

Title	格子ボルツマン法の多成分拡張に関する研究
Author(s)	廣川, 雄一
Citation	
Issue Date	2005-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	author
URL	http://hdl.handle.net/10119/966
Rights	
Description	Supervisor: 松澤 照男, 情報科学研究科, 博士

博士論文

格子ボルツマン法の多成分拡張に関する研究

指導教官 松澤 照男 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

廣川 雄一

2005年1月27日

要旨

本研究では、格子ボルツマン法 (LBM) の一成分系 (単相流) モデルを多成分系 (混和多相流) モデルに拡張する手法を 4 つ提案し、妥当性を検討することで各手法の特性や有効性を明らかにした。

LBM はボルツマン方程式を基礎とし、仮想的な粒子運動を解析することにより巨視的な流体现象を記述する数値流体解析手法の一つである。LBM では粒子運動の解析を簡略化することで、流体を微視的および巨視的に解析することが可能である。このため、LBM はナビエ・ストークス方程式よりも詳細に流体を解析することが可能であり、従来手法では扱いが難しい混相流問題や多孔質内流れなどを扱うことが可能である。尚、LBM には多数の粒子運動の簡略化法があり、本研究ではこの簡略化法を格子ボルツマンモデル (LB モデル) と呼ぶ。

また、LBM は計算負荷が小さく各変数の依存関係も少ないため、ワークステーションから超並列計算機まで幅広い適用が可能である。

混相流を扱う LB モデルは多数提案されてきたが、扱う現象や相の数が限定されていたり、熱流動を考慮していないものが多い。そこで、本研究では任意の一成分 LB モデルを多成分 LB モデルに拡張する手法を 4 つ提案した。以下に 4 つの手法の概略を示す。

1. 多成分拡張法 (Multi-Component Extension Method)

平衡状態では各成分は同じ流速と温度を持つと仮定し、成分間の相互作用を考慮するのが特徴である。但し、各成分の単一緩和係数 (動粘性係数や熱伝導率に関係付けられるパラメータ) は全て同じである (とみなせる) 必要がある。

2. 混合多成分拡張 (Mixture Multi-component Extension)

各成分が混合した流体の物性値 (但し, 密度は除く) は, 各成分の平均値を持つと仮定し, 成分間の相互作用を考慮する. 各成分が異なる単一緩和係数を持つことが可能である. 但し, 混合領域において各成分は平均化された物性値 (密度を除く) に統一されるため, 各成分の詳細な状態を解析することは難しいと考えられる.

3. 多成分相互作用拡張 (Multi-component Interaction eXtension)

最も物理状態の変化が遅い成分が成分間の相互作用を支配すると仮定し, 成分間の相互作用を考慮する. 各成分が異なる単一緩和係数を取ることが可能であり, 成分間の相互作用に発熱などを考慮することも可能である.

4. 反応多成分相互作用拡張 (REaction Multi-component Interaction eXtension)

反応などによる各成分の質量変化を考慮できるように多成分相互作用拡張を改良した手法である. 4つの手法の中では最も複雑な流体现象を扱うことが可能である.

本研究では, これら4つの手法に対し解析的および数値的な検証を行い, 各手法とも妥当であることが確かめられた. また, 数値解析例を通して, 各手法とも従来手法では扱いが難しい, 対流と分子拡散による各成分の混合を同時に扱えることが確認できた. また, 反応多成分相互作用拡張を適用した多成分LBモデルを用い, 並列計算機上でベンチマークを行った結果, 理想的な速度向上 (リニアスケーラビリティ) を得られることが分かった.

以上より, これら4つの拡張手法は多成分LBモデルを構築するための有効な手法であると結論付けられる.

Abstract

This research proposed four methods of extension of the Lattice Boltzmann Method (LBM), which extend single-component (single-phase) model to miscible multi-component (multi-phase) model in LBM, and verified validity of each method through study of its characteristics and mechanism.

LBM is one of the Computational Fluid Dynamics techniques, which is based on the Boltzmann equation and analyzes fluid dynamics by calculating kinetics of virtual particles. By simplifying kinetics of particles, LBM is able to analyze fluid in mesoscopic (both microscopic and macroscopic) scale. Therefore, LBM is able to simulate fluid more accurately than traditional techniques using Navier-Stokes equation, so that it enables to analyze complex fluids such as multi-phase flow, porous media flow and so on. LBM has many ways to simplify particle kinetics, which are called as "Lattice Boltzmann (LB) model(s)" in this paper. Since LBM has a few dependencies between variables and low calculation load, LBM may be implemented similarly on workstation and massively parallel computer, and work best.

There has been proposed many multi-phase LB models, however, these models are mostly hard to increase the number of components (phases) or to analyze thermal fluid. Therefore, this paper proposed four extension methods of LBM, which derive miscible multi-component LB models from various single-component LB models. There shows outline of these four extension methods.

1. Multi-Component Extension Method (MCEM)

MCEM assumes each component has the same (averaged) velocity and temperature at equilibrium state in order to consider interactions between components. MCEM has a limitation that single relaxation time of each component, which is related to dynamic viscosity and thermal conductivity, has to be the same (or almost same) value.

2. Mixture Multi-component Extension (MME)

MME assumes mixture of each component has the averaged material properties (excluding density) of components in order to consider interactions between components. MME allows the different single relaxation time of each component. In a state of thorough mixing of components, however, material properties excluding density of each component are set to the averaged material properties. Therefore, the detailed analysis of each component is hard to be achieved.

3. Multi-component Interaction eXtension (MIX)

MIX assumes the component with the slowest relaxation time to equilibrium state rules interaction between components, to consider interactions between components. MIX allows the different single relaxation time of each component. MIX is able to consider friction heat, etc. through interaction.

4. REaction Multi-component Interaction eXtension (REMIX)

REMIX is an improvement of MIX, which is able to refer to density variation of each component by chemical reactions, etc.. REMIX is able to solve the most complex fluid among the four introduced methods.

This paper verified the four methods analytically and numerically, which proved validity of each method. From numerical analysis, these methods are validated to simulate convection and molecular diffusion of components simultaneously, which is hard to simulate by the traditional techniques. Moreover, from benchmarking of multi-component LB model by REMIX on massively parallel computer, REMIX was proved to have linear scalability.

These results show the four methods are effective to obtain multi-component LB models.

目次

1	緒言	1
1.1	研究の背景	1
1.2	研究の目的	2
2	格子ボルツマン法	3
2.1	格子ボルツマン法の概要	3
2.1.1	支配方程式	3
2.1.2	巨視的物理量	4
2.1.3	平衡分布関数	5
2.1.4	初期条件	6
2.1.5	境界条件	6
2.1.6	外力の導入	8
2.1.7	LBM のアルゴリズム	8
2.2	安定性およびクーラン条件	11
2.2.1	亜緩和領域と過緩和領域	11
2.2.2	線形安定性	12
2.2.3	クーラン数および拡散数	13
3	格子ボルツマン法の多成分拡張法	15
3.1	多成分拡張法の概要	15
3.2	多成分拡張法	16
3.3	各物理量の保存	18
3.4	多成分拡張法の制限事項	21
3.5	解析的な検証	23
3.5.1	対流	23

3.5.2	分子拡散	25
3.6	数値解による検証	26
3.6.1	キャビティ流れ	27
3.6.2	サーマルクエット流れ	30
3.6.3	分子拡散	35
3.7	重力下におけるレイリーテイラー不安定性	36
3.7.1	仮想外力項	37
3.7.2	多成分拡張法のアルゴリズム	37
3.7.3	解析条件	40
3.7.4	解析結果	40
3.8	まとめ	47
4	格子ボルツマン法の混合多成分拡張	48
4.1	混合多成分拡張の概要	48
4.2	混合多成分拡張	49
4.3	各物理量の保存	51
4.3.1	質量保存	51
4.3.2	運動量保存	51
4.3.3	エネルギー保存	52
4.4	混合多成分拡張のアルゴリズム	54
4.5	数値解による検証	56
4.5.1	キャビティ流れ	56
4.5.2	サーマルクエット流れ	58
4.6	重力下における二成分サーマルキャビティ流れ	61
4.6.1	解析結果	62
4.7	まとめ	66
5	格子ボルツマン法の多成分相互作用拡張	67
5.1	多成分相互作用拡張の概要	67
5.2	多成分相互作用拡張	68
5.2.1	質量	68

5.2.2	運動量	69
5.2.3	エネルギー	70
5.3	各物理量の保存	72
5.3.1	質量保存	73
5.3.2	運動量保存	73
5.3.3	エネルギー保存	74
5.4	多成分相互作用拡張のアルゴリズム	75
5.5	数値解による検証	78
5.5.1	クエット流れ	78
5.5.2	サーマルクエット流れ	80
5.6	混和三成分流体解析	82
5.6.1	解析条件	82
5.6.2	解析結果	82
5.6.3	まとめ	85
6	格子ボルツマン法の反応多成分相互作用拡張	86
6.1	反応多成分相互作用拡張の概要	86
6.2	反応多成分相互作用拡張	87
6.2.1	質量	87
6.2.2	運動量	87
6.2.3	エネルギー	89
6.3	各物理量の保存	92
6.3.1	質量保存	92
6.3.2	運動量保存	92
6.3.3	エネルギー保存	93
6.4	反応多成分相互作用拡張のアルゴリズム	94
6.5	数値解による検証	97
6.5.1	クエット流れ	97
6.5.2	サーマルクエット流れ	98
6.6	反応性混和三成分流体解析	100

6.6.1	解析条件	100
6.6.2	解析結果	101
6.7	まとめ	105
7	反応多成分拡張法の並列性能	106
7.1	並列化手法	107
7.1.1	領域分割法	107
7.1.2	ノンブロッキング通信および通信隠蔽	107
7.2	並列性能評価	108
7.2.1	2D9V モデルのスケラビリティ	108
7.2.2	2D21V モデルのスケラビリティ	110
7.3	まとめ	111
8	結言	112
8.1	本研究のまとめ	113
8.2	今後の展望	113
9	Appendix A 代表物理量と無次元化	114
9.1	有次元解析	114
9.2	微視的な物理量での無次元化	114
9.3	巨視的な物理量での無次元化	115
10	Appendix B FLUENT の検証	117
10.1	解析解による検証	117
10.1.1	クエット流れ	117
10.1.2	熱伝導問題	119
10.1.3	まとめ	120
10.2	実験結果との比較	120
10.2.1	測定機器	120
10.2.2	測定条件	121
10.2.3	数値解析条件	123
10.2.4	測定結果と数値解の比較	124

10.3 まとめ	125
謝辞	126
参考文献	127
本研究に関する発表論文	130

第 1 章

緒言

1.1 研究の背景

数値流体力学は測定が難しい流れ場の把握や解析解を求めることが困難な問題を解決する手法として発展をしている。今日では流体-構造連成解析や混相流解析などを扱う流体现象も複雑化しており、これらの解析は工業的に重要であると考えられる。数値流体力学ではナビエ・ストークス方程式が良く用いられているが、一般的に連立方程式を解く必要があり計算負荷が大きく並列化などが難しい。一方、流体を仮想粒子の集合とみなし粒子運動の解析により流体解析を行う格子気体法は連立方程式を解く必要がない。また、格子気体法では粒子運動を簡略化することにより高い効率で計算が行える。格子ボルツマン法は格子気体法の一つであり、並列計算機において高い性能を引き出すことが可能である [1]。

格子ボルツマン法は微視的な粒子の振る舞いを解析し、解析結果を統計処理することにより巨視的な物理量を求める手法である [1]。格子ボルツマン法は流体现象を微視的および巨視的に記述するだけでなく、微視的と巨視的の間の関係を明らかにすることができる。従って、格子ボルツマン法は従来手法では扱いが難しい希薄気体解析や μm オーダーの流体解析、混相流の境界相の自律的な形成および崩壊を扱うことが可能である。

1.2 研究の目的

格子ボルツマン法では粒子運動の簡略化法(以下, 格子ボルツマンモデルと略す)が多数存在する. 格子ボルツマン法では多孔質内流れや気液二相流解析 [2][3] などが良く行われているが, 解析に用いられる格子ボルツマンモデルは対象となる問題毎に提案されており汎用性が低い. また, 混和混相流では熱を考慮していないモデル [4][5][6] が多く, 熱流動を扱える格子ボルツマンモデルは少ない.

本研究の目的は様々な格子ボルツマンモデルを多成分流体が扱えるように拡張する多成分拡張手法を提案し, 妥当性を検証することである. 最初に提案した多成分拡張法は格子ボルツマンモデルに依存せず幅広い適用が可能であり, 熱を扱える多成分流体格子ボルツマンモデルを導くことも可能である. また, 従来手法では扱いが難しい対流と分子拡散による各成分の混合を同時に解析することが可能である. しかし, この拡張法は多成分流体を構成する各成分の動粘性係数が大きく異なる場合, 流れ場の運動量保存およびエネルギー保存が成立しないことが明らかとなった. そこで, この問題を修正した混合多成分拡張を提案した. この混合多成分拡張は格子ボルツマンモデルに依存せず適用が可能であり, 異なる動粘性係数を持つ多成分流体を解析することが可能である. しかし, 各成分が混合している領域では各成分の詳細な運動を解析するのが難しい. そこで, この問題を解決した多成分相互作用拡張を提案した. 多成分相互作用拡張は任意の成分数および動粘性係数を扱うことが可能である. また, この多成分相互作用拡張に更に改良を加えることで反応性の多成分流体を考慮することが可能な反応多成分相互作用拡張を提案した.

