きくするにつれて数値安定性が低下する事が確認された.

2.4 境界条件

格子ボルツマン法の境界条件は境界上の物理量設定及び粒子の反射則より成り立つ. 粒子反射則には大きく分けて次の3種類が存在する.

2.4.1 滑りなし条件

静止している固定壁の場合粒子を元に来た方向に粒子を反射させる Bounce-Back 条件を用いる (図 2.3). この反射条件は壁の法線及び接線方向の速度が平均的に 0 になるため静止壁の境界条件に適用される.

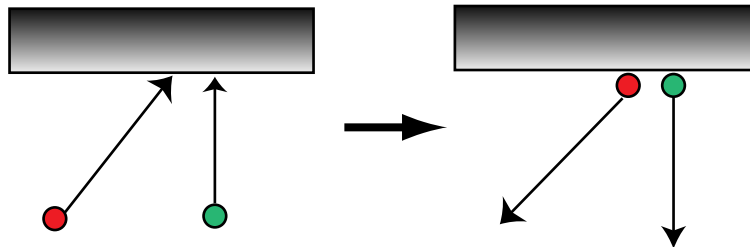


図 2.3: No-Slip(Bounce-Back) 条件

2.4.2 滑りあり条件

移動壁の場合は粒子の壁の接線方向速度成分を維持したまま法線方向速度成分の符号を逆転させる (図 2.4). この反射条件は壁の接線方向の速度成分が平均的に 0 とならず物理量が接線方向に伝搬するため移動壁に適用される.

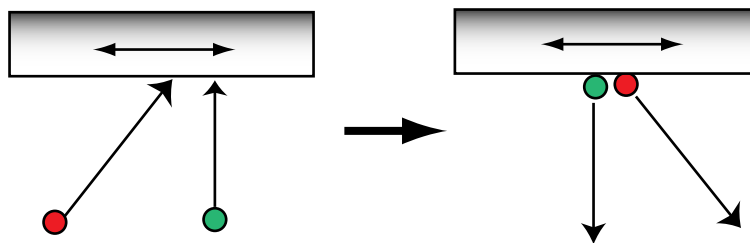


図 2.4: Slip 条件

2.4.3 周期境界条件

計算領域から外れた粒子を再び計算領域に流入させ, 計算領域の境界を共有するように条件を設定する. 図 2.5 は上下左右の境界を全て周期境界とした例である.

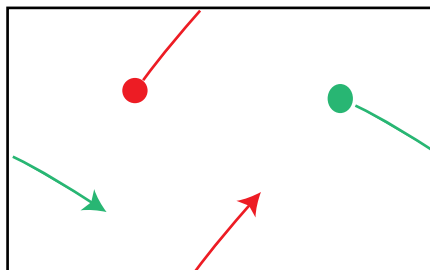


図 2.5: Periodical Boundary

2.4.4 境界の実装例

ここでは固定壁における粒子の反射の実装例を示す. 粒子の指標は図 2.1 及び図 2.2 と同様である.²

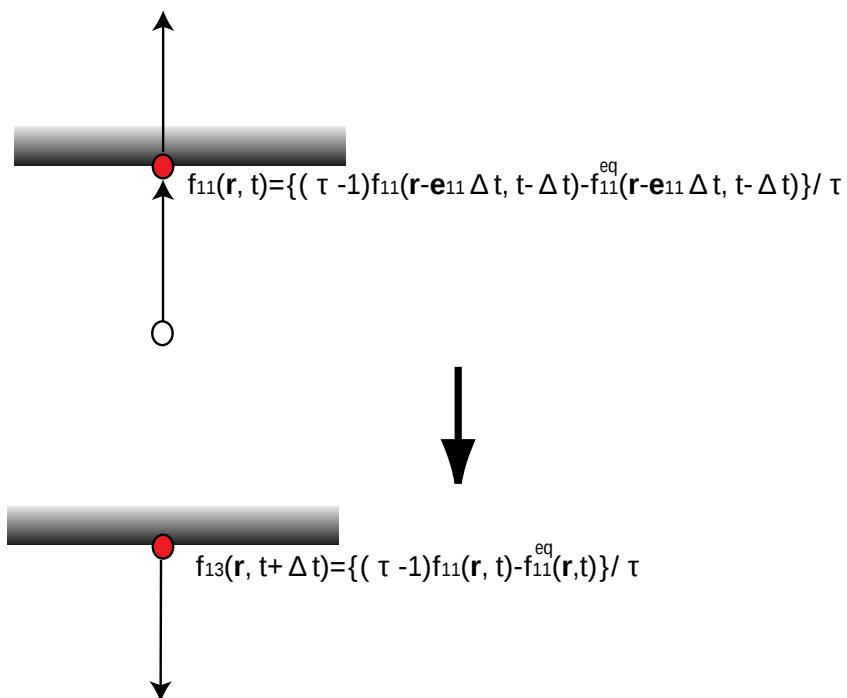


図 2.6: Particle Reflection

²また、熱流動モデルの場合は境界を格子の中間に取ることによって境界上の物理量を精度良く扱える [4]

2.5 格子ボルツマンのアルゴリズム

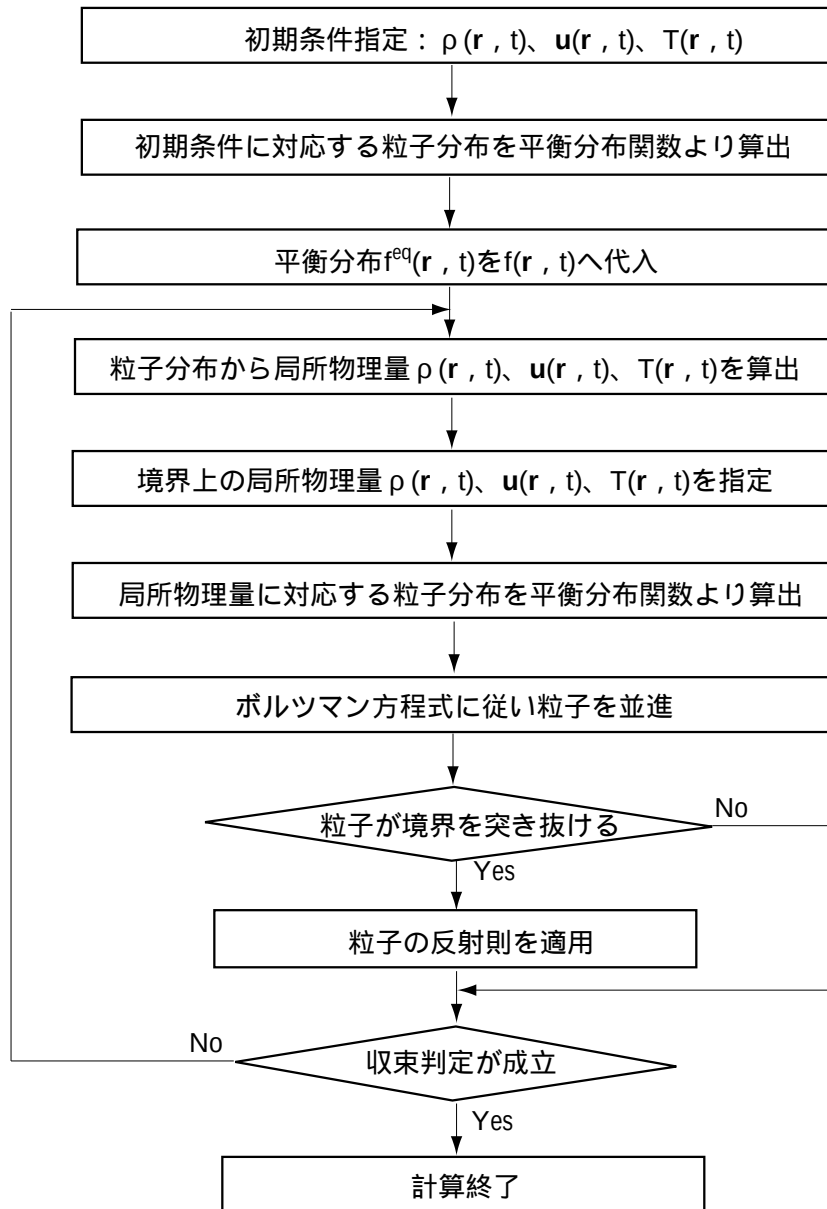


図 2.7: 格子ボルツマン法のアルゴリズム

図 2.7 は外力の作用しない基礎的な格子ボルツマン法のアルゴリズムである。収束判定には各格子点における粒子分布の非平衡量の平均を用いた。

第3章 格子ボルツマン法の拡張

3.1 多成分流体モデルへの拡張法

M.R.Swift らの二成分流体モデルはエネルギー保存を考慮していない為、熱流動を扱う事が困難であった [5]. 本研究ではエネルギー保存を考慮し熱を考慮することが可能な多成分流体モデルへの拡張手法を提案する. 本研究で提案する拡張法では

- 各成分毎に格子ボルツマン方程式を用いる.
- 各成分の相互作用は平衡分布により考慮する.

とする. 粒子速度制限及び平衡分布関数は自由に選択する事が可能である為、本拡張法はボルツマンモデルに依存せず適用可能である. 本拡張手法では多成分流体への拡張が行えるがここでは簡単な為二成分流体への拡張を例に拡張法を示す.

3.1.1 二成分流体モデルへの拡張例

二種類の粒子を粒子 f と粒子 h とすると各粒子分布は2本のボルツマン方程式 (3.1), (3.2) によって記述される.

$$f_{\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t + \Delta t) - f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau_f} [f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) - i f_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] \quad (3.1)$$

$$h_{\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t + \Delta t) - h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau_h} [h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) - i h_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] \quad (3.2)$$

ここで, Δt は単位時間, τ_f, τ_h は各粒子の単一緩和係数, $f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)$ と $h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)$ は位置 $\mathbf{r}$, 時刻 t における速度 $\mathbf{e}_{\sigma i}$ を持つ粒子分布を表す. また, $i f_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)$ と $i h_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)$ は2種類の粒子の相互作用を考慮した各粒子の平衡分布であり、本拡張法ではこの平衡分布を通じて2種類の粒子の相互作用を考慮する.