また, 反応多成分拡張の並列性能を測定し並列計算機における有効性を検証した. 本研究の多成分拡張法は並列計算機を最大限に活用可能であり, 従来手法では扱いが難しい混相流問題を解決できるものと期待される.

第 2 章

格子ボルツマン法

格子ボルツマン法 (LBM) は格子ガス法 [7] を基に発展した数値流体解析手法である。LBM ではボルツマン方程式に従う仮想的な粒子運動を計算することにより、巨視的な流れ場の解析を行う。このため、ナビエ・ストークス方程式に基づく流体解析手法では扱いが難しい多孔質内流れや混相流を扱うことが可能である。また、LBM は完全陽解法であり変数の依存性も少ないため、高い計算効率を有しているのが特徴である。

2.1 格子ボルツマン法の概要

2.1.1 支配方程式

LBM ではボルツマン方程式 [8] の衝突項を BGK 項に置き換えた式 (2.1) を基に解析を行うのが一般的である。

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)}{\partial t} + \mathbf{e} \nabla f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t) + \alpha \nabla_{\mathbf{e}} f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t) = \frac{1}{\tau} [f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t) - f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)] \quad (2.1)$$

$f(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)$ は位置 \mathbf{r} , 時刻 t における速度 \mathbf{e} を持つ粒子分布, $f^{eq}(\mathbf{r}, \mathbf{e}, t)$ は平衡状態の粒子分布, α は加速度, τ は単一緩和係数を表す。LBM では仮想粒子運動を衝突過程と並進過程に分けて解析を行う。図 2.1 に概念図を示す。図 2.1 左は衝突過程であり、単位体積内に流入してくる各粒子の衝突を計算する (オイラー的視点)。図

2.1 の右は 並進過程であり, 単位体積から流出していく粒子の追跡を行う (ラグランジュ的視点). 従って, LBM はセミラグランジュ的な解析手法といえる.

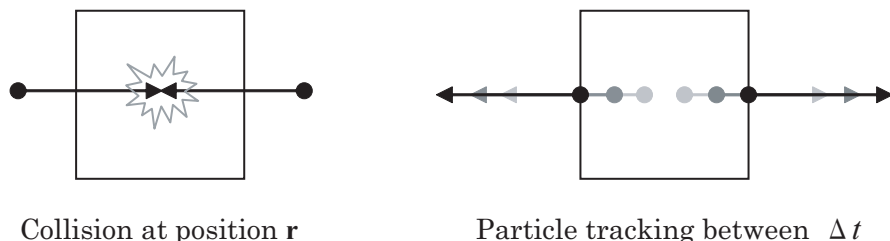


図 2.1: Collision and translational movement of LBM

また, LBM では特定の速度を持つ粒子のみを解析するため計算負荷が小さいのが特徴である. また, 特定の粒子速度は 1 タイムステップで隣接格子点に到達するように決定される. 従って, LBM における粒子速度 $e_{\sigma i}$ は

$$\mathbf{e}_{\sigma i} = \frac{\Delta \mathbf{x}}{\Delta t} \quad (2.2)$$

となる. ここで, \mathbf{x} は位置ベクトル, σ は粒子の速さ, i は方向を表す. これらの条件をボルツマン方程式に適用すると, 格子ボルツマン方程式 (LBE) が導かれる.

$$f_{\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i} \Delta t, t + \Delta t) - f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\tau} [f_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) - f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)] \quad (2.3)$$

ここで, $f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)$ 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¹, $f_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)$ は平衡状態における粒子分布 (平衡分布) を表す.

2.1.2 巨視的物理量

粒子分布と巨視的物理量は以下のようなアンサンブル平均を用いて対応付けられる [12]. 尚, 以下の局所物理量は単位体積 (Δx^2 または Δx^3) 内の領域を対象としている.

¹LBM では粒子分布を実数 (または整数) で表すことにより, 格子ガス法における粒子衝突時の非物理的な排他則を回避している.

・局所密度

局所密度 $\rho(\mathbf{r}, t)$ は単位体積内の粒子数を求めることによって算出される。

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) \quad (2.4)$$

・局所運動量

局所運動量 $\rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ は個々の粒子の運動量の平均をとったものとなる。

ここで、 $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ は局所的な流速を表す。

$$\rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)\mathbf{e}_{\sigma i} \quad (2.5)$$

・局所エネルギー

局所エネルギー $\rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t) \right]$ は個々の粒子の運動エネルギーの平均値²となる。 $\varepsilon(\mathbf{r}, t)$ は局所的な内部エネルギー（熱エネルギー）を表す。次式の左辺において巨視的な流体塊の運動エネルギーと内部エネルギーに分離している。これは熱速度の運動エネルギーと系全体の運動エネルギーを分離して考えるためである³。

$$\rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t) \right] = \sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i}^2 \quad (2.6)$$

尚、理想気体の場合、内部エネルギーは以下の式により温度と対応付けられる。

$$T(\mathbf{r}, t) = \frac{\varepsilon(\mathbf{r}, t)}{C_v} \quad (2.7)$$

ここで、 $T(\mathbf{r}, t)$ は局所温度、 C_v は定積比熱を表す。

2.1.3 平衡分布関数

平衡分布を求める平衡分布関数は仮想粒子の速度モデルによって異なる。また、平衡分布はボルツマン方程式の平衡解であるマクスウェル・ボルツマン分布を仮

²但し、平均流速（平均運動量）から局所的な運動エネルギーを求めてはいけない。平均流速では個々の粒子速度が平均化され、個々の粒子の運動エネルギーが正しく評価されないためである（平均流速ではエネルギーが小さく評価される可能性がある）。

³分離しない場合、流速の速い領域の温度が実際の温度よりも高く評価される可能性がある。尚、巨視的な系の運動エネルギーと粒子運動エネルギーの総和が等しい場合、熱速度（内部エネルギー）は0となる。

定しているものが多い。S.Hou らによる 2D9V モデル [9] では以下のような平衡分布関数を仮定している。

$$f_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) = A_{\sigma} + B_{\sigma} (\mathbf{e}_{\sigma i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)) + C_{\sigma} (\mathbf{e}_{\sigma i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))^2 + D_{\sigma} \mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t) \quad (2.8)$$

粒子速度 $\mathbf{e}_{\sigma i}$ に対称性を持たせることにより、上式の未知数 ($A_{\sigma}, B_{\sigma}, C_{\sigma}, D_{\sigma}$) は粒子の速さ σ のみに依存する。これらの未知数は主に

- ・ 粒子分布と巨視的物理量の関係式
- ・ 粒子速度の 4 階モーメントの非等方性の消去
- ・ LBE を Chapman-Enskog 展開し、圧縮性ナビエ・ストークス方程式に近似させた時の対応関係

により決定する。また、圧縮性ナビエ・ストークス方程式に近似させる際に、単一緩和係数と動粘性係数および温度伝導率の関係式を導くことができる。

2.1.4 初期条件

初期状態の粒子分布は、初期の巨視的物理量と平衡分布関数を用いて求める。即ち、初期物理量を満たす平衡状態の粒子分布を平衡分布関数から算出し、平衡状態の粒子分布を初期粒子分布とする。

2.1.5 境界条件

LBM における境界条件は分子動力学法 (MD) などで用いられるコサイン散乱 [10] に類似した手法によって実装されることが多い。しかし、LBM では巨視的な物理量と粒子反射条件⁴の両方を同時に指定することが可能である。そこで本研究では、境界条件として粒子反射 [11] および境界上の巨視的物理量を指定する手法⁵を用いた。

- ・ 滑りなし固定壁

固定壁では粒子の反射則として、図 2.2 に示すような Bounce-Back 条件を用いる。

⁴LBM では等間隔の格子でも、境界形状を粒子反射条件により実装することが可能である。

⁵境界付近の格子点における巨視的物理量を予め指定した値とし (粒子分布から算出した巨視的物理量は破棄する)、この値を用いて平衡分布を求めることで巨視的な境界条件を考慮する。

Bounce-Back 条件では壁面と水平方向の流速は統計的に 0 に近づくが、0 とはならない。そこで、粒子反射則に加え、境界上の格子点に巨視的物理量の境界条件 (ディリクレ条件) を課した。即ち、境界上の流速が 0, 温度が T' の場合は以下のように設定する。尚、境界上の温度を指定しない場合は断熱固定壁となる。

$$\begin{cases} \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)|_{BOUNDARY} = (0, 0) \\ T(\mathbf{r}, t)|_{BOUNDARY} = T' \end{cases}$$

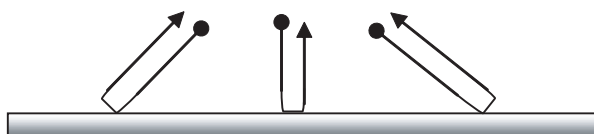


図 2.2: Particle reflection of no-slip boundary

・移動壁および滑りあり固定壁

移動壁では粒子の反射則として、図 2.3 に示すような滑りあり条件を用いる。反射後の粒子速度は、壁面に垂直な速度成分は符号を逆転させ、壁面と水平な速度成分は不変とする。滑りあり条件では壁面と水平方向の流速は統計的に 0 にはならない。従って、境界上の格子点にディリクレ条件を課すことにより移動壁を考慮可能である。即ち、境界上の壁面に対する水平方向流速が U , 温度が T' の場合は以下のように設定する。尚、境界上の温度を指定しない場合は断熱移動壁、流速を指定しない場合は滑りあり固定壁となる。

$$\begin{cases} \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)|_{BOUNDARY} = (U, 0) \\ T(\mathbf{r}, t)|_{BOUNDARY} = T' \end{cases}$$

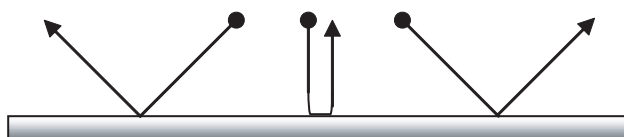


図 2.3: Particle reflection of slip boundary

・周期境界

周期境界条件は計算領域外に飛んでいく粒子を再度計算領域内に流入させる。図 2.4 は周期境界の概念図である。左右が周期境界の場合、右の境界から流出した粒子は左から流入する。



図 2.4: Periodical boundary condition

2.1.6 外力の導入

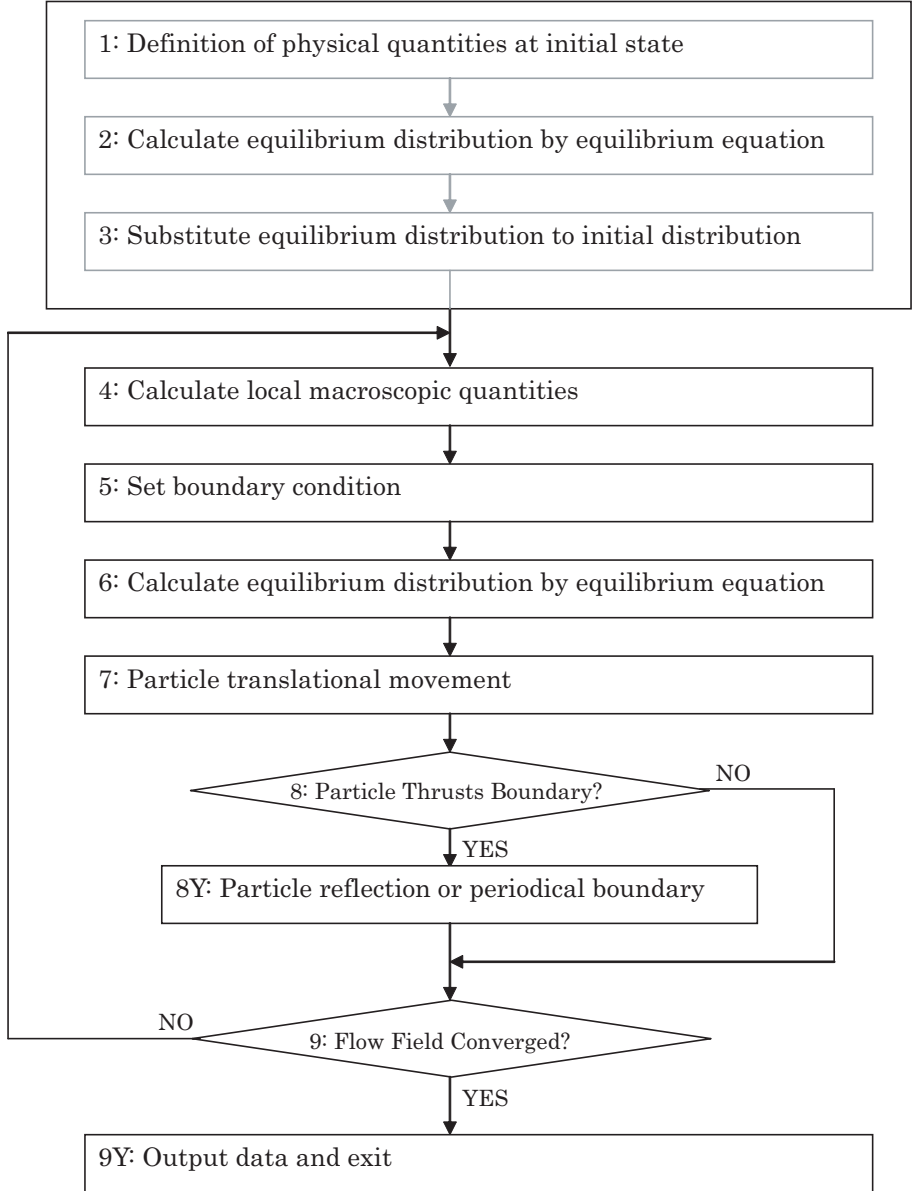
LBM では仮想粒子速度は固定であるため、外力による粒子速度変化を直接扱うことは難しい。このため、LBM では各方向の粒子分布に偏りを持たせることで外力を考慮している。粒子分布の偏りは巨視的物質量への外力の影響の付加、または LBE への仮想外力項の付加などにより考慮される [17]。

2.1.7 LBM のアルゴリズム

図 2.5 は LBM のフローチャートであり、アルゴリズムは非常にシンプルであることが分かる。以下におおまかな処理の流れを示す。

- 1: 初期物質量設定 初期状態における流れ場の巨視的な物質量を指定する。
- 2: 平衡分布の算出 初期物質量および平衡分布関数を用い、平衡分布を求める。
- 3: 初期粒子分布設定 2 で求めた平衡分布を初期状態の粒子分布とする。これによりマクスウェル・ボルツマン分布を満たす初期状態の粒子分布を求めることができる。
- 4: 巨視的物質量の算出 粒子分布から巨視的物質量を求める。

- 5: 境界上の巨視的物理量指定 通常のLBMではこの処理は存在しないが, 本研究では境界上に巨視的な物理量を設定する. 境界上の巨視的物理量にディリクレ条件を与える.
- 6: 平衡分布の計算 4および5で求めた物理量および平衡分布関数を用い, 平衡分布を求める.
- 7: 粒子の並進移動 (粒子追跡) LBEに従い, 粒子を移動させる.
- 8: 粒子位置の確認 計算領域外もしくは壁面を通過する粒子を判別する. 粒子が壁面などを通過する場合, 「8Y: 粒子反射則または周期境界条件」を適用する. 通常のLBMでは境界条件を考慮した粒子反射条件を用いることで境界条件を実装する.
- 9: 流れ場の収束判定 流れ場が収束していない場合は, 「4: 巨視的物理量の算出」の部分に戻り, 流れ場が収束した場合は「9Y: 計算を終了する」に進む. 尚, 非定常性の強い問題の場合は予め指定した反復回数で計算を終了させる必要がある.



☒ 2.5: Flow chart of LBM algorithm

2.2 安定性およびクーラン条件

2.2.1 亜緩和領域と過緩和領域

LBM では衝突項に BGK 項を用いており, 単一緩和係数 τ の大きさによって平衡状態への緩和過程が異なる. 以下に単一緩和係数の大きさと物理的な意味を示す. 尚, 単一緩和係数を議論するために LBE を以下のように変形する.

$$f_{\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\tau} f_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (2.9)$$

上式から, LBE は現在の粒子分布と平衡状態の粒子分布の重み付き平均になっていることが分かる.

- ・ 即時緩和 ($\tau = 1$)

LBE において $\tau = 1$ とおくと, 次タイムステップの粒子分布は以下の式

$$f_{\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t + \Delta t) = f_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)$$

となり, 次タイムステップの粒子分布は 1 回の衝突で平衡分布になる.

- ・ 自由分子流 ($\tau = \infty$)

LBE において $\tau = \infty$ とした場合, 平衡分布の重みは 0 となり, 粒子衝突を無視することに相当する. LBE はリルヴィルの定理 [8] を満たす式となる.

$$f_{\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t + \Delta t) = f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t)$$

$\tau = \infty$ の場合, LBM は粒子衝突を考慮しない自由分子流の解析となる.

- ・ 亜緩和領域 ($\tau > 1$)

LBE では τ が大きい程, 平衡分布が小さく評価される. 即ち, 粒子分布評価の重みは

$$f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) : f_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) = (1 - 1/\tau) : 1/\tau$$

となる。物理的には粒子分布が平衡状態に達するのに τ 回衝突を要することを意味する。

・過緩和領域 ($\frac{1}{2} < \tau < 1$)

LBE において平衡分布が過大に評価されることを意味し、衝突回数が 1 回未満 0.5 回超過で粒子分布が平衡状態に達する。物理的にはタイムステップが平衡状態への緩和時間に比べて大きいことに相当する。尚、 $\tau > \frac{1}{2}$ という条件の詳細は 2.2.2 節で示す。

2.2.2 線形安定性

Dieter A. Wolf-Gladrow らによる非熱流体における単一緩和係数 τ と線形安定性の関係 [13] は容易に熱流体における関係へと拡張可能である。外力項を無視した LBE は以下となる。

$$f_{\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t + \Delta t) = f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{\tau} [f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) - f_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)] \quad (2.10)$$

均一な流れ場の場合、LBE は位置に依存しなくなるため以下のようになる。

$$f_{\sigma i}(t + \Delta t) = f_{\sigma i}(t) - \frac{1}{\tau} [f_{\sigma i}(t) - f_{\sigma i}^{eq}(t)]$$

また、各物理量は常に初期状態を保つと仮定すると、平衡分布を初期密度 ρ_0 、初期流速 \mathbf{U}_0 および初期温度 T_0 を達成する分布を用いて以下のように書き換えることができる。

$$f_{\sigma i}^{eq}(t) = f(\rho_0, \mathbf{U}_0, T_0)$$

従って、以下の式となる。

$$f_{\sigma i}(t + \Delta t) = f_{\sigma i}(t) - \frac{1}{\tau} [f_{\sigma i}(t) - f(\rho_0, \mathbf{U}_0, T_0)]$$

Δt 秒間の粒子数変化を議論するために両辺から $f(\rho_0, \mathbf{U}_0, T_0)$ を引き絶対値を取ると、

$$|f_{\sigma_i}(t + \Delta t) - f(\rho_0, \mathbf{U}_0, T_0)| = \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) |f_{\sigma_i}(t) - f(\rho_0, \mathbf{U}_0, T_0)|$$

となる. $t + \Delta t$ 秒間の粒子分布変化 (非平衡量) の絶対値が t 秒間の粒子分布変化 (非平衡量) の絶対値よりも小さくなる⁶と仮定すると以下の関係式が導かれる.

$$|f_{\sigma_i}(t + \Delta t) - f(\rho_0, \mathbf{U}_0, T_0)| < |f_{\sigma_i}(t) - f(\rho_0, \mathbf{U}_0, T_0)|$$

また, 上式を満たす場合, $|f_{\sigma_i}(t + n\Delta t) - f(\rho_0, \mathbf{U}_0, T_0)|$ (n : 任意の定数) は増加しない. 従って, この条件を満たすための τ の条件は $|1 - 1/\tau| < 1$ より

$$\tau > \frac{1}{2} \tag{2.11}$$

となる.

2.2.3 クーラン数および拡散数

LBE を陽解法を用いて解析する場合, 安定に解析を進める (物理量の伝播を正しく扱う) ためのタイムステップサイズおよび格子間隔の制限が存在する. 以下に代表的な 2 つの安定条件 [13] を示す.

・クーラン数

von Neumann の安定解析から移流方程式の安定条件は以下となる.

$$|U_{\max}| \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \tag{2.12}$$

ここで, Δt は単位時間, Δx は格子間隔, $|U_{\max}|$ は流れ場の最大速さである. LBM の場合, 移流は粒子運動によって評価されるのでクーラン条件は

$$\frac{|U_{\max}|}{|\max(e)|} \leq 1 \tag{2.13}$$

となる. ここで $|\max(e)|$ は仮想粒子速さ e の最大値である.

⁶絶対値が等しい場合, 時間が無限に経過しても粒子分布は平衡状態に達しない.

- ・ 拡散数

また, 拡散方程式では以下の式が安定条件となる.

$$\nu \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2} \quad (2.14)$$

ν は動粘性係数 (運動量の拡散率) または温度伝導度 (熱拡散率) を表す. LBM ではナビエ・ストークス方程式に近似するように平衡分布関数を求めるため, 大きな時間スケールでは LBM においても拡散数に制限が生じると考えられる.

第 3 章

格子ボルツマン法の多成分拡張法

本章では一成分流体 LB モデルを多成分流体 LB モデルに拡張する多成分拡張法の概要を示す。また、解析的な各物理量の保存、数値解による検証および解析例を示す。

3.1 多成分拡張法の概要

LBM における混和混相流解析としては、E.G.Flekkøy, R. Holme ら, S.Ponce Dawson らによる混和二成分流モデルが挙げられる。E.G.Flekkøy のモデルでは、流れ解析は二成分の混合流体として解き、片方の成分のみ拡散を追跡することで二成分の存在割合を導出している。このため、三成分以上に拡張することは難しい。R.Holme らのモデルは二成分の流れをそれぞれを独立して解き、平衡状態では二成分は流れ場の平均流速を持つと仮定し、解析を行っている。しかし、R.Holme らのモデルでは、成分間相互作用を二成分に限定してモデル化しており、アルゴリズム的には二成分までの解析に限られる。S.Ponce Dawson らのモデルでは、多成分系への拡張が可能であるが、流れ場を混合流体として解析しており成分毎の流れ場を解析することが難しい。

また、これらのモデルは熱流動¹を考慮していない。そこで、本研究では任意の一成分流体モデルを多成分流体モデルに拡張でき、熱流動を考慮可能な「多成分拡張法」を提案した。「多成分拡張法」は成分毎の流れ場(流速, 温度)を解き、衝

¹流れ場が常に等温であれば、これらのモデルでも熱を計算することは可能である。

突過程において任意の数の成分間相互作用をモデル化するのが特徴である²。「多成分拡張法」は成分毎に流れ場を解くため、解析に用いる各成分の一成分流体モデルは制限がない。このため、熱を考慮した一成分流体モデルを用いた場合、熱流動混和混相流解析モデルを導くことが可能である。また、「多成分拡張法」は平衡分布を置き換えるだけで成分間相互作用を考慮できるため、任意の成分数に拡張することが可能である。

成分間相互作用のモデル化にあたっては「平衡状態において、各成分は流れ場の平均流速および平均温度」を持つと仮定した。尚、次節で詳細な成分間相互作用のモデル化を示す。

3.2 多成分拡張法

多成分拡張法 (Multi-Component Extension Method, 以下 MCEM と略す) は一成分 LB モデルを多成分 LB モデルへ拡張することが可能である。簡単のため、本節では二成分モデルへの拡張を示すが、同様の手法で多成分流体モデルに拡張が可能である。また、ここでは熱流体モデルに対し拡張を行うが、非熱流体モデルの場合は温度に関する式を無視すれば良い。まず、成分毎に独立した支配方程式を用いる。ここで二成分の種類をインデックスを r と b とし、二本の格子ボルツマン方程式 (LBE) で記述する。

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

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

ここで Δt は単位時間、 τ_r, τ_b は各成分の単一緩和係数であり動粘性係数と対応付けられる値である。 $f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t), f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)$ は各成分の位置 \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 (添字 σ は粒子の速さ, i は方向を表す)。この粒子分布と局所物理量は式 (3.3),(3.4),(3.5) と対応付けられる (変数 m は成分の種類を表し, $m = r$

²S.Ponce Dawson らのモデルでは N 成分の計算時間は一成分の計算時間の約 $(N + 1)$ 倍となるが、多成分拡張法の計算時間は N 成分の場合約 N 倍であり、より計算負荷が少ない。

または $m = b$).

$$\rho_m(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) \quad (3.3)$$

$$\rho_m(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t)\mathbf{e}_{\sigma i} \quad (3.4)$$

$$\rho_m(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \right] = \sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i}^2 \quad (3.5)$$

(但し, $\rho_m(\mathbf{r}, t) = 0$ の時 $|\mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t)| = 0, \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) = 0$ とする)

ここで, $\rho_m(\mathbf{r}, t)$ は位置 \mathbf{r} , 時刻 t における成分 m の局所密度, $\mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t)$ は同位置, 同時刻における成分 m の局所流速, $\varepsilon_m(\mathbf{r}, t)$ は同位置, 同時刻における成分 m の局所運動エネルギーである. 密度の場合分けにより相の完全分離状態を扱うことが可能となる. 本拡張法では LBE における平衡分布を成分間の相互作用を考慮した平衡分布と置き換える³. 式 (3.1), (3.2) における $i f_{r\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t), i f_{b\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)$ は位置 \mathbf{r} , 時刻 t における成分間の相互作用を考慮した平衡状態における粒子分布 (平衡分布) である.