3.1.2 二成分流体の相互作用

[並進過程]

並進過程において

- 異種類の粒子は衝突を起さない.
- 同種類の粒子も衝突を起さない.
- 並進は各粒子毎の格子ボルツマン方程式に従う.

と仮定する. 図 (3.1) における粒子の色の違いは粒子の種類を表し, 矢印の長さは粒子数の多さを表す.

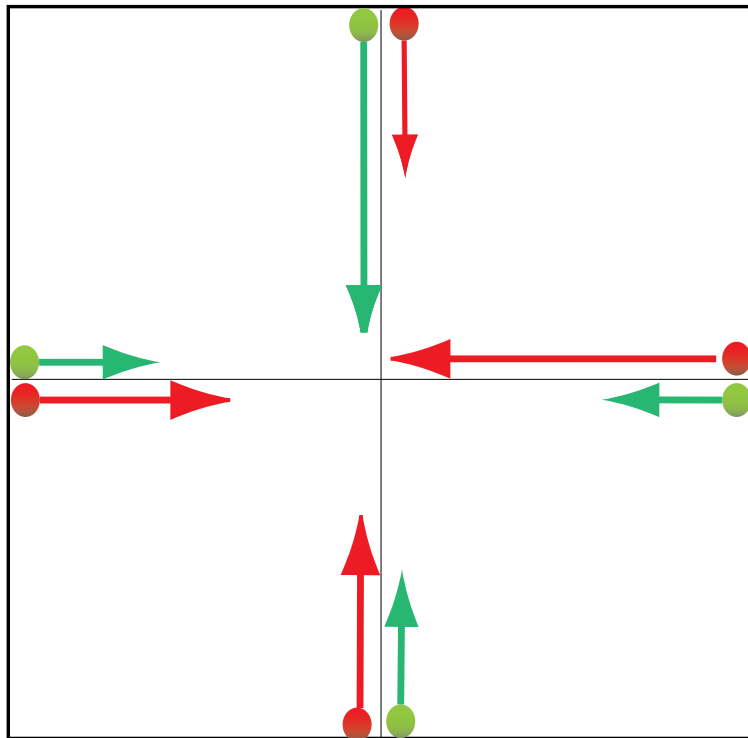


図 3.1: 並進過程

[衝突過程]

衝突過程において

- 衝突時には粒子の区別を行わない.
- 同種類, 異種類の粒子が衝突する.
- 質量保存, 運動量保存及びエネルギー保存が成立する様に衝突を設定.
- 平衡状態において二種類の粒子は同じ物理量を持つ¹

と仮定する. 図 (3.2) は粒子衝突後の平衡状態を表す.

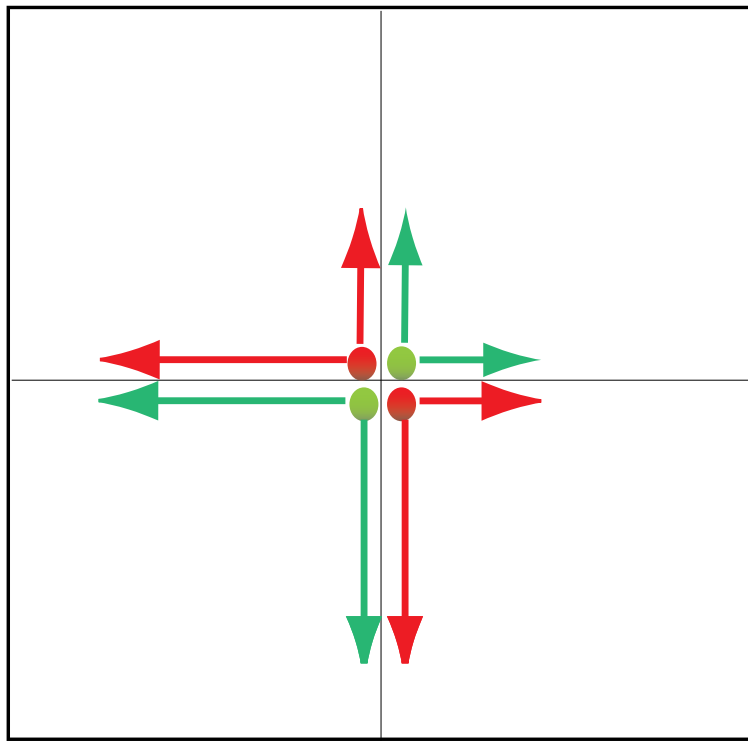


図 3.2: 衝突過程

¹ 1 格子点における二種類の粒子の存在比が 1:1 の場合

これらを数式で表す. まず, 二種類の粒子の区別を行わずに局所物理量を式 (3.3), (3.4), (3.5) から求める. ここで, $m_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) = f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) + h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)$ とおくと

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} \{m_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} \quad (3.3)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} \{m_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)\}\mathbf{e}_{\sigma i} \quad (3.4)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + T(\mathbf{r}, t) \right] = \sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} \{m_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} \mathbf{e}_{\sigma i}^2 \quad (3.5)$$

ここで, $\rho(\mathbf{r}, t)$ は局所密度, $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ は局所流速, $T(\mathbf{r}, t)$ は局所温度を表す.

式 (3.3), (3.4), (3.5) から求めた 2 粒子の総和を取った時の物理量及び平衡分布関数から得られた平衡分布を $m_{\sigma i}^{eq}$ と置くと

$$m_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) = i f_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) + i h_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (3.6)$$

で示される様に二粒子の和となっている. また、式 (3.11) における右辺第 1, 2 項は未知数である. これら 2 つの未知数、つまり各粒子の平衡分布を求めるには衝突前の 2 粒子の存在比を用いた次式

$$i f_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) = \frac{m_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \sum_{\sigma i} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)}{\rho(\mathbf{r}, t)} \quad (3.7)$$

$$i h_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) = \frac{m_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \sum_{\sigma i} h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)}{\rho(\mathbf{r}, t)} \quad (3.8)$$

より決定する. 以上により相互作用を考慮した各粒子の平衡分布を求めることが出来た.

3.1.3 衝突前後の各保存について

前節で求められた各粒子毎の平衡分布について質量保存が成立すること、また、各粒子の総和を取った時に運動量保存及びエネルギー保存が成立することを示す. まず、衝突前の粒子分布は衝突後の平衡状態における粒子の平衡分布と以下のように対応付けられる.

$$f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) = i f_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) + f_{\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t) \quad (3.9)$$

$$h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) = i h_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) + h_{\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t) \quad (3.10)$$

$$m_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) = m_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) + m_{\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t) \quad (3.11)$$

ここで $f_{\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t)$, $h_{\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t)$ は各粒子の非平衡分布を、 $m_{\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t)$ は 2 粒子総和時の非平衡分布を表す. また、格子ボルツマン法において平衡分布関数を求める際には以下の仮定を用いる.

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} \{m_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)\} \quad (3.12)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} \{m_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)\} \mathbf{e}_{\sigma i} \quad (3.13)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + T(\mathbf{r}, t) \right] = \sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} \{m_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)\} \mathbf{e}_{\sigma i}^2 \quad (3.14)$$

式 (3.3)、(3.4)、(3.5)、(3.11)、(3.12)、(3.13)、(3.14) より以下の式が成立する.

$$\sum_{\sigma, i} \{m_{\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t)\} = 0 \quad (3.15)$$

$$\sum_{\sigma, i} \{m_{\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t)\} \mathbf{e}_{\sigma i} = 0 \quad (3.16)$$

$$\sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} \{m_{\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t)\} \mathbf{e}_{\sigma i}^2 = 0 \quad (3.17)$$

これらを用いて質量保存、外力が作用しない時の運動量保存及びエネルギー保存を示す.

質量保存

まず、粒子 f について着目すると式 (3.3),(3.7),(3.15) より時刻 t、位置 $\mathbf{r}$ において

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma, i} i f_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\sum_{\sigma, i} m_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \sum_{\sigma, i} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)}{\sum_{\sigma, i} m_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)} \\ &= \sum_{\sigma, i} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (3.18)$$

が成立する. 式 (3.18) における左辺は衝突後の平衡状態における粒子分布の総和、右辺は衝突前の粒子分布の総和であり、右辺と左辺は同等であることから衝突前後で粒子 f の質量が保存されていることが分かる. 粒子 h についても同様に式 (3.3),(3.8),(3.15) より時刻 t、位置 $\mathbf{r}$ において

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma, i} i h_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\sum_{\sigma, i} m_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \sum_{\sigma, i} h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)}{\sum_{\sigma, i} m_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)} \\ &= \sum_{\sigma, i} h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (3.19)$$

が成立する. 粒子 h についても衝突前後で質量が保存されている. 粒子 f および粒子 h はそれぞれ衝突前後で質量が保存されていることから 2 粒子の総和においても質量保存が成立する.

運動量保存について

運動量保存については 2 粒子の総和を取った時に成立する. 時刻 t , 位置 $\mathbf{r}$ において式 (3.4),(3.16) より

$$\sum_{\sigma i} m_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i} = \sum_{\sigma i} m_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i} \quad (3.20)$$

が成立する. 式 (3.20) における左辺は衝突後の 2 粒子の総和を取った時の運動量であり、右辺は衝突前の 2 粒子の総和による運動量である. 以上より 2 粒子の総和では衝突前後で運動量が保存していることが分かった.