次に, 相互作用を考慮した平衡分布を求めるために本拡張法では「平衡状態において各成分は同じ流速及び温度を持つ」という仮定を用いる. まず, 衝突前の各成分の総和による物理量を式 (3.6), (3.7), (3.8) から求める.

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} \{f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) + f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} \quad (3.6)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} \{f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) + f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} \mathbf{e}_{\sigma i} \quad (3.7)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t) \right] = \sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} \{f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) + f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} \mathbf{e}_{\sigma i}^2 \quad (3.8)$$

この二成分総和による流速及び温度は各成分の流速及び温度を平均したものと等価である. 求められた各物理量を一成分 LB モデルの平衡分布関数を用い平衡分布

³成分間の相互作用を平衡分布に含めることに相当する. 従って, 成分間の相互作用による成分 r の粒子分布変化を $\Delta f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t)$ と置くと $i f_{r\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) = f_{r\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) + \Delta f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t)$ となる.

を求める。各成分の相互作用を考慮した時の二成分総和による平衡分布を $n_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)$ とすると以下の式が導かれる。

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

式 (3.9) における右辺は成分間の相互作用を考慮した各成分の平衡分布であり、未知数である。次に、この各成分の平衡分布を衝突前後で各成分の質量保存が成立するように式 (3.10), (3.11) を用いて求める。

$$i f_{r\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) = n_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \rho_r(\mathbf{r}, t) / \rho(\mathbf{r}, t) \quad (3.10)$$

$$i h_{b\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) = n_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \rho_b(\mathbf{r}, t) / \rho(\mathbf{r}, t) \quad (3.11)$$

以上により、一成分 LB モデルを二成分 LB モデルに拡張することができた。多成分 LB モデルに拡張する場合は成分毎に LBE を使い、各 LBE における平衡分布を各成分の相互作用を考慮した平衡分布に置き換えることで多成分流体解析が可能な LB モデルへ拡張することが可能である。また、本拡張法は LB モデル及び平衡分布関数に依存しないため、任意の LB モデルへの適用が可能である。

3.3 各物理量の保存

本拡張法における相互作用を考慮した平衡分布は衝突前の各物理量を保存することを示す。まず、相互作用を考慮しない平衡分布を $f_{r\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)$, $f_{b\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)$, 平衡分布からのずれを表す非平衡分布を $f_{r\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t)$, $f_{b\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t)$ とすると衝突前の粒子分布は以下の式で表せる。

$$f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) = f_{r\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) + f_{r\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t) \quad (3.12)$$

$$f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t) = f_{b\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) + f_{b\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t) \quad (3.13)$$

また, 非平衡分布に関して LBM では一般的に式 (3.14),(3.15),(3.16) が成立する.

$$\begin{cases} \sum_{\sigma,i} f_{r\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t) = 0 \\ \sum_{\sigma,i} f_{b\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t) = 0 \end{cases} \quad (3.14)$$

$$\begin{cases} \sum_{\sigma,i} f_{r\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i} = 0 \\ \sum_{\sigma,i} f_{b\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i} = 0 \end{cases} \quad (3.15)$$

$$\begin{cases} \sum_{\sigma,i} \frac{1}{2} f_{r\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i}^2 = 0 \\ \sum_{\sigma,i} \frac{1}{2} f_{b\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i}^2 = 0 \end{cases} \quad (3.16)$$

また, 相互作用を考慮した平衡分布は異成分との相互作用による粒子分布変化を $\Delta f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t), \Delta f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)$ とすると以下のように表せる.

$$\Delta f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) = i f_{r\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) - f_{r\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (3.17)$$

$$\Delta f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t) = i f_{b\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) - f_{b\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (3.18)$$

また, 二成分総和時の各物理量は衝突前後で保存されるので異成分との相互作用による粒子分布変化に関し以下が成立する.

$$\sum_{\sigma,i} \{\Delta f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) + \Delta f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} = 0 \quad (3.19)$$

$$\sum_{\sigma,i} \{\Delta f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) + \Delta f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} \mathbf{e}_{\sigma i} = 0 \quad (3.20)$$

$$\sum_{\sigma,i} \frac{1}{2} \{\Delta f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) + \Delta f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} \mathbf{e}_{\sigma i}^2 = 0 \quad (3.21)$$

成分 r の質量保存について, 相互作用を考慮した平衡分布から求めた成分 r の密度を $\rho_r^{eq}(\mathbf{r}, t)$ と置くと, 平衡分布と平衡状態における局所密度の関係式は式 (3.3) と同様に以下ようになる.

$$\rho_r^{eq}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} i f_{r\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (3.22)$$

また, 相互作用を考慮した平衡分布から求めた二成分総和時の密度を $\rho^{eq}(\mathbf{r}, t)$ と置くと式 (3.6) と同様に式 (3.23) が導かれる.

$$\rho^{eq}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} \{i f_{r\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) + i f_{b\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)\} \quad (3.23)$$

二成分総和時の密度は衝突前後で不変なので式 (3.24) が成立する.

$$\rho^{eq}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \quad (3.24)$$

成分 r の衝突前後での密度変化を求めるため式 (3.9),(3.10),(3.22),(3.23) 及び (3.24) を用いると

$$\rho_r^{eq}(\mathbf{r}, t) = \{\rho_r(\mathbf{r}, t)/\rho(\mathbf{r}, t)\} \sum_{\sigma, i} n_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) = \rho_r(\mathbf{r}, t) \quad (3.25)$$

となり, 衝突前後で質量が保存されていることが分かる. 各成分の相互作用を考慮した平衡分布から求めた成分 b の密度を $\rho_b^{eq}(\mathbf{r}, t)$ と置くと成分 b についても式 (3.22) ~ (3.25) と同様の式が成立し,

$$\rho_b^{eq}(\mathbf{r}, t) = \rho_b(\mathbf{r}, t) \quad (3.26)$$

式 (3.26) が成立する. 以上より衝突前後で各成分の質量保存が成立することが分かる. 従って, 総和質量保存も成立することは明らかである. 運動量保存に関しては二成分の総和を取った時に成立する. 成分間相互作用を考慮した各成分の平衡分布の総和から求めた流速を $\mathbf{u}^{eq}(\mathbf{r}, t)$ と置き, 式 (3.7),(3.12),(3.13),(3.15) 及び (3.20) を用いると以下の式が成立する.

$$\rho^{eq}(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}^{eq}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} \{i f_{r\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) + i f_{b\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)\}\mathbf{e}_{\sigma i}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\sigma,i} \mathbf{e}_{\sigma i} \left[\begin{array}{l} f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) + \Delta f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) - f_{r\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t) \\ + f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t) + \Delta f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t) - f_{b\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t) \end{array} \right] \\
&= \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)
\end{aligned} \tag{3.27}$$

以上より, 二成分の総和において衝突前後で運動量保存が成立していることが分かる. エネルギー保存に関しても二成分の総和を取った時に成立する. 成分間相互作用を考慮した各成分の平衡分布から求めた内部エネルギーを $\varepsilon^{eq}(\mathbf{r}, t)$ とし式 (3.8),(3.12),(3.13),(3.16),(3.17),(3.18) 及び (3.21) を用いるとエネルギー保存は以下の式

$$\begin{aligned}
&\rho^{eq}(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\{\mathbf{u}^{eq}(\mathbf{r}, t)\}^2}{2} + \varepsilon^{eq}(\mathbf{r}, t) \right] \\
&= \sum_{\sigma,i} \frac{1}{2} \{i f_{r\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) + i f_{b\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)\} \mathbf{e}_{\sigma i}^2 \\
&= \sum_{\sigma,i} \frac{\mathbf{e}_{\sigma i}^2}{2} \left[\begin{array}{l} f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) + \Delta f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) - f_{r\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t) \\ + f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t) + \Delta f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t) - f_{b\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t) \end{array} \right] \\
&= \rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t) \right]
\end{aligned} \tag{3.28}$$

となり二成分の総和において衝突前後でエネルギーが保存される. 以上により, 本拡張法における相互作用を考慮した平衡分布は, 衝突前の質量, 運動量及びエネルギーを保存していることが分かる.

3.4 多成分拡張法の制限事項

前節では相互作用を考慮した平衡分布が各物理量を保存することを示した. 本節では多成分拡張法を用いた LBE における各物理量の保存について考察を行う. 前節で示した拡張二成分モデルにおいて, 一回の衝突後の粒子分布は式 (3.1),(3.2) より以下の式で表される. 簡単のため, 並進過程は考慮せず衝突過程のみ考慮した.

$$f_{r\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i} \Delta t, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{1}{\tau_r}\right) f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) + \frac{i f_{r\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)}{\tau_r} \tag{3.29}$$

$$f_{b\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i} \Delta t, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{1}{\tau_b}\right) f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t) + \frac{i f_{b\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)}{\tau_b} \tag{3.30}$$

衝突後の二成分総和による密度を $\rho'(\mathbf{r}, t + \Delta t)$ と置くと式 (3.3), (3.6), (3.22), (3.25), (3.26), (3.29) 及び (3.30) より以下の式が成立する.

$$\begin{aligned}
\rho'(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \sum_{\sigma, i} \{f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t + \Delta t) + f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t + \Delta t)\} \\
&= \sum_{\sigma, i} \{f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) + f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} + \frac{1}{\tau_r} \sum_{\sigma, i} \{i f_{r\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) - f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} \\
&\quad + \frac{1}{\tau_b} \sum_{\sigma, i} \{i f_{b\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) - f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} \\
&= \rho(\mathbf{r}, t)
\end{aligned} \tag{3.31}$$

式 (3.31) より τ_r, τ_b に依存せず常に質量保存の式 (3.32) が成立することが分かる.

$$\rho'(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \rho(\mathbf{r}, t) \tag{3.32}$$

また 3.2 節で示したように各成分の質量保存は衝突前の各成分の存在比から算出するため τ_r, τ_b によらず常に成立する. 運動量保存に関しては二成分総和での流速を \mathbf{u}' とすると式 (3.7), (3.12), (3.13), (3.15), (3.17), (3.18), (3.29) および (3.30) を用いて以下のようなになる.

$$\begin{aligned}
&\rho'(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}'(\mathbf{r}, t + \Delta t) \\
&= \sum_{\sigma, i} \{f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t + \Delta t) + f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t + \Delta t)\} \mathbf{e}_{\sigma i} \\
&= \sum_{\sigma, i} \{f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) + f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} \mathbf{e}_{\sigma i} + \frac{1}{\tau_r} \sum_{\sigma, i} \{\Delta f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) - f_{r\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t)\} \mathbf{e}_{\sigma i} \\
&\quad + \frac{1}{\tau_b} \sum_{\sigma, i} \{\Delta f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t) - f_{b\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t)\} \mathbf{e}_{\sigma i} \\
&= \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) + \sum_{\sigma, i} \left\{ \frac{\Delta f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t)}{\tau_r} + \frac{\Delta f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)}{\tau_b} \right\} \mathbf{e}_{\sigma i}
\end{aligned} \tag{3.33}$$

式 (3.33) において $\tau_r = \tau_b$ の時, 右辺第二項の $1/\tau_r, 1/\tau_b$ は $1/\tau_r$ で括弧の外に出せ更に式 (3.20) より右辺第二項は 0 となる. 従って, 衝突前後での二成分総和時の運動量保存が成立することが分かる. 一方, $\tau_r \neq \tau_b$ の時は右辺第二項が 0 とならないために衝突前後で二成分総和時の運動量保存が成立しない. エネルギー保存に関して, 衝突後の二成分総和による内部エネルギーを ε' とすると式 (3.8), (3.12), (3.13), (3.16), (3.17), (3.18), (3.29) および (3.30) より以下のようなになる.

$$\begin{aligned}
& \rho'(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\{\mathbf{u}'(\mathbf{r}, t + \Delta t)\}^2}{2} + \varepsilon'(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \\
&= \sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} \{f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t + \Delta t) + f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t + \Delta t)\} \mathbf{e}_{\sigma i}^2 \\
&= \rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\{\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)\}^2}{2} + e(\mathbf{r}, t) \right] + \sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} \left\{ \frac{\Delta f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t)}{\tau_r} + \frac{\Delta f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)}{\tau_b} \right\} \mathbf{e}_{\sigma i}^2
\end{aligned} \tag{3.34}$$

式 (3.34) において $\tau_r = \tau_b$ の時、右辺第二項の $1/\tau_r, 1/\tau_b$ は括弧の外に出せ更に式 (3.21) より右辺第二項は 0 となる。従って、衝突前後での二成分総和時のエネルギー保存が成立する。一方、 $\tau_r \neq \tau_b$ の時は右辺第二項が 0 とならないために衝突前後で二成分総和時のエネルギー保存が成立しない。以上より流れ場の運動量保存及びエネルギー保存を正確に考慮するには各成分の動粘性係数 (単一緩和係数 τ_r, τ_b) を同じ値にする必要がある。しかしながら本手法は各成分の動粘性係数 (単一緩和係数) の差が小さい ($|\tau_r - \tau_b| \approx 0$) 場合にも適用可能である。