エネルギー保存について

エネルギー保存についても 2 粒子の総和を取った時に成立する. 時刻 t , 位置 $\mathbf{r}$ において式 (3.5),(3.17) より

$$\sum_{\sigma i} \frac{1}{2} m_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i}^2 = \sum_{\sigma i} \frac{1}{2} m_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i}^2 \quad (3.21)$$

が成立する. 式 (3.21) における左辺は衝突後の 2 粒子の総和を取った時の運動エネルギーであり、右辺は衝突前の 2 粒子の総和による運動エネルギーである. 以上より 2 粒子の総和では衝突前後で運動エネルギーが保存していることが分かった.

3.2 外力の導入

ボルツマン方程式では外力を考慮する事が可能だが格子ボルツマン法では粒子の速度を制限した為に外力による粒子の速度変化を扱う事は困難である。非熱流体格子ボルツマンにおいて外力を考慮する手法が David R.Noble らによって提案されているが質量保存しか満たさない為に熱流体格子ボルツマンに適用する事は難しい [6]。そこで、本研究では定性的に外力を考慮する手法を提案する。

3.2.1 外力の導入例

先に述べたように格子ボルツマン法では粒子の速度制限を行った為に外力による粒子速度変化を扱う事は難しい。そこで、外力による粒子の速度変化が生じた時の局所物理量を再現する粒子分布の数の片寄りを粒子の速度変化の代わりに用いる。ここでは重力を対象として外力による影響の導入法を示す。

1. 重力が無い場合の局所物理量 $\rho(\mathbf{r}, t), \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), T(\mathbf{r}, t)$ を粒子分布より求める。図 3.3 は外力が作用しない時の粒子数を表す。
2. 次に重力の影響を考慮した流速 $\mathbf{u}'(\mathbf{r}, t)$ を式 (3.22) より求める。

$$\mathbf{u}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{F}(\mathbf{r}, t)\Delta t \quad (3.22)$$

ここで $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ は位置 $\mathbf{r}$, 時刻 t における外力を表す。

3. $\rho(\mathbf{r}, t), \mathbf{u}'(\mathbf{r}, t), T(\mathbf{r}, t)$ に対応する粒子の平衡分布を平衡分布関数より求め、これを外力が無い場合の粒子分布と置き換える。図 3.4 は外力が作用した時の局所流速変化に対応した粒子数を表す。この場合、重力により鉛直下向の速度が発生する為に下向きの粒子数が増大する。

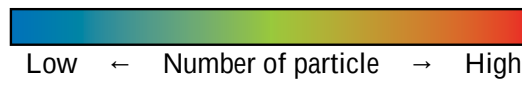
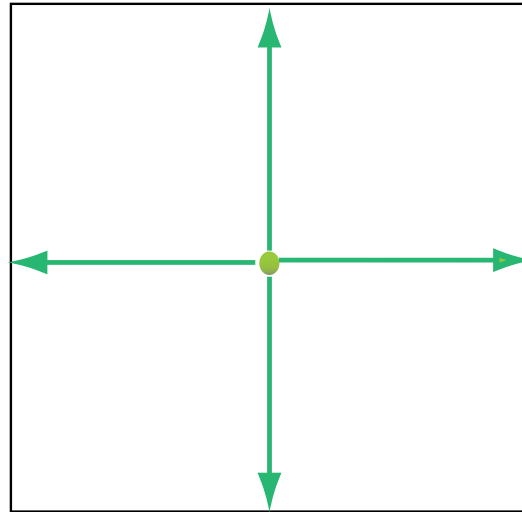


図 3.3: 重力なし

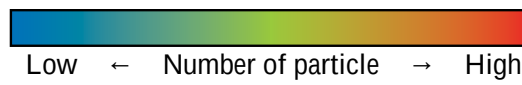
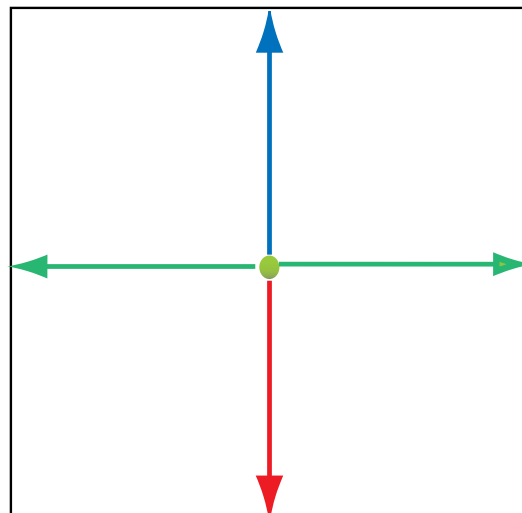


図 3.4: 重力あり

3.2.2 外力導入時の問題点

本研究で提案した外力導入法には以下の制約が存在する.

1. 局所物理量を算出する際の流速の平均化

外力の影響を考慮した流速を求める際に現在の流速を算出するがこの際粒子の速度が平均化されるという問題が生じる.

2. 単一緩和係数の範囲

単一緩和係数 τ には亜緩和領域と過緩和領域が存在する.

亜緩和領域

$\tau > 1$ の場合, 外力を正しく扱う事が可能な事が確認出来た.

過緩和領域

過緩和領域 $1/2 \leq \tau < 1$ では 1 回未満の衝突で平衡状態になる為に格子ボルツマン法的前提が成立しない. その為に外力を正しく計算する事が出来ない.

また, 1 回の衝突で平衡状態に達する $\tau = 1$ の場合では非平衡量の蓄積が起らない為数値的には安定である. しかしながら多成分流体に異なる外力が作用する場合, 本研究で提案した外力導入法では衝突時に全種類の粒子の流速が平均化されるために正しく外力を扱うことは難しい.

3.3 二成分非熱流体による拡張法の検証

二成分流体に拡張した格子ボルツマンモデルにおいて二粒子の差異が存在しない場合, 元の一成分格子ボルツマンモデルと同じ数値結果が得られる筈である (但し, 流れ場の総質量は拡張モデルおよび元のモデルとも同じにする²⁾). 本章では非熱流体モデルを拡張し検証を行った. ここでは S.Hou らの 2D9V モデルと本拡張法を適用した二成分流体モデルを用いて二次元キャビティ流れの計算を行なった.

²⁾流速は局所密度の影響を受けない

3.3.1 ボルツマン方程式

粒子 f および h は次の 2 式

$$f_{\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i} \Delta t, t + \Delta t) - f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau_f} [f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) - i f_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] \quad (3.23)$$

$$h_{\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i} \Delta t, t + \Delta t) - h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau_h} [h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) - i h_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] \quad (3.24)$$

により記述される. また, 局所物理量と粒子分布は

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} \{f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) + h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} \quad (3.25)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} \{f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) + h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} \mathbf{e}_{\sigma i} \quad (3.26)$$

と対応付けられる. また, 衝突時の演算には以下の式を用いる.

$$m_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) = i f_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) + i h_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) \quad (3.27)$$

$$i f_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) = \frac{m_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) \sum_{\sigma i} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)}{\rho(\mathbf{r}, t)} \quad (3.28)$$

$$i h_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) = \frac{m_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) \sum_{\sigma i} h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)}{\rho(\mathbf{r}, t)} \quad (3.29)$$

3.3.2 計算条件

格子点数 129x129, 外力の作用しない $\text{Re}=100$ ($\nu = 0.1$) のキャビティ流れの計算を行った. 上壁は移動壁である為粒子の反射則は滑りあり条件を用い, 境界上の格子点の流速は常に $\mathbf{u} = (0.1, 0.0)$ と置き計算を行った. また, その他の壁は固定壁であり粒子の反射則に滑りなし条件を適用し, 境界上の格子点の流速は常に $\mathbf{u} = (0, 0)$ に設定した.

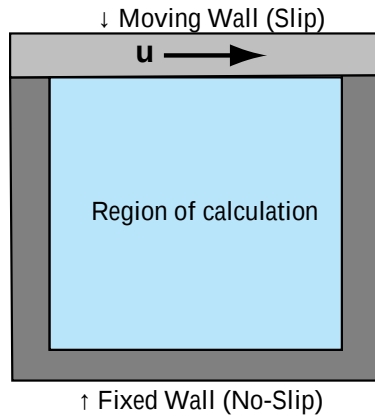


図 3.5: 2-D Cavity Flow

3.3.3 計算結果及び考察

拡張 2D9V モデルは元の 2D9V モデルと同等な結果が得られた。これにより本研究で提案した多成分拡張手法は外力の作用しない非熱流体モデルにおいて有効であると結論付けられる。

3.4 外力導入に関する検証

3.3 でのキャビティ流れの上壁は移動壁である為キャビティ内の流体に対する外力と捕らえる事が出来る。3.2 節で提案した外力の影響による粒子速度の変化を粒子分布密度の片寄りで置き換える手法の妥当性を検討するために 1 成分非熱流体モデルを用い、3.3 と同じ計算領域、初期条件及び境界条件による計算を行い、U.Ghia らによる差分法の結果 [7] と比較をした。

図 3.6 は定常状態における流線である。U.Ghia らの流線と比較して渦中心の位置が一致している事が確認出来た。

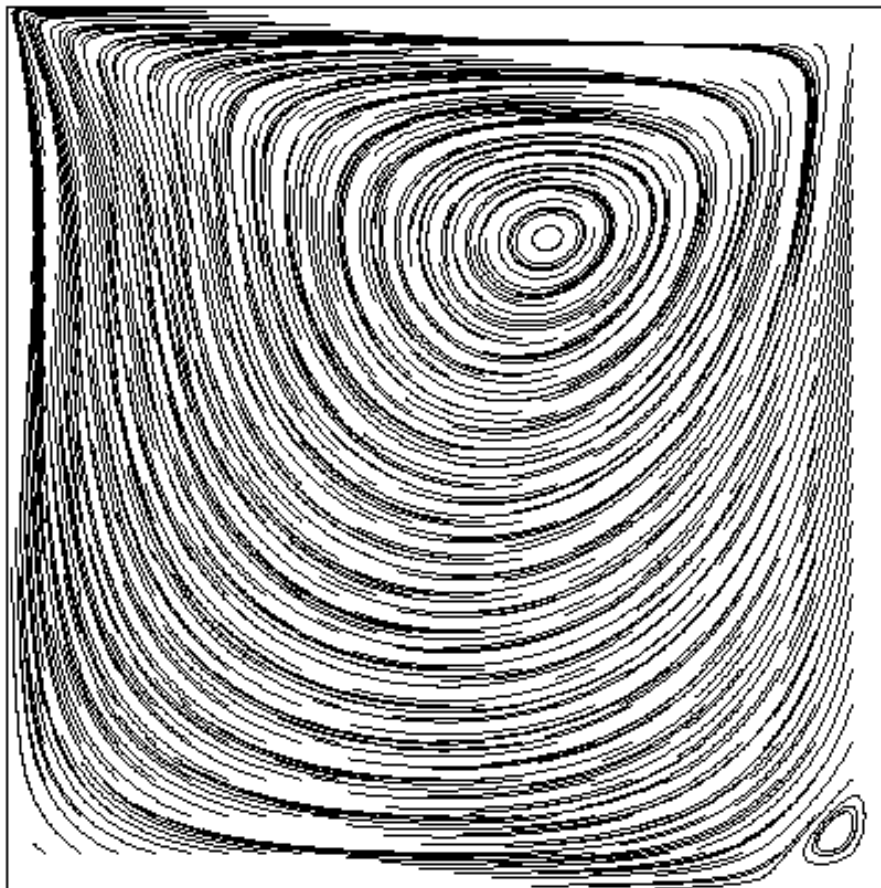


図 3.6: Streamline of cavity flow

また, 定量的な比較を行う為に定常状態のキャビティ中心に於ける流速を U.Ghia らによる差分法データと比較した (図 3.7). 図中の点は U.Ghia らの差分法データを表し, 線は本研究で得られたデータである. 差分法との定性的, 定量的な一致が見られる. また, この

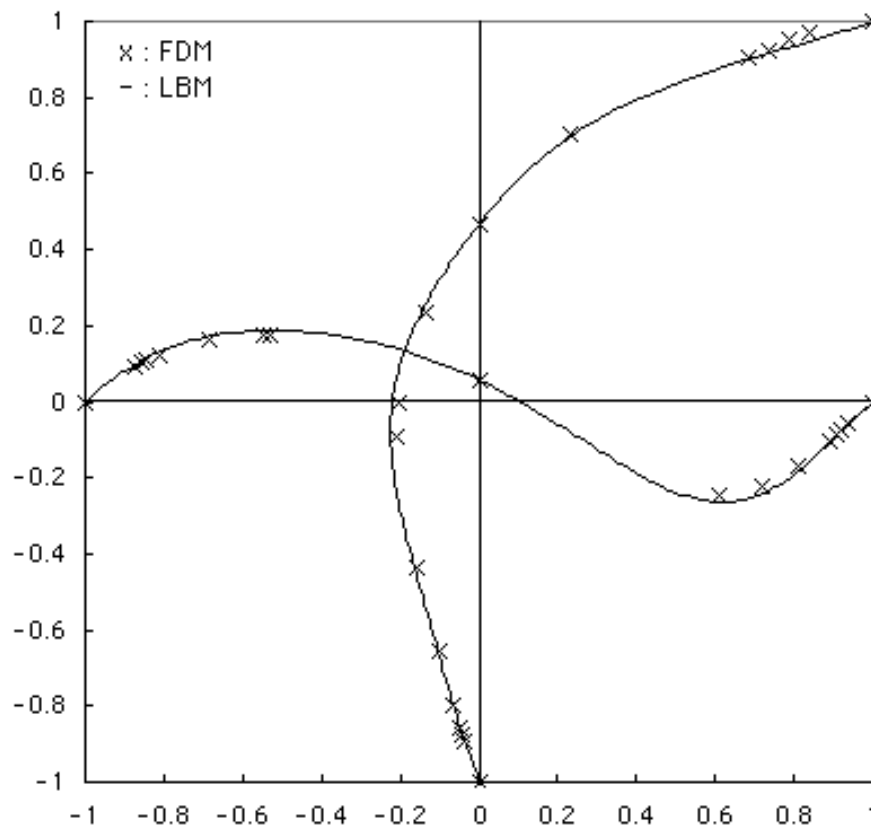


図 3.7: Velocity at center of cavity

時の流速の差分法との平均誤差は

$$\Delta_x = 0.075450517$$

$$\Delta_y = 0.078795655$$

であるが, 格子点の密度を 2 倍にした時 (257x257) の差分法との平均誤差は

$$\Delta_x = 0.02934396$$

$$\Delta_y = 0.04767823$$

となり精度が向上した. このことから粒子速度変化を粒子数変化に置換する手法は有用である事が確認出来た.

3.5 二成分熱流体による拡張法の検証

次に熱流体格子ボルツマンモデルへの適用可能性を検討する為に薦原らによる 2D21V 熱流体モデルを二成分流体モデルに拡張し, 二流体の差異をなくした場合に元の熱流体モデルと同様の結果が得られるかを検討した (但し, 流れ場の総質量は拡張モデルおよび元のモデルとも同じにする).

3.5.1 ボルツマン方程式

粒子 f および h は次の 2 式

$$f_{\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t + \Delta t) - f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau_f} [f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) - if_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] \quad (3.30)$$

$$h_{\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t + \Delta t) - h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau_h} [h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) - ih_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] \quad (3.31)$$

により記述される. また, 局所物理量と粒子分布は

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} \{f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) + h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} \quad (3.32)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} \{f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) + h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)\}\mathbf{e}_{\sigma i} \quad (3.33)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + T(\mathbf{r}, t) \right] = \sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} \{f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) + h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} \mathbf{e}_{\sigma i}^2 \quad (3.34)$$

と対応付けられる. また, 衝突時の演算には以下の式を用いる.

$$m_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) = if_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) + ih_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) \quad (3.35)$$

$$if_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) = \frac{m_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) \sum_{\sigma i} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)}{\rho(\mathbf{r}, t)} \quad (3.36)$$

$$ih_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) = \frac{m_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) \sum_{\sigma i} h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)}{\rho(\mathbf{r}, t)} \quad (3.37)$$

3.5.2 計算条件

格子点数 100×20 , $Ra=4800$ のベナール対流計算を行った. 外力には重力及び浮力を考慮し, 重力と浮力の釣り合いを崩す為に初期条件として流速に擾乱を加えた. 尚, 擾乱は今川による以下の手法を用いた [8].

$$u_x(\mathbf{r}, t) = \sqrt{T(\mathbf{r}, t)}(-2\log_e a)\cos 2\pi b \quad (3.38)$$

$$u_y(\mathbf{r}, t) = \sqrt{T(\mathbf{r}, t)}(-2\log_e a)\sin 2\pi b \quad (3.39)$$

ここで, a, b は一様乱数である.

また, 左右は周期境界, 上壁は冷却固定壁, 下壁は発熱固定壁とした (図 3.8).

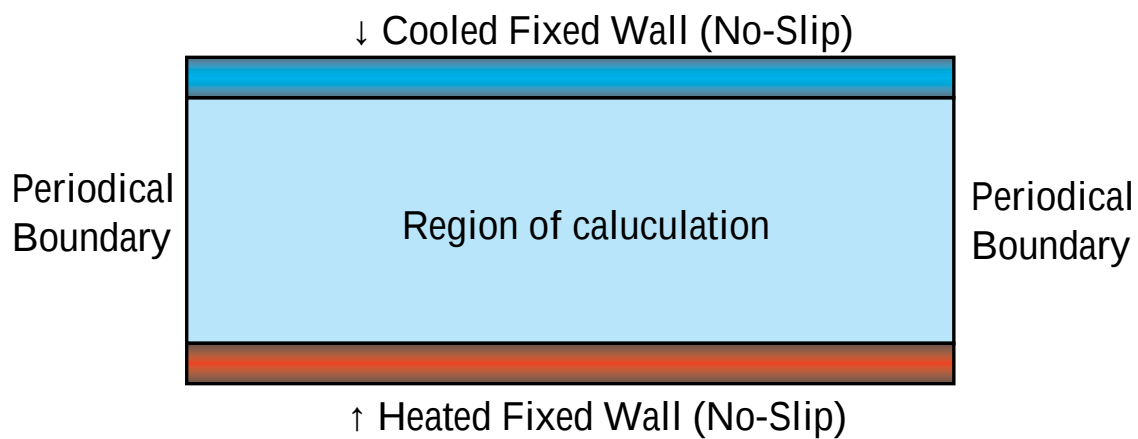


図 3.8: Benard Convection

3.5.3 計算結果及び検証

外力計算時の誤差が生じた為に拡張前の一成分熱流体との結果に 1 ~ 2 % 程度の誤差が生じた. そこで計算領域の y 軸を固定した時 ($y=10$) の物理量を熱流体モデルと拡張法を適用した二成分熱流体モデルで比較を行った.