3.5 解析的な検証

本項では物性値が等しい成分数 N の混合流体は一成分流体と一致することを解析的に示す。簡単のため、 N 成分の混合流体を対流と拡散に分け検証を行う。

3.5.1 対流

本項では物性値が等しい N 成分で構成される混合流体の対流は一成分流体の対流と一致することを示す。まず、成分 m の粒子分布 $f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t)$ を平衡分布 $f_{m\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)$ と非平衡分布 $f_{m\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t)$ に分けて表記すると式 (3.35) となる。

$$f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) = f_{m\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) + f_{m\sigma i}^{neq}(\mathbf{r}, t) \quad (m = 1, 2, 3, \dots, N) \tag{3.35}$$

流れ場が定常に達した時、もしくは非定常流れで単一緩和係数 $\tau = 1$ の時、式 (3.35) の右辺第二項は 0 となる。従って、次式が成立する。

$$f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) = f_{m\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \tag{3.36}$$

式 (3.36) について σ, i について総和を取り、式 (3.3) を用いると局所密度が得ら

れる.

$$\rho_m(\mathbf{r}, t) = \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (3.37)$$

式 (3.36) に $\mathbf{e}_{\sigma i}$ を掛け σ, i について総和を取り, 式 (3.4) を用いると局所流速が得られる.

$$\rho_m(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t) = \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (3.38)$$

同様に式 (3.36) に $\frac{1}{2} \mathbf{e}_{\sigma i}^2$ を掛け σ, i について総和を取り, 式 (3.5) を用いると局所エネルギーが得られる.

$$\rho_m(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t) \right] = \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t)^2}{2} + \varepsilon_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \right] \quad (3.39)$$

多成分拡張法では平衡状態において各成分は同じ流速, エネルギー⁴ を持つため, 定常状態において任意の m に対し次式が成立する.

$$\begin{cases} \mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t) = \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t) \\ \varepsilon_m^{eq}(\mathbf{r}, t) = \bar{\varepsilon}(\mathbf{r}, t) \end{cases} \quad (3.40)$$

ここで, $\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t)$ および $\bar{\varepsilon}(\mathbf{r}, t)$ は流れ場 (混合流体) の流速およびエネルギーである. 以上より, 式 (3.37) ~ (3.39) の成分 m について総和を取り, 式 (3.40) を代入すると,

$$\rho(\mathbf{r}, t) \equiv \sum_{m=1}^N \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (3.41)$$

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \frac{\sum_{m=1}^N \mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t)}{N} = \frac{N \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r}, t)}{N} \quad (3.42)$$

$$\varepsilon(\mathbf{r}, t) = \frac{\sum_{m=1}^N \varepsilon_m^{eq}(\mathbf{r}, t)}{N} = \frac{N \bar{\varepsilon}(\mathbf{r}, t)}{N} \quad (3.43)$$

以上より, 同じ物性値を持つ N 成分流体の対流は一成分流体と一致することが明らかとなった.

⁴流れ場の平均流速および平均エネルギー.

3.5.2 分子拡散

本項では物性値が等しい N 成分で構成される混合流体の分子拡散は一成分流体の分子拡散と一致することを示す。まず、一次元空間における同じ物性値を持つ二成分流体を考える。分子拡散のみを考慮するため、流れ場の流速 $U = 0$ とし、1 格子点間に微小な密度変化 $\Delta\rho$ が存在すると仮定する⁵。尚、簡単のため、片方の格子点は常に一定の密度を有すると仮定する。

i) 一成分流体の場合

一格子点間の密度差 $\Delta\rho(t)$ は粒子分布と以下の式で対応付けられる。

$$\sum_{\sigma,i} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) - \sum_{\sigma,i} f_{\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i} \Delta t, t) = \Delta\rho(t) \quad (3.44)$$

また、片方の格子点 (位置 \mathbf{r}) の密度は常に一定値 a であると仮定すると、

$$\sum_{\sigma,i} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) = a \quad (3.45)$$

LBE を代入すると、以下の式が導かれる。

$$\sum_{\sigma,i} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) - \sum_{\sigma,i} \left\{ \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) (f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) + f_{\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i} \Delta t, t - 1)) + \frac{1}{\tau} f_{\sigma i}(\mathbf{r}, t) \right\} = \Delta\rho(t) \quad (3.46)$$

式 (3.46) を σ, i について総和を取ると局所密度の関係式 (3.47) が導かれる。

$$a - \left\{ \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) (a + \rho(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i} \Delta t, t - 1)) + \frac{1}{\tau} a \right\} = \Delta\rho(t) \quad (3.47)$$

尚、時間発展に伴い、式 (3.47) 右辺の $\Delta\rho(t)$ は 0 に近づく。

ii) 二成分流体の場合

片方の格子点 (位置 \mathbf{r}) は常に成分 r のみが存在し、もう片方の格子点 (位置 $\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}$) は初期状態において成分 b のみで満たされていると仮定する。また、二成分の単一緩和係数は等しい ($\tau = \tau_r = \tau_b$) と仮定する。片方の格子点 (位置 \mathbf{r}) の密度は常に一定値 a であると仮定すると、

$$\sum_{\sigma,i} \{f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) + f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} = \rho(\mathbf{r}, t) = \rho_r(\mathbf{r}, t) = a \quad (3.48)$$

⁵簡単のため、周囲の格子点の影響は考慮しない。

この時、一格子点間の密度差が $\Delta\rho(t)$ であるとする流れ場の密度に関して以下の式が成立する.

$$\sum_{\sigma,i} \{f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) + f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} - \sum_{\sigma,i} \{f_{r\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t) + f_{b\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t)\} = \Delta\rho(t) \quad (3.49)$$

LBE を代入すると、以下の式が導かれる.

$$\sum_{\sigma,i} \{f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) + f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)\} - \sum_{\sigma,i} \left\{ \begin{array}{l} \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) \begin{pmatrix} f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) + f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t) \\ + f_{r\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t - 1) \\ + f_{b\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t - 1) \end{pmatrix} \\ + \frac{1}{\tau} (f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) + f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)) \end{array} \right\} = \Delta\rho(t) \quad (3.50)$$

σ, i について総和を取ると、局所密度の関係式が導かれる.

$$a - \sum_{\sigma,i} \left\{ \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) (a + \rho_r(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t - 1) + \rho_b(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t - 1)) + \frac{1}{\tau} a \right\} = \Delta\rho(t) \quad (3.51)$$

ここで、二成分流体の総和密度の関係 $\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_r(\mathbf{r}, t) + \rho_b(\mathbf{r}, t)$ を用いると、

$$a - \sum_{\sigma,i} \left\{ \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) (a + \rho(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t, t - 1)) + \frac{1}{\tau} a \right\} = \Delta\rho(t) \quad (3.52)$$

となり式 (3.47) と一致する. 以上より二成分流体は一成分流体と同じ拡散速度になることが確認できた.

3.6 数値解による検証

拡張法を適用した多成分モデルにおいて各成分が拡張前の一成分と同じであり、総和物理量が等しい場合、拡張前の一成分モデルと同じ結果が得られなければならない. そこで、検証例として拡張法を適用した二成分非熱流体モデルによるキャビティ流れ、及び拡張法を適用した二成分熱流体モデルによるサーマルクエット流れ解析を行った. また、分子拡散速度の検証も併せて行った.

3.6.1 キャビティ流れ

非熱流体モデル⁶としてよく用いられている Shuling Hou らによる 2D9V 非熱流体モデル [9] を拡張法を用いて二成分モデルに拡張し, キャビティ流れの計算において一成分モデルと同じ結果が得られるかどうかを検証した. 2D9V モデルでは粒子速度を図 3.1 及び式 (3.53) のように制限する.

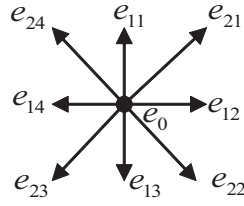


図 3.1: Particle Speed Limitation of 2D9V

$$\begin{cases} \mathbf{e}_0 = (0, 0) \\ \mathbf{e}_{1i} = \left[\cos\left(\frac{i\pi}{2}\right), \sin\left(\frac{i\pi}{2}\right) \right] \\ \mathbf{e}_{2i} = \sqrt{2} \left[\cos\left(\frac{i\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{i\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \right] \\ (i = 1, 2, 3, 4) \end{cases} \quad (3.53)$$

2D9V モデルにおける平衡分布は式 (3.54) の平衡分布関数より求められる.

$$\begin{cases} n_0^{eq}(\mathbf{r}, t) = \frac{4}{9} \left[1 - \frac{3}{2} \mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t) \right] \\ n_{1i}^{eq}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{9} \left[1 + 3(\mathbf{e}_{1i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)) + \frac{9}{2} (\mathbf{e}_{1i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))^2 - \frac{3}{2} \mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t) \right] \\ n_{2i}^{eq}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{36} \left[1 + 3(\mathbf{e}_{2i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)) + \frac{9}{2} (\mathbf{e}_{2i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))^2 - \frac{3}{2} \mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t) \right] \end{cases} \quad (3.54)$$

また, 2D9V モデルにおける動粘性係数 ν は式 (3.55) となる.

$$\nu = \frac{2\tau - 1}{6} \Delta t \quad (3.55)$$

⁶実際には内部エネルギーおよび温度を求めることが可能な等温モデルであるが, 考慮 (代表) している粒子の速さが少ないために (ほぼ) 一定の温度しか扱えない.

本拡張法では各成分の動粘性係数が等しいとみなせるので混合流体としての動粘性係数も式 (3.55) に従う。また, 相互拡散係数 D についても各成分を構成する粒子は同等と見なせる [10] ので D は自己拡散係数となり式 (3.56) で表される⁷。

$$D = \frac{2\tau - 1}{6} \Delta t \quad (3.56)$$

次に, 二成分を構成する成分を r, b とすると各成分の LBE は (3.1), (3.2) となる。次に, 二成分の相互作用を考慮した平衡分布を求める。二成分総和時の密度及び流速を式 (3.6), (3.7) より求め, 式 (3.54) に代入し二成分総和時の平衡分布を求める。この二成分総和時の平衡分布から各成分の相互作用を考慮した平衡分布を式 (3.10), (3.11) より求める。以上により二成分モデルへの拡張が行えた。

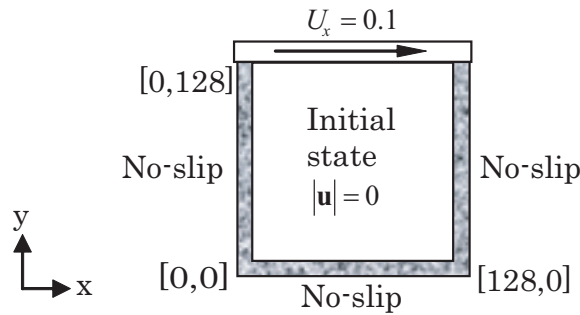


図 3.2: Calculation Condition of Cavity (Re=400)

次に, この拡張二成分 2D9V モデル及び拡張前の 2D9V モデルを用いて数値計算を行った。計算条件を図 3.2 に示す。計算には全て無次元量を用いた。格子点数は 129×129 , 上壁を移動壁とし粒子の反射条件には滑りあり条件を用いた。尚, 滑りあり条件の粒子反射則として壁面に対し垂直な速度成分は符号を逆転し, 壁面に対し水平な速度成分の符号は不変とした。また左, 右, 下壁は固定壁とし粒子の反射条件には滑りなし (Bounce-Back) 条件を用いた。詳細な解析条件を表 3.1 に示す。また, 初期条件として静止流体を仮定した。図 3.3 はレイノルズ数 $Re=400$ の定常

⁷相互拡散係数 D は, LB モデルや計算条件に依存しており, 密度 ρ と単一緩和係数 τ に比例する。一般的に密度が大きくなる程 D は小さな値となり, 単一緩和係数が大きくなる程 D は大きな値となる。

表 3.1: Details of cavity flow (MCEM)

	1Comp (Original)	2Comp (MCEM)
Single relaxation time	0.788	0.788
Local density(Entire domain)	1.00	$r:0.500, b:0.500$
Moving wall	0.300	0.300
Fixed wall	0.000	0.000

状態におけるキャビティ中心軸における流速を拡張前の一成分モデルと多成分拡張法による二成分モデルで比較した図である。

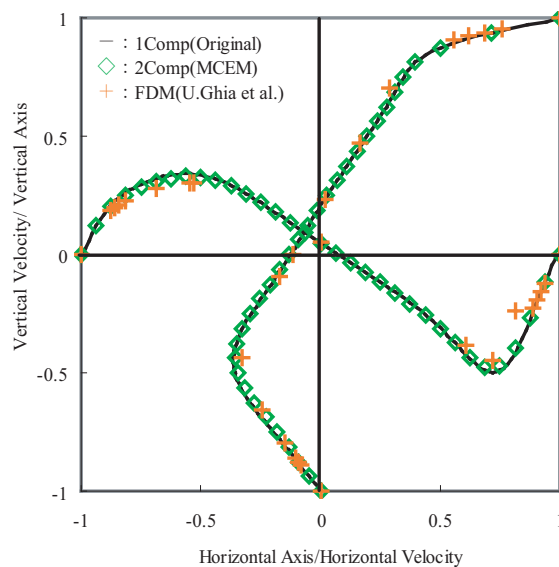


図 3.3: Velocity Magnitude of Cavity Center

横軸の曲線は $y = 64$ における鉛直方向の流速, 縦軸の曲線は $x = 64$ における水平方向の流速を表す. 尚, 流速は 0.3, 空間は 64 で規格化を行い中心座標を 0 とした. 図 3.3 の は二成分モデルによる結果, 実線は拡張前の一成分モデルによる結果であり良い一致が見られる. また, 全領域における流速の比較を行った所, 二成分モデルは拡張前の一成分モデルと同じ結果が得られることが確認できた. 尚, 他手法との比較のために U.Ghia らによる有限差分法による結果 [14] を + としてプ

ロットした. 多成分拡張法で用いた 2D9V モデルは有限差分法による結果と良く一致していることが確認できた. 密度に関しては二成分モデルは一成分モデルと同じ結果が得られることが確認された. また, 二成分の存在比については常に計算領域全体で 1:1 となることが確認できた. 尚, 定常状態に達するまでの一成分モデルと二成分モデルの結果は一致していることから, 多成分拡張法は非定常流れを正しく扱えることが確認できた. 以上より多成分拡張法は非熱流体において有用であると結論付けられる.