・流速

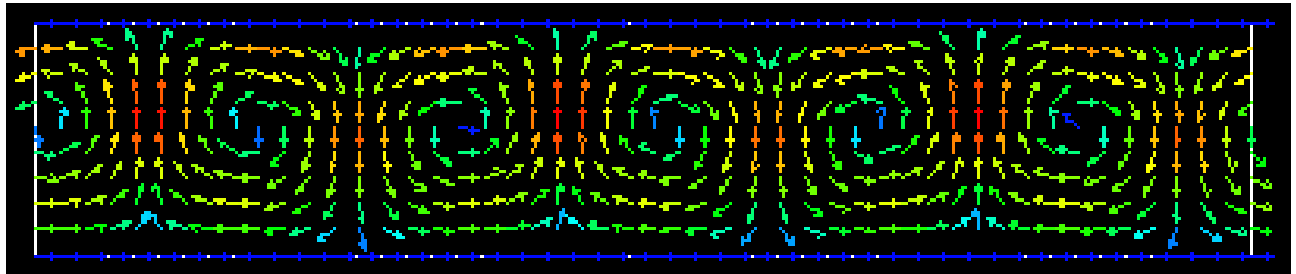


図 3.9: Velocity vector of Benard convection

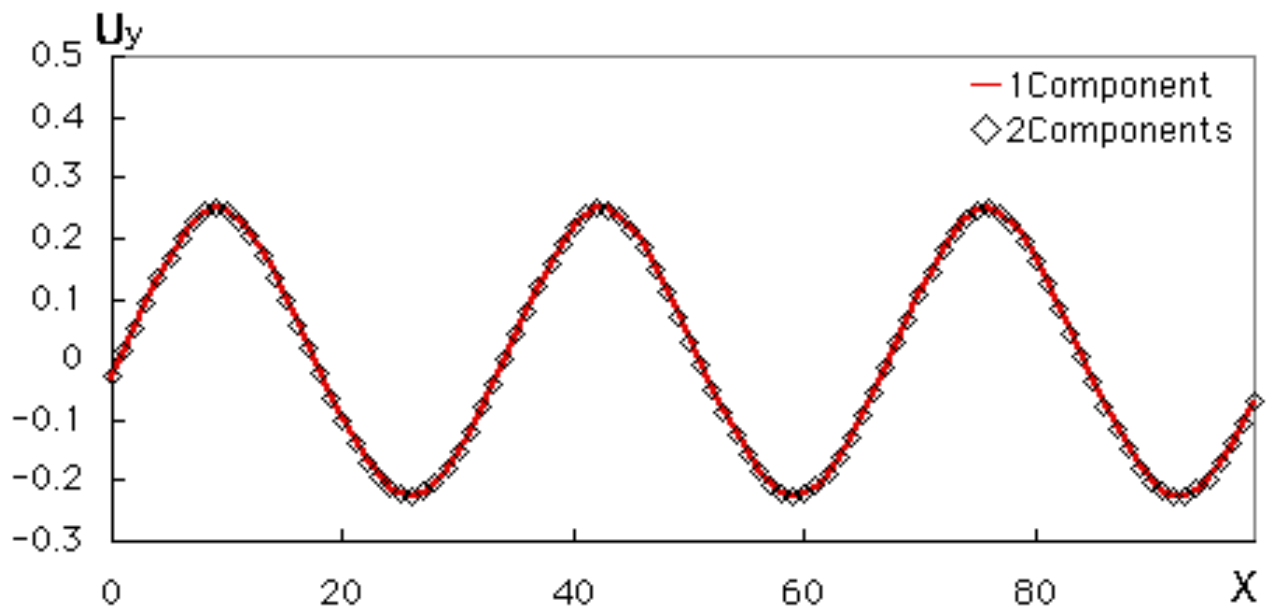


図 3.10: Velocity vector of y-direction at center of y-axis

図 3.9 は定常状態における流速である. この時の y 軸方向の計算領域中心 ($y=10$) における y 方向の流速を図 3.10 に示した. 一成分熱流体の結果モデルと定性的, 定量的な一致が見られる.

・密度分布

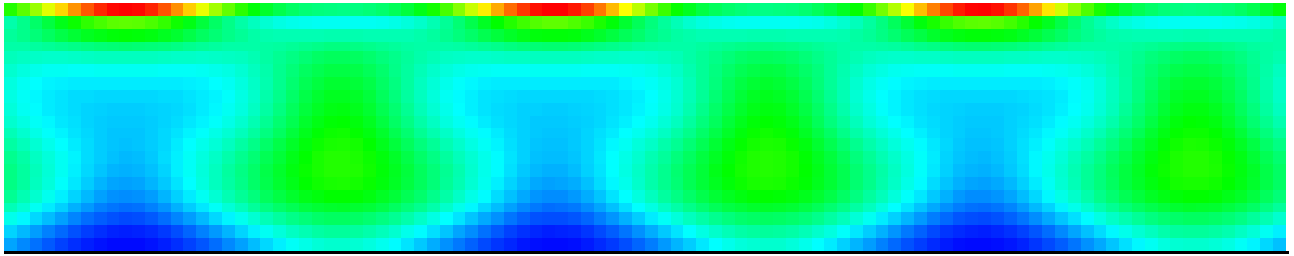


図 3.11: Density profile of Benard convection

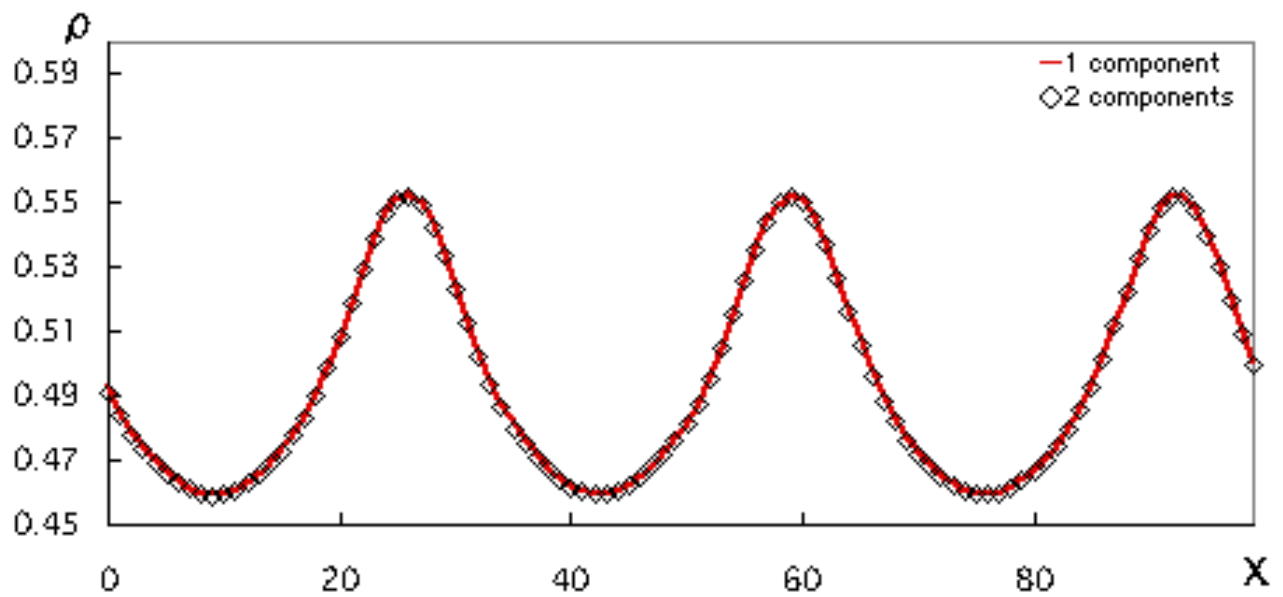


図 3.12: Density profile at center of y-axis

図 3.11 は定常状態における密度分布である. この時の y 軸方向の計算領域中心 ($y=10$) における密度分布を図 3.12 に示した. 密度分布に関しても一成分熱流体モデルの結果と定性的, 定量的な一致が見られる.

温度分布

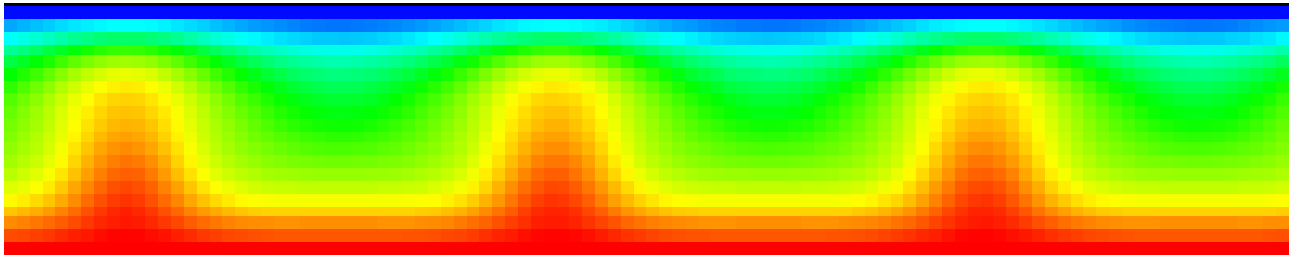


図 3.13: Temperature profile of Benard convection

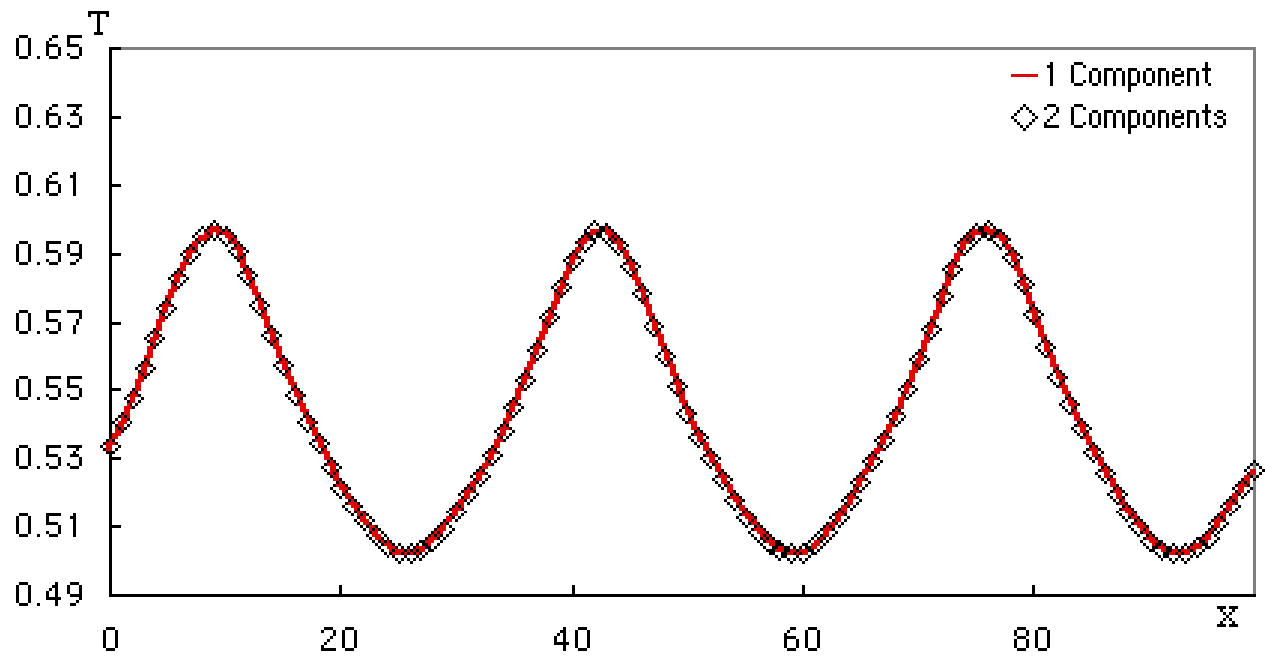


図 3.14: Temperature profile at center of y-axis

図 3.13 は定常状態における温度分布である. この時の y 軸方向の計算領域中心 ($y=10$) における温度分布を図 3.14 に示した. 密度分布に関しても一成分熱流体モデルの結果と定性的, 定量的な一致が見られる. 以上より外力を考慮した熱流体モデルへの拡張法は有用である事が確認出来た.

第4章 数値実験

本研究で提案した多成分流体への拡張法及び外力の導入法を用いて重力下における二成分熱流体の解析を行った.

4.1 二成分自然対流

本節では薦原らによる 2D21V 熱流体モデルを二成分熱流体モデルに拡張し重力下における二成分流体の振る舞いを解析する.

4.1.1 ボルツマン方程式

粒子 f および h は次の 2 式

$$f_{\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t + \Delta t) - f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau_f} [f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) - if_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] \quad (4.1)$$

$$h_{\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t + \Delta t) - h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau_h} [h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) - ih_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)] \quad (4.2)$$

により記述される. また, 局所物理量と粒子分布は

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} \{f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) + h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} \quad (4.3)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} \{f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) + h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)\}\mathbf{e}_{\sigma i} \quad (4.4)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + T(\mathbf{r}, t) \right] = \sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} \{f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) + h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} \mathbf{e}_{\sigma i}^2 \quad (4.5)$$

と対応付けられる. また, 衝突時の演算には以下の式を用いる.

$$m_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) = if_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) + ih_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) \quad (4.6)$$

$$if_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) = \frac{m_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) \sum_{\sigma i} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)}{\rho(\mathbf{r}, t)} \quad (4.7)$$

$$ih_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) = \frac{m_{\sigma i}^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t) \sum_{\sigma i} h_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)}{\rho(\mathbf{r}, t)} \quad (4.8)$$

4.1.2 計算条件

二つの粒子に仮想的な密度差を設けた. また, 初期条件としてこれら二つの粒子は各格子点に 1 : 1 で分布させた. 格子点数 100×20 , $Ra=4800$ のベナール対流計算を行った. 外力には重力及び浮力を考慮し, 初期条件として流速に擾乱を加えた. 左右は周期境界, 上壁は冷却固定壁, 下壁は発熱固定壁とした (図 3.8).

4.1.3 計算結果

1. 初期状態



図 4.1: Ratio of 2-particles

図 4.1 は初期状態における二粒子の存在比を図示したもので青は密度の大きい粒子が支配的な領域, 赤は密度の小さい粒子が支配的である領域を表す. 初期状態で二種類の粒子を 1:1 に配置した為, 完全に混合状態になっている事が確認出来る.

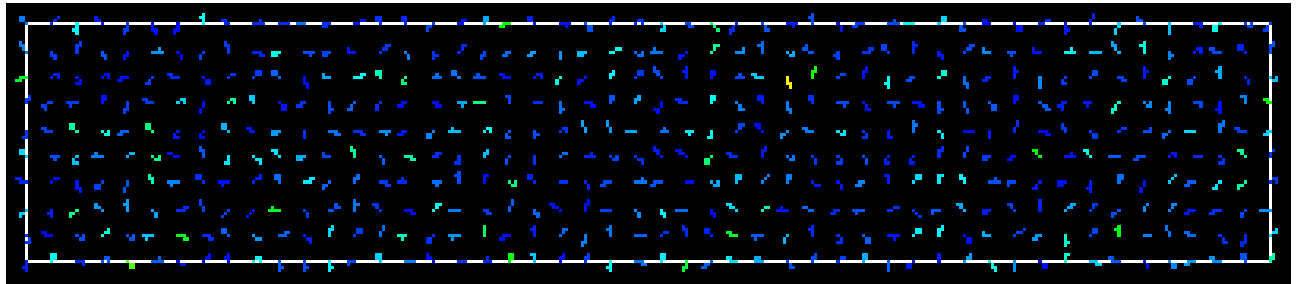


図 4.2: Velocity vector

図 4.2 は初期状態における流速である. 初期条件として流速に擾乱を加えたため流速は各格子点上でランダムな値を取っている.

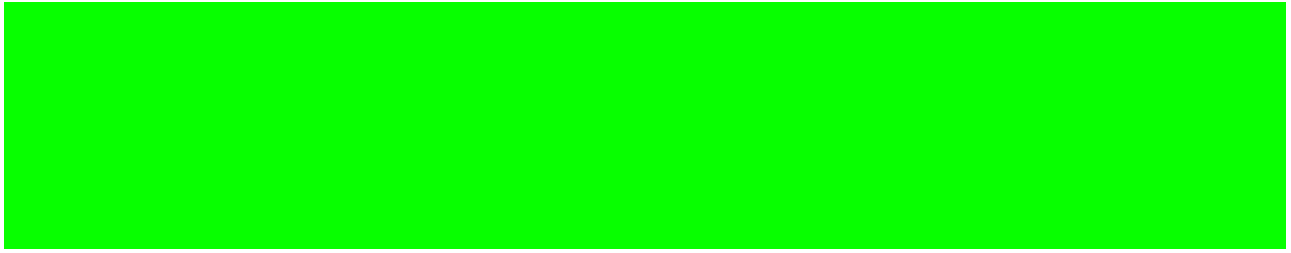


図 4.3: Density Profile



図 4.4: Temperature Profile

図 4.3 は初期状態における密度分布, 4.4 は温度分布を示す. この状態ではまだ熱伝導が生じておらず重力による影響も見られないために初期条件の状態をほぼ保っている.

2. 相分離



図 4.5: Ratio of 2-particles

図 4.5 は二粒子の存在比である. 重力の影響により時間が経過するにつれて密度の大きい粒子の相と密度の小さい粒子の相に分離していく.

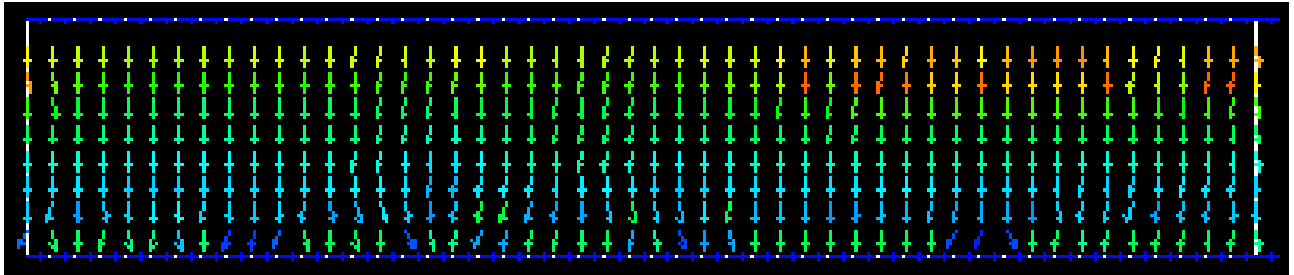


図 4.6: Velocity vector

図 4.6 は図 4.5 と同時刻の流速である. 初期状態の擾乱の影響が残っているが全体としては重力により下降流が生じている事が確認出来る.

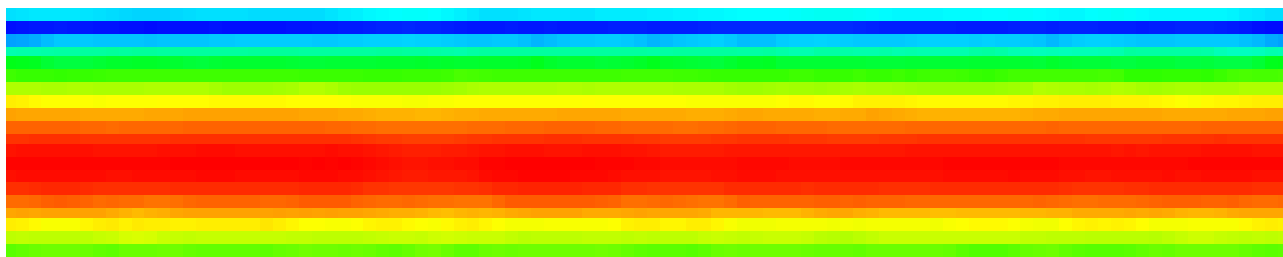


図 4.7: Density Profile

図 4.7 は図 4.5 と同時刻の密度分布である. 重力の影響により下壁に向かって局所密度が大きくなるが, 下壁の発熱により粒子が加熱され下壁付近の局所密度が小さくなっている事が分かる.