3.6.2 サーマルクエット流れ

粘性散逸が考慮可能であり, 数値安定性が高いと考えられる薦原らによる 2D21V 熱流体モデル [12] を拡張法を用いて二成分流体モデルに拡張した. 二成分を一成分流体モデルの成分と同等にした場合のサーマルクエット流れの計算を行い, 拡張前の一成分流体モデルと同じ結果が得られるかを検証した. 2D21V モデルでは粒子速度を図 3.4 及び式 (3.57) のように制限する.

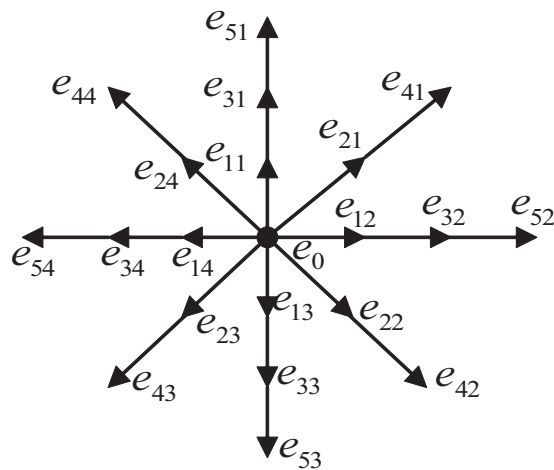


図 3.4: Particle Speed of 2D21V

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{e}_0 = (0, 0) \\ \mathbf{e}_{1i} = \left(\cos\left(\frac{i\pi}{2}\right), \sin\left(\frac{i\pi}{2}\right) \right) \\ \mathbf{e}_{2i} = \sqrt{2} \left(\cos\left(\frac{i\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{i\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \right) \\ \mathbf{e}_{3i} = 2 \left(\cos\left(\frac{i\pi}{2}\right), \sin\left(\frac{i\pi}{2}\right) \right) \\ \mathbf{e}_{4i} = 2\sqrt{2} \left(\cos\left(\frac{i\pi}{2} + \frac{\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{i\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \right) \\ \mathbf{e}_{5i} = 3 \left(\cos\left(\frac{i\pi}{2}\right), \sin\left(\frac{i\pi}{2}\right) \right) \\ (i = 1, 2, 3, 4) \end{array} \right. \quad (3.57)$$

また, 2D21V モデルにおける平衡分布は式 (3.58) より求められる.

$$n_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) = M_\sigma \rho(\mathbf{r}, t) \left[\begin{array}{l} 1 + \frac{(\mathbf{e}_{\sigma i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))}{\varepsilon(\mathbf{r}, t)} + \frac{(\mathbf{e}_{\sigma i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))^2}{2\varepsilon^2(\mathbf{r}, t)} \\ - \frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2\varepsilon(\mathbf{r}, t)} + \frac{(\mathbf{e}_{\sigma i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))^3}{6\varepsilon^3(\mathbf{r}, t)} \\ - \frac{(\mathbf{e}_{\sigma i} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))(\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}, t))}{2\varepsilon^2(\mathbf{r}, t)} \end{array} \right] \quad (3.58)$$

(但し, $\rho(\mathbf{r}, t) = 0$ の時 $n_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) = 0$ とする)

ここで, M_σ は仮想粒子の速さ毎のパラメータである. また, 2D21V モデルにおいて動粘性係数 ν は

$$\nu = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) E \Delta t \quad (3.59)$$

式 (3.59) となる. ここで, E は流れ場の代表内部エネルギーを表す. 3.6.1 節と同様に混合流体の動粘性係数は式 (3.59) で表される. 熱伝導係数 k については以下の式となる.

$$k = 2R\rho E \Delta t \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \quad (3.60)$$

ここで, R は気体定数, ρ は流れ場の密度を表す. 動粘性係数と同様に混合流体における熱伝導係数も式 (3.60) に従う. また, 相互拡散係数 D は 3.6.1 節と同様に自己拡散係数⁸となるので式 (3.61) となる.

$$D = \left(\tau - \frac{1}{2} \right) E \Delta t \quad (3.61)$$

⁸自己拡散係数 D は, LB モデルや計算条件に依存しており, 密度 ρ , 内部エネルギー (温度) ε と単一緩和係数 τ に比例する. 一般的に密度が大きくなる程 D は小さな値となり, 内部エネルギーおよび単一緩和係数が大きくなる程 D は大きな値となる.

次に、二成分の相互作用を考慮した平衡分布を求める。まず、二成分の総和による局所物理量を式 (3.6),(3.7),(3.8) より求める。ここで得られた局所物理量を用いて式 (3.58) から二成分総和の平衡分布を求め、式 (3.10),(3.11) を用いて二成分の相互作用を考慮した各成分の平衡分布を算出する。以上により一成分熱流体 2D21V モデルを二成分熱流体 2D21V モデルに拡張することができた。

尚、二成分流体のシュミット数 Sc は式 (3.62) となる。尚、 E_r, E_b はそれぞれ成分 r, b の代表内部エネルギーを表す。

$$Sc = \frac{E_r (2\tau_r - 1)}{E_b (2\tau_b - 1)} \quad (3.62)$$

この拡張二成分 2D21V モデル及び一成分 2D21V モデルを用いて解析を行う。次に、解析条件を図 3.5 に示す。格子点数は 126×126 、上壁を加熱移動壁、下壁を冷却固定壁、左右を周期境界とした。境界における粒子反射条件として、移動壁では滑りあり条件、固定壁では滑りなし条件を与えた。また、境界上の格子点には巨視的な物理量をディリクレ条件として与えた。その他の解析条件は表 3.2 のように置い

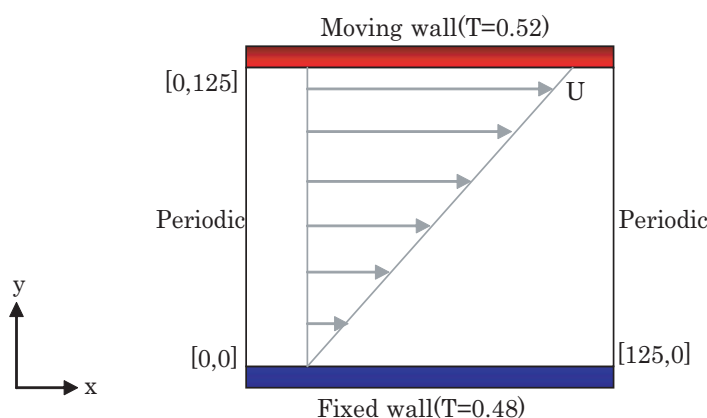


図 3.5: Problem specification of thermal Couette flow

た。また、定積比熱 $C_v = 1$ とし、局所温度 $T(\mathbf{r}, t)$ を $T(\mathbf{r}, t) = \varepsilon(\mathbf{r}, t)/C_v = \varepsilon(\mathbf{r}, t)$ とした。尚、各物理量は全て無次元数である。図 3.6 に定常状態における $x = 64$ での水平方向の流速を示す。図 3.6 の横軸は $x = 64$ における水平方向流速、縦軸は鉛直座標である。また、は反応多成分拡張法による二成分モデルによる結果、実線

表 3.2: Details of thermal Couette flow

	1Comp (Original)	2Comp (MCEM)
Single relaxation time	1.0	$r:1.0, b:1.0$
Local density(Entire domain)	0.10	$r:0.050, b:0.050$
Moving wall(Speed)	0.30	0.30
Moving wall(Static temperature)	0.52	0.52
Fixed wall(Speed)	0.00	0.00
Fixed wall(Static temperature)	0.48	0.48

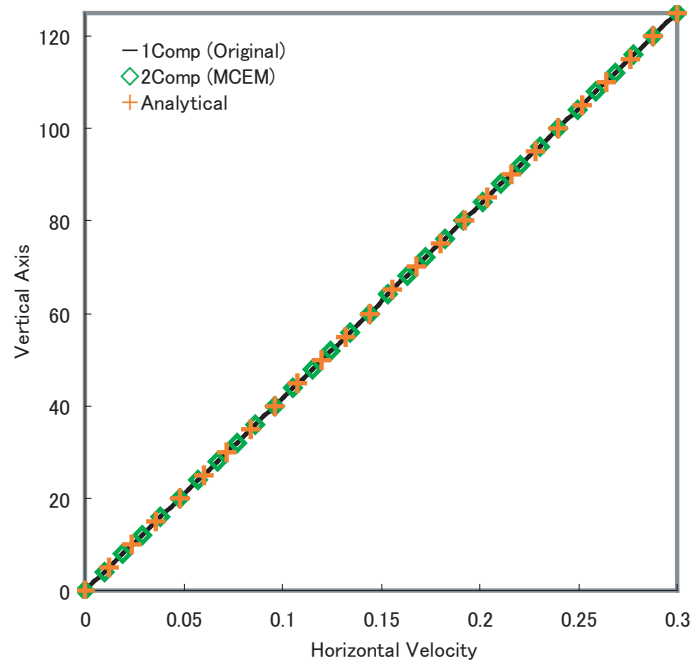
は拡張前の一成分モデルによる結果であり良い一致が見られる。尚、解析解 [21] は式 (3.63) となる。

$$u(y) = 0.3y/125 \quad (3.63)$$

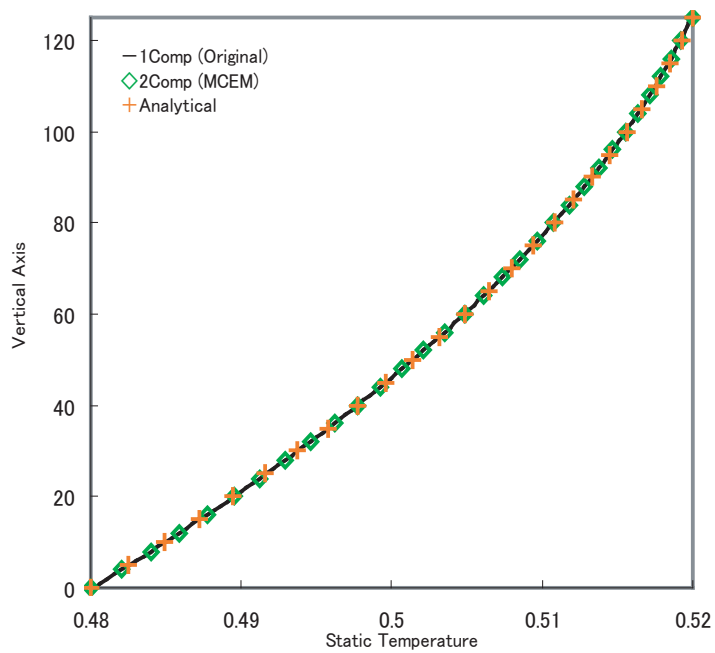
流速に関し計算領域全体で一成分モデルと拡張二成分モデルで比較を行った結果、同じ結果を得られることが確認できた。次に、この時の $x = 64$ における温度分布を図 3.7 に示す。図 3.7 の横軸は $x = 64$ における温度、縦軸は鉛直方向座標である。また、図 3.7 の は二成分モデルによる結果、実線は拡張前の一成分モデルによる結果であり良い一致が見られる。また、+ は式 (3.64) の解析解 [12] である。式 (3.64) の右辺第三項は粘性散逸を表す。

$$T(y) = 0.04y/125 + 0.48 + 0.09y(1 - y/125)/(4 \times 125) \quad (3.64)$$

温度に関し計算領域全体で一成分モデルと拡張二成分モデルで比較を行った結果、同じ結果を得られることが確認できた。また、密度に関しても計算領域全体で一成分モデルと拡張二成分モデルで比較を行った結果、同じ結果が得られた。二成分の存在比については計算領域全体で常に 1:1 となることが確認できた。定常状態に達するまでの一成分モデルと二成分モデルの結果が一致していることから、多成分拡張法は非定常流れに対しても有効であると考えられる。以上より熱流体モデルについても本拡張法は有用であると結論付けられる。