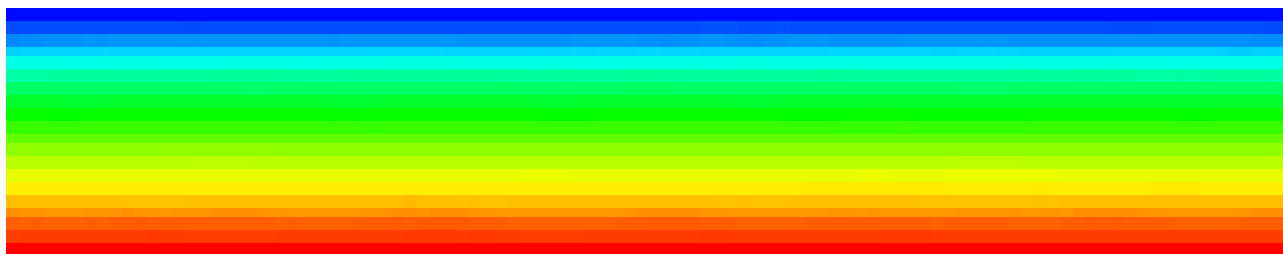


図 4.8: Temperature Profile

図 4.8 は図 4.5 と同時刻の温度分布である. 下壁の発熱により温度が一様に拡散している事が確認出来る. この段階では特に目立った変化は見られない.

3. 境界相の変化 I

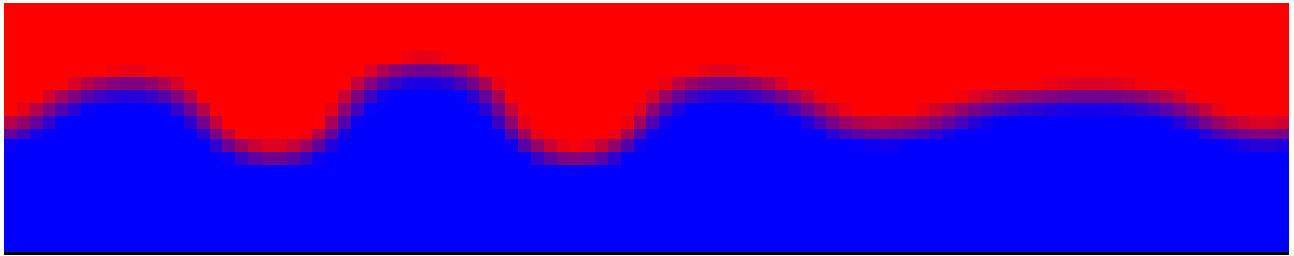


図 4.9: Ratio of 2-particles

図 4.9 は二粒子の存在比である. 時間の経過により上壁で冷却された密度の小さい粒子の相の局所密度が増大し密度の大きい粒子の相に沈み込む為境界相の形状に変化が現れる.

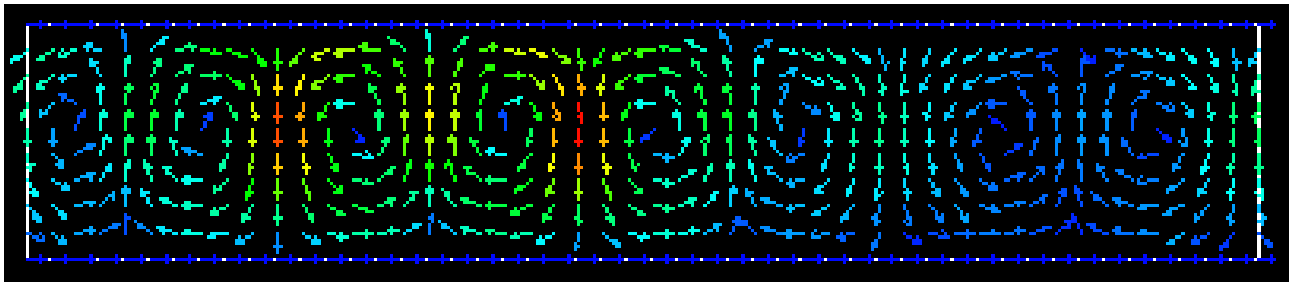


図 4.10: Velocity vector

図 4.10 は図 4.9 と同時刻の流速である. 密度の小さい粒子の相の沈み込み及び密度の大きい粒子の相の上昇により弱い対流が生じている事が確認出来る.

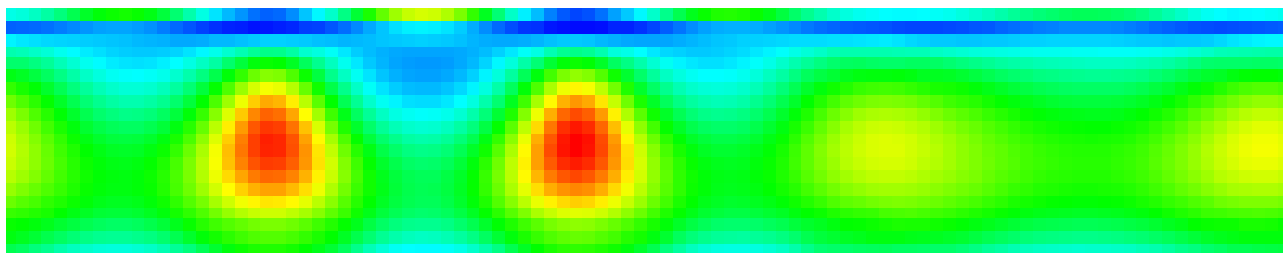


図 4.11: Density Profile

図 4.11 は図 4.9 と同時刻の密度分布である. 密度分布の大きい場所は密度の小さい粒子の相が沈み込みを起している場所とほぼ一致している. また, 密度分布が大きくなっている領域は密度の大きい粒子の相も含まれているがこれは対流による圧縮の影響と考えられる.

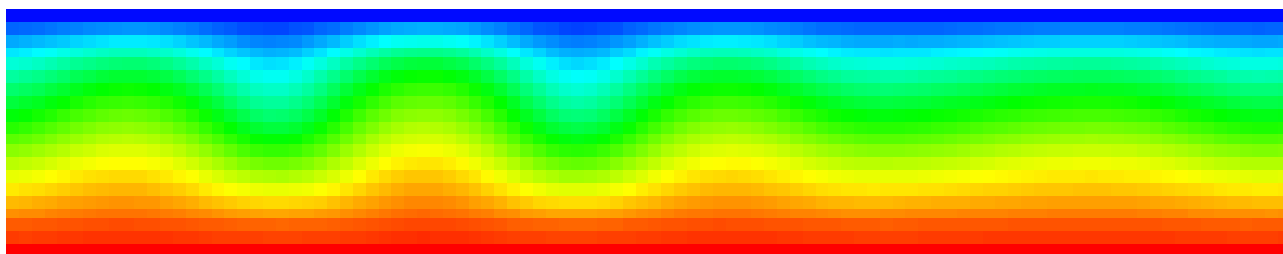


図 4.12: Temperature Profile

図 4.12 は図 4.9 と同時刻の温度分布である. 対流の影響を受け温度の拡散は一様でなくなり波を打った形状となる.

4. 境界相の変化 II

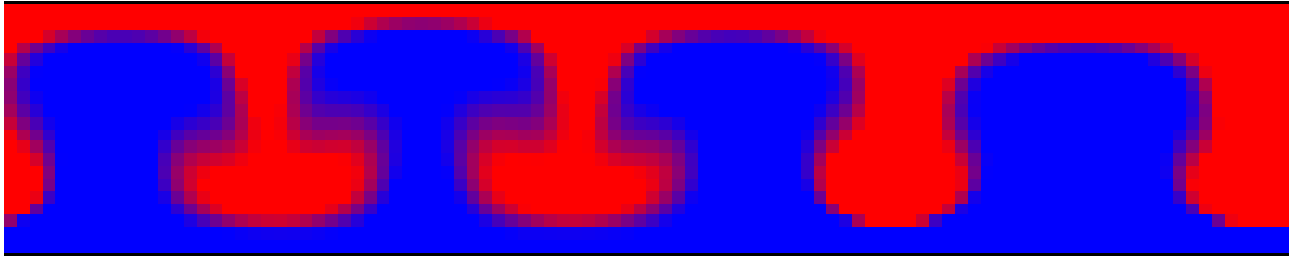


図 4.13: Ratio of 2-particles

図 4.13 は二粒子の存在比である. 時間経過と共に密度の小さい粒子の相の沈み込みは更に大きくなりきのこ状の境界相を形成する.

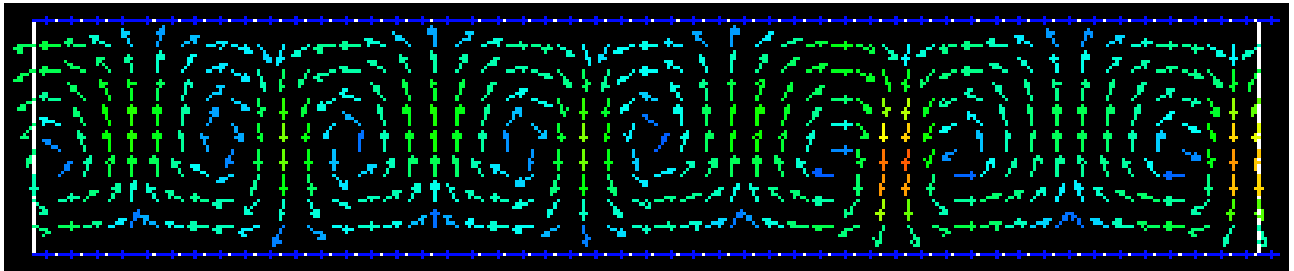


図 4.14: Velocity vector

図 4.14 は図 4.13 と同時刻の流速である. 境界相の変形に伴い弱い対流が流れ場全体に生じている事が確認出来る.

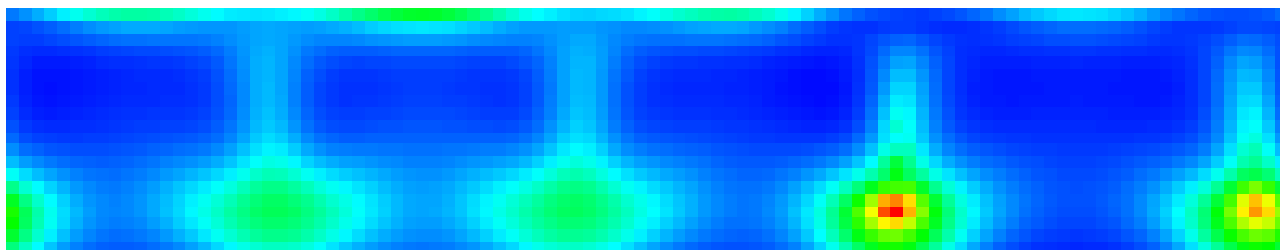


図 4.15: Density Profile

図 4.15 は図 4.13 と同時刻の密度分布である. 上壁による冷却及び下壁による加熱の影響を除外すれば境界相の形状との良い対応が見られる.

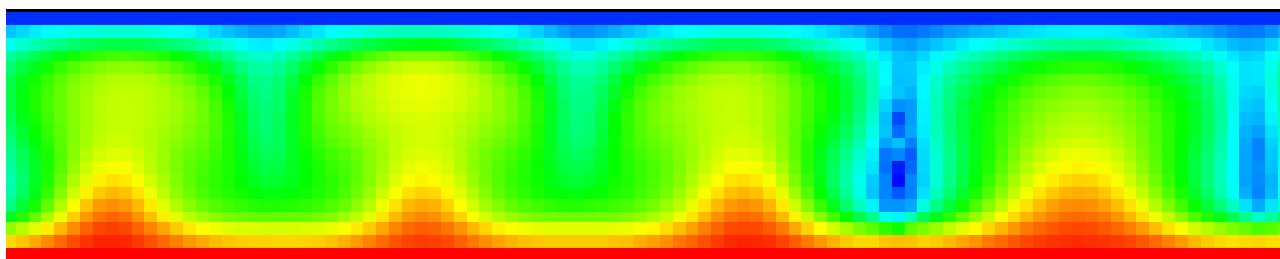


図 4.16: Temperature Profile

図 4.16 は図 4.13 と同時刻の温度分布である. 二種類の粒子は衝突時に運動エネルギーを交換する為に温度分布と境界相形状の対応は密度分布程明確には現れない.

4.2 考察

熱流体モデルを拡張し、粒子に仮想的な密度差を設けた場合に自律的な境界相形成及び熱を考慮した事による自然対流現象を再現する事が確認出来た。まず、混合状態の非混和二流体が重力の影響により二相に分離していく現象の再現は従来の数値解析手法では扱うことが難しいが、本拡張手法を適用した格子ボルツマンモデルでは相分離を境界をあらかじめ設定しなくても自律的に境界相を形成することが可能な事が確認出来た。次に、従来の2成分格子ボルツマンモデルではエネルギー保存を考慮していない為に熱伝導及び熱流動を扱うことは出来なかった。エネルギー保存を考慮した熱流体格子ボルツマンモデルに本研究で提案した拡張手法を適用することによって熱を考慮した二成分流体を解析する事が可能となり、先に示した様な発熱及び冷却壁による局所密度の変化によって引き起こされる境界相の形状変化を再現することが出来た。

第5章 まとめ

5.1 結論

本研究では従来の格子ボルツマンモデルを多成分流体モデルに拡張する手法を提案した。本拡張法は各成分毎に格子ボルツマン方程式を用い、相互作用は平衡分布で考慮するため多成分流体モデルへの拡張が行える。また、本拡張法は格子ボルツマン法における粒子速度制限及び平衡分布関数に依存しない為、様々な格子ボルツマンに適用可能である。本拡張法は衝突前後で各粒子毎に質量保存が成立し、各粒子の総和において運動量保存及び運動エネルギー保存が成立する。

本拡張法の妥当性を検討する為に、S.Houらによる2D9V非熱流体モデル及び本拡張法を適用した二成分非熱流体モデルを用い数値実験を行った。二成分の差異を考慮しない場合、拡張前の一成分非熱流体モデルと拡張後の二成分非熱流体モデルでは同様の結果が得られなければならない。先の拡張前及び拡張後の非熱流体モデルにより2次元キャビティ流れの解析を行った結果同様な解析結果が得られた。これによりエネルギー保存を考慮しない非熱流体モデルにおいて本拡張は有効であることが確認出来た。

また、拡張法の妥当性の検証として薦原らによる2D21V熱流体モデルと拡張法を適用した二成分熱流体モデルを用いて数値実験を行った。二成分の差異を考慮しない場合、拡張前の一成分熱流体モデルと拡張後の二成分熱流体モデルでは同様の結果が得られなければならない。これら2つの拡張前及び拡張後の熱流体モデルにより2次元ベナール対流の解析を行った。その結果、2成分の差異を考慮しない場合1成分熱流体モデルと同様の解析結果が得られた。以上よりエネルギー保存を考慮した熱流体モデルにおいても本拡張は有効であることが確認出来た。

これらを踏まえて薦原らによる2D21V熱流体モデルを二成分非熱流体モデルに拡張し、2次元ベナール対流の解析を行った。粒子に仮想的な質量差を設定した場合、重力の影響により自律的に相分離を起し、質量の小さい粒子の相が冷却壁によって冷却され、局所的な密度が増大した為に質量の大きい粒子の相に沈み込み、境界形状が変化する現象の再現が行えた。以上より拡張法を適用した二成分熱流体モデルにより定性的な重力下での熱流動解析が行える事が確認できた。また、本拡張手法は一成分流体モデルを基礎として拡張を行い、従来では扱う事が困難であった多成分流体の解析が可能となる。その為、差分法等ではあまり扱われていない二成分熱流体の解析や三成分以上の流体解析において有用な拡張法であると結論付けられる。

5.2 検討課題

1. 外力導入法の改良

本研究で提案した外力導入法は粒子速度の変化を粒子数の変化に置き換えるという手法であり、2次元キャピティ流れにおいて粒子速度変化を粒子数変化に変換しても差分法の結果と定量的に良く一致したことから特に問題は生じないと判断出来る。しかしながら、巨視的な物理量が等価であっても微視的な(粒子の)物理量は異なる可能性は除去する事は出来ない。次に、外力の影響は並進時に現れるため一タイムステップ後に粒子の速度が変化するが格子ボルツマン法では粒子速度変化が扱えない。その為、格子ボルツマン法では外力が作用している場合、完全な粒子追跡を行うことは困難である。粒子速度変化を粒子数変化に変換する際、本研究で提案したエネルギー保存を厳密に考慮し、外力を考慮した粒子分布を外力の作用していない粒子分布と置き換える手法では、外力を考慮した粒子分布を平衡分布関数を用いて算出した為に粒子分布を置き換える時に非平衡成分が0となり流体の粘性が変化するという問題が生じる。

2. 定量化及び精度検証

格子ボルツマン法では定性的な解析が一般的であるが、格子ボルツマン法による定量解析はあまり行われていない。そのため数値モデルと実際の物理量との対応関係が明確でないため実際の現象に適用する事は難しい。そこで、実際の物理量との対応関係を明確にするため、格子ボルツマンの定量化及び定量解析を行い、実験値および他の数値解法による解析結果と比較を行うことで格子ボルツマン法の解析精度を検証する必要がある。実際の自然現象は三次元であり、三次元の効果を考慮する必要がある場合には本拡張法を適用した三次元格子ボルツマンモデルの検討を行う。

3. 様々な格子ボルツマンモデルへの適用

本研究では Shuling Hou らによる 2D9V 熱流体及び蔦原らによる 2D21V 熱流体格子ボルツマンモデルに対する拡張を行い検証及び数値実験を行ったが、その他の格子ボルツマンモデルに対する本拡張法の適用可能性の検討が必要である。

謝辞

本研究を行うにあたり、御指導を頂いた松澤 照男教授に深く感謝致します。また、助言や指摘を頂いた産業技術総合研究所の高田 尚樹様及び松澤研究室の皆様にも深く感謝致します。

参考文献

- [1] キッテル,(斎藤 信彦, 広岡 一共訳), 統計物理, サイエンス社, 1977.
- [2] Shuling Hou, Qisu Zou, Shiyi Chen, Gary Doolen and Allen C.Cogley,
Simulation of Cavity Flow by the Lattice Boltzmann Method,
Jounal of Computational Physics, vol.118 pp329-347, 1995
- [3] 蔦原 道久, 高田 尚樹, 片岡 武共著, 格子気体法・格子ボルツマン法 -新しい数値流体力学の手法-, コロナ社, 1999.
- [4] 中村 和彦, 格子ボルツマン法に基づく概念を利用した熱流動解析アルゴリズムの開発研究, 本学修士論文, 1998.
- [5] Michael R. Swift, E.Orlandini, W.R.Osborn, and J.M.Yeomans, Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems, Physical Review E, Vol.54, Num.5, pp5041-5052, 1996
- [6] David R.Noble, John G. Georgiadis and Richard O. Buckius, Comparison Of Accuracy And Performance For Lattice Boltzmann And Finite Difference Simulations Of Steady Viscous Flow, International Journal For Numerical Method In Fluids, Vol.23, pp1-18, 1996
- [7] U.Ghia, K.N.Ghia, and T.Shin, High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method, Journal of computational Physics, Vol.48, pp387-411, 1982.
- [8] 今川 洋造, 実数型格子ガス法による熱流動解析に関する研究, 本学修士論文, 2001.