3.6: Horizontal velocity at $x = 64$



3.7: Temperature at $x = 64$

3.6.3 分子拡散

本項では多成分拡張法の分子拡散速度を前節の2D21Vモデルを用いて検証した。二成分流体が同じ物性値を持つ場合、二成分の拡散速度は一成分の拡散速度⁹と同じにならなければならない。

次に解析条件を図3.8に示す。格子点数 100×100 の正方形領域を設定し、左右を周期境界、上下壁を等温固定壁とした。また、初期状態において図3.8のように流れ場に初期密度差を設定した。尚、流れ場は静止し、流れ場は等温であると仮定した。

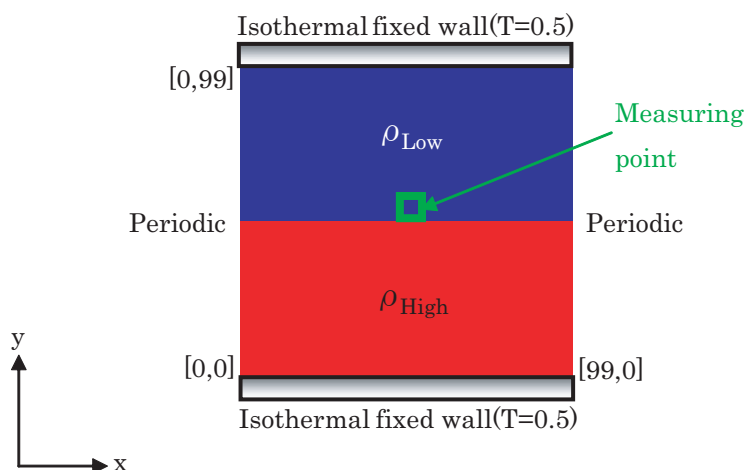


図 3.8: Problem specification of molecular diffusion

一成分流体の場合は流れ場に密度差 0.1 を設定し、二成分流体の場合は混合流体において密度差が 0.1 となるように各成分を配置した。尚、初期状態において上半分を成分 b で満たし下半分を成分 r で満たした。詳細な条件を表 3.3 に示す。

図 3.9 は 100 タイムステップ間における密度変化をプロットしたものであり、横軸はタイムステップ数、縦軸は局所密度を表す。尚、局所密度は図 3.8 の で囲った格子点で測定を行った。実線は拡張前の 2D21V モデルによる局所密度、 は多成分拡張法による二成分 2D21V モデルによる局所総和密度であり、良い一致が見られる。以上から、多成分拡張法は分子拡散を正しく扱えることが確認できた。

⁹ここでは微小な密度差が分子拡散により減少していく。

表 3.3: Details of molecular diffusion

	1Comp (Original)	2Comp (MCEM)
Single relaxation time	1.0	$r:1.0, b:1.0$
Local density($y = 0 \sim 49$)	0.20	$r:0.20 \quad b:0.00$
Local density($y = 50 \sim 99$)	0.10	$r:0.00, \quad b:0.10$
Wall(Speed)	0.00	0.00
Wall(Static temperature)	0.50	0.50

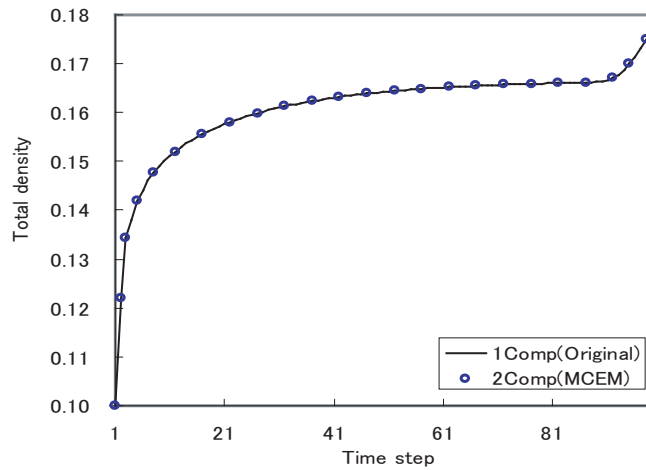


図 3.9: The plot of molecular diffusion speed

3.7 重力下におけるレイリーテイラー不安定性

本節では解析例として重力下におけるレイリーテイラー不安定性の解析を示す。この解析例において流れ場に温度差を設定することが可能であるが、仮想外力項として各成分の質量差及び Boussinesq 近似を考慮するとクーラン条件を満たさず、計算が発散する。このため本節では仮想的な質量差のみを考慮し等温場での解析を行った。

尚、二成分の密度差及び流れ場に温度差があるレイリーテイラー不安定性の解析はクーラン条件を計算領域全体で常に満たす LB モデルを用いれば可能であると

考えられる。尚、本節の解析結果を検証するための適当な文献が無いため計算結果のみを示した。

3.7.1 仮想外力項

3.6.2 節で示した拡張二成分 2D21V モデルを用いて重力下におけるレイリーテイラー不安定性の解析を行う。二成分に仮想的な質量 (密度) 差を設け、初期状態において質量が大きい成分の相を質量の小さい成分の相の上に設け相反転の解析を行った。支配方程式には式 (3.67), (3.68) を用い、相互作用を考慮した平衡分布は式 (3.3) ~ (3.8), (3.10) 及び (3.11) を用いて算出した。重力を考慮するために David R. Noble らによる仮想外力項を用いた。二成分の仮想的な質量差 (密度比) を次式で定義した。

$$\sum_{\sigma i} F_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i} = \alpha_r \rho_r(\mathbf{r}, t) \mathbf{g} \quad (3.65)$$

$$\sum_{\sigma i} F_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i} = \alpha_b \rho_b(\mathbf{r}, t) \mathbf{g} \quad (3.66)$$

ここで、 \mathbf{g} は重力、 $F_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t)$, $F_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t)$ は各成分の仮想外力項、 α_r, α_b は各成分の無次元の仮想質量パラメータ、 $\rho_r(\mathbf{r}, t)$, $\rho_b(\mathbf{r}, t)$ は各成分の密度である。この外力項を LBE の右辺に加えると最終的な支配方程式が導かれる。

$$f_{r\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i} \Delta t, t + \Delta t) - f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau_r} [f_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) - i f_{r\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)] + F_{r\sigma i}(\mathbf{r}, t) \quad (3.67)$$

$$f_{b\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i} \Delta t, t + \Delta t) - f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau_b} [f_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t) - i f_{b\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)] + F_{b\sigma i}(\mathbf{r}, t) \quad (3.68)$$

3.7.2 多成分拡張法のアルゴリズム

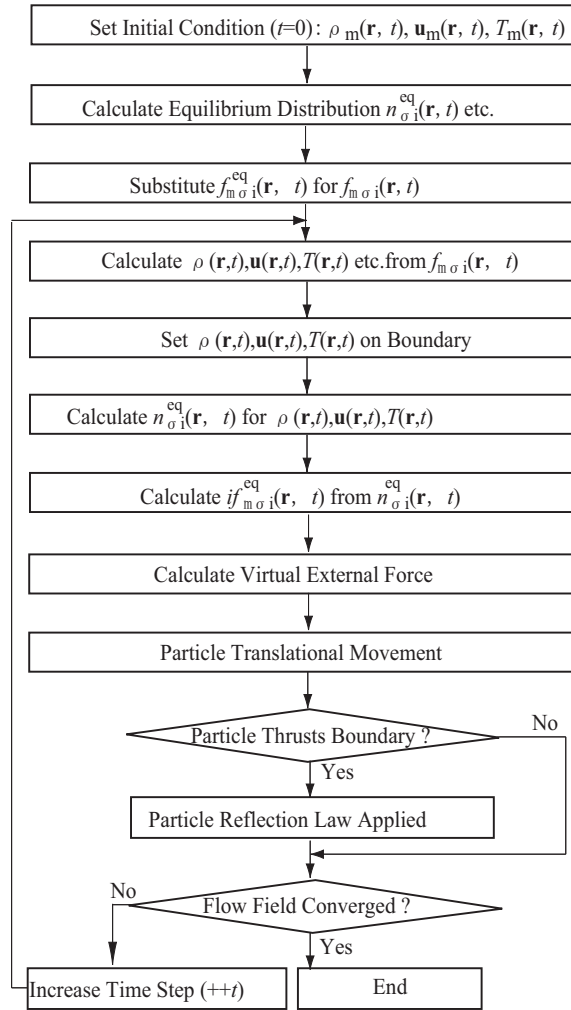
本節では具体的なアルゴリズムのフローチャートを図 3.10 に示す。多成分拡張法のアルゴリズムでは各成分の初期状態における局所密度 $\rho_n(\mathbf{r}, t)$ 、局所流速 $\mathbf{u}_n(\mathbf{r}, t)$ 、局所温度 $T_n(\mathbf{r}, t)$ を設定する。ここで各物理量の添字 m は成分の種類を表す。こ

の各成分の局所物理量と平衡分布関数より平衡分布 $f_{m\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)$ を求め、この平衡分布を各成分の初期粒子分布 $f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t)$ とする。次に、各成分の粒子分布 $f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t)$ と式 (3.3),(3.4),(3.5) を用いて各成分の局所物理量 $\rho_m(\mathbf{r}, t), \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t), T_m(\mathbf{r}, t)$ を求める。この際、式 (3.4) と (3.5) における密度での場合分け¹⁰により各成分が完全に分離した状態を初期条件として設定することが可能となる。また、各成分の粒子分布 $f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t)$ と式 (3.6),(3.7),(3.8) を用いて各成分総和による局所物理量を求め、境界上の局所物理量を予め指定した値に置き換える。この各成分総和による局所平衡分布 $n_{\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)$ から成分間の相互作用を考慮した平衡分布 $i f_{m\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)$ を式 (3.10),(3.11) より求める。次に、各成分の局所物理量から仮想外力項の計算を行い各成分の LBE に従い粒子の並進運動を行う。この時、境界を突き抜ける粒子には粒子反射則を適用する。また、収束判定には式 (3.69) で表される一タイムステップ間の計算領域全体における粒子分布変化量を用いた。

$$conv(t) = \frac{1}{NS} \sum_m \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\sigma, i} |f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) - i f_{m\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)| \quad (3.69)$$

ここで、 $conv(t)$ は時刻 t における収束判定値、 N は成分数、 S は格子点数を表す。収束判定に粒子分布を用いることにより密度、流速及び温度の収束判定を同時に行うことが可能となる。収束条件を満たした場合は計算を終了し、収束条件を満たさない場合はタイムステップを進め、局所物理量の計算部分まで戻り計算を続行する。尚、収束判定の閾値には約 10^{-8} を用いた。

¹⁰2D21V モデルでは式 (3.58) の場合分けも行う必要がある。



☒ 3.10: Flow Chart of Multi-Component Extension Method

3.7.3 解析条件

3.7.1 節及び 3.7.2 節で示したアルゴリズムを用い重力下における二成分流体の相反転の解析を行う。計算条件を図 3.11 に示す。また、計算には全て無次元量を用いた。格子点数は 200×200 、上下は等温固定壁 ($T = 0.5$) で粒子反射則には滑りなし (Bounce-Back) 条件を用いた。左右は周期境界条件とした (図 3.11)。密度は計算領域全体で $\rho = \rho_r + \rho_b = 0.1$ 、単一緩和係数は $\tau_r = \tau_b = 1.05$ 、無次元の仮想質量パラメータは $\alpha_r = 0.1, \alpha_b = 1.1$ とした。初期条件として計算領域の上側半分 ($y = 99 \sim 199$) に密度比の大きい成分の相 ($\rho_r = 0.1, \rho_b = 0$) を設定し、計算領域の下側半分 ($y = 0 \sim 98$) には密度比の小さい成分の相 ($\rho_r = 0, \rho_b = 0.1$) を設けた。また、初期条件として計算領域全体で $T = 0.5$ 、 y 方向の重力加速度 $g_y = -0.001$ 、相反転を発生させるために初期流速に擾乱を追加した。

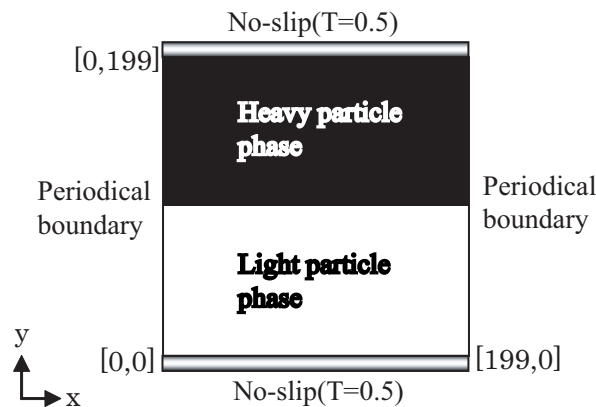


図 3.11: Calculation Setting of Benard Convection

3.7.4 解析結果

本節では逆転相が初期擾乱及び重力の影響により相反転を起こし定常状態になるまでの二成分の存在比および流線を示す。

- ・ 初期状態 ($t = 0$)

図 3.12 は初期状態における二成分の存在割合を示した図である。黒い領域は密

度比の大きい成分 r , 白い領域は密度比の小さい成分 b を表す. 尚, 二成分の存在割合 R_{rb} は以下の式より求めた.

$$R_{rb}(\mathbf{r}, t) = \rho_r(\mathbf{r}, t) - \rho_b(\mathbf{r}, t) \quad (3.70)$$

図 3.12 において多成分拡張法は初期状態において二成分の完全分離を扱うことが可能であることが確認できた.

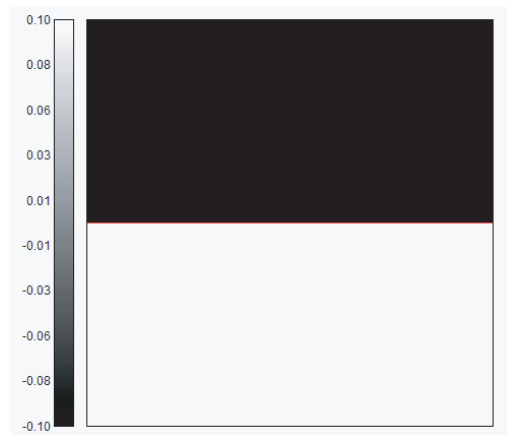


図 3.12: Existence Ratio ($t = 0$)

・相反転初期 ($t = 6,000$)

図 3.13 はタイムステップ $t = 6,000$ における二成分の存在比である. また, 図 3.13 におけるコンターは二成分の存在比の等値線を表す. 茸状の境界相と境界相付近での分子拡散及び対流による弱混合が生じていることが確認できる. これは成分間に表面張力を考慮していないために生じたと考えられる. また, 図 3.14 は $t = 6,000$ における流線でありカラーレジェンドは速度ベクトルの大きさを表している. 図 3.14 においてベナール対流に類似した流れ場を確認することができる. 尚, 計算領域中央付近で上昇流, 計算領域の左端及び右端には下降流が生じている.

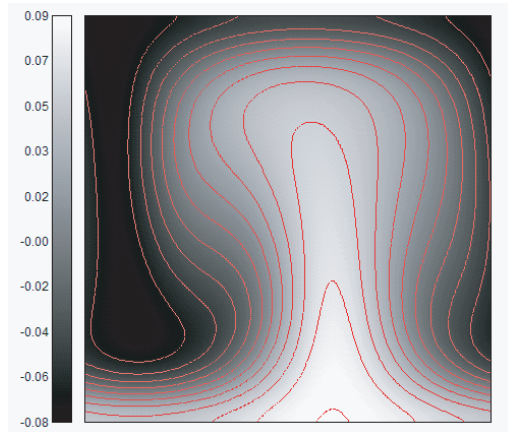


図 3.13: Existence Ratio ($t = 6,000$)

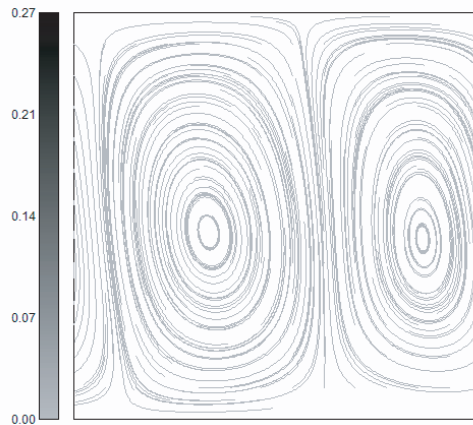


図 3.14: Streamlines ($t = 6,000$)

・境界相の変形 ($t = 8,500$)

図 3.15 は $t = 8,500$ における二成分の存在比である。相の反転は境界相に大きな変化が現れた時点から比較的速く進行することが確認できる。また、密度比の大きい成分の相の下降流が底面に反射し上昇流に転じ密度比の小さい成分の相を押しつけている。また、反転に伴う対流により二成分の存在比の絶対値が小さくなっている。尚、図 3.15 において二成分の存在比が 0 となっている領域は二成分が均等に混合していること (完全混合) を意味する。従って、局所的に完全混合が生じている。また、図 3.16 は $t = 8,500$ における流線であり、 $t = 6,000$ までに見られた大きな二つの渦が一つの大きな渦と複数の小さい渦に分解するという結果が得られた。

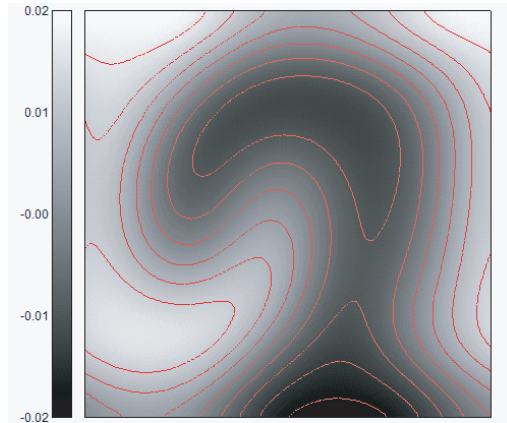


図 3.15: Existence Ratio ($t = 8,500$)

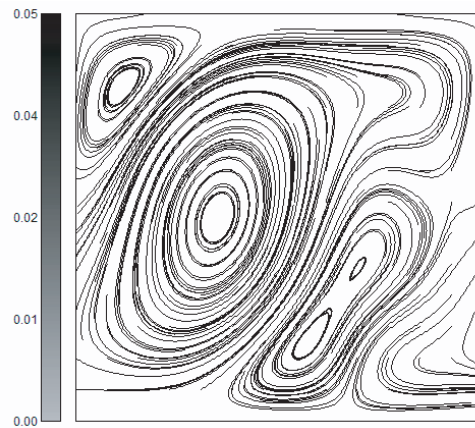
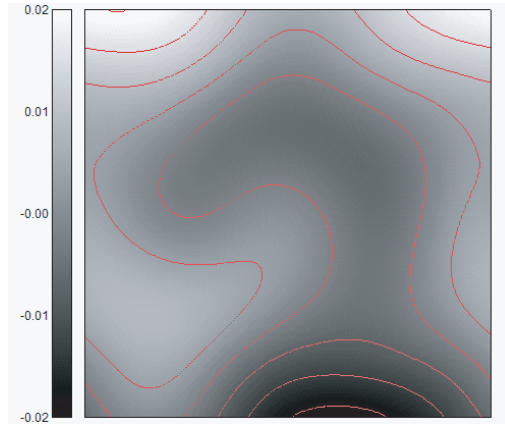


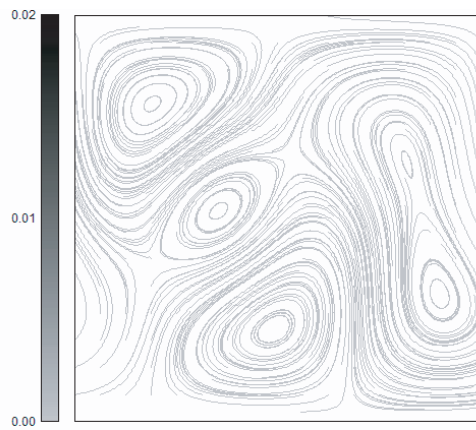
図 3.16: Streamlines ($t = 8,500$)

・境界相の混合 ($t = 10,000$)

図 3.17 は $t = 10,000$ における二成分の存在比である。 $t=6,000$ と比較してあまり大きな変化は見られないが、二成分の混合がより進行していることが分かる。また、図 3.18 は $t = 10,000$ における流線である。二成分の存在比の変化が少なかったのに対し流線は大きく変化しており、 $t = 8,500$ で見られた一つの大きな渦が複数の小さい渦に分解し、流れ場には複数の小さな渦が形成されるという結果が得られた。



⊗ 3.17: Existence Ratio ($t = 10,000$)



⊗ 3.18: Streamlines ($t = 10,000$)

- ・ 定常状態 ($t = 30,000$)

図 3.19 は $t = 30,000$ における二成分の存在比である。 $t = 10,000$ までに見られた境界相形状は殆ど見られず、密度比の大きい成分 r が鉛直方向に非一様に分布している。これは重力と分子拡散の影響によるものと考えられる。尚、二成分総和時の温度分布は全てのタイムステップで、ほぼ等温 ($T = 0.5$) となっていることが確かめられた。

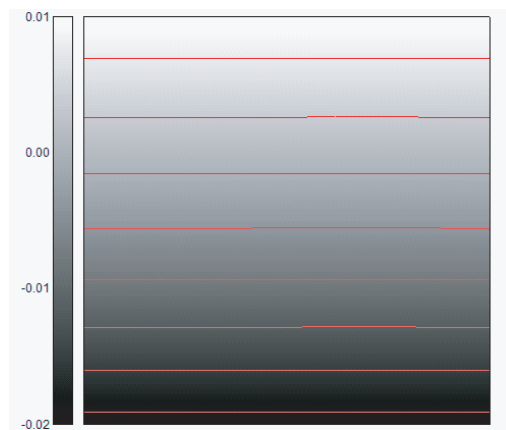


図 3.19: Existence Ratio ($t = 30,000$)

・定常状態における鉛直方向の二成分の存在比変化

定常状態における $x = 99$ での鉛直方向の二成分の存在比を図 3.20 に示す。図 3.20 において縦軸は垂直座標、横軸は二成分の存在比を示した図である。尚、実線は $\alpha_r = 11.0$ 、破線は $\alpha_r = 1.8$ 、一点鎖線は無重力の時の二成分の存在比である。図 3.20 において無重力状態（一点鎖線）では密度比の大きい成分は一様に拡散し、重力下においては二成分の密度比が大きくなるにつれ鉛直方向における二成分の存在比の差が大きくなっている。これは表面張力を考慮しない場合、密度比の大きい成分の分子拡散が重力により妨げられたために生じたと考えられる。

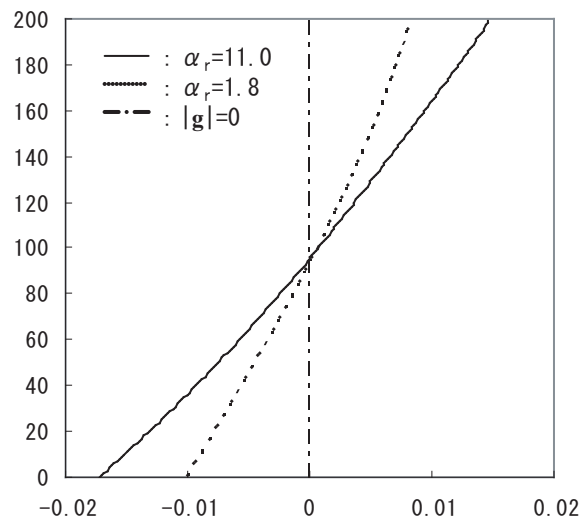


図 3.20: Computing of Existence ratio as a function of y

以上より、初期状態において二成分の完全分離が扱えること、および局所的な完全混合を扱えることが確認できた。

3.8 まとめ

多成分拡張法は、LB モデルに依存せず適用が可能であり多成分流体解析モデルの構築が可能である。本節では本拡張法における各成分の相互作用の際に衝突前後で各成分の質量保存が成立することを示した。また、各成分の動粘性係数（単一緩和係数）が等しい場合、各成分の総和時において衝突前後で運動量保存及びエネルギー保存が成立することを示した。但し、多成分流体の各成分の動粘性係数がそれぞれ異なっても運動量保存及びエネルギー保存が成立するには、多成分拡張法の改良が必要である。非熱流体 LB モデル及び多成分拡張法を適用した拡張二成分非熱流体 LB モデルを用いたキャビティ流れによる比較検証において、拡張二成分非熱流体モデルの二成分を拡張前の一成分非熱流体モデルの成分と同等にした場合、両モデルの解析結果は同じであることが確かめられた。同様に、熱流体 LB モデル及び多成分拡張法を適用した拡張二成分熱流体 LB モデルを用いたサーマルクエット流れによる比較検証では、拡張二成分熱流体モデルの二成分を拡張前の一成分熱流体モデルの成分と同等にした場合、両モデルの解析結果は同じであることが確認できた。また、分子拡散速度の検証では妥当な結果が得られることが確認できた。これらの解析及び検証より本拡張法の有効性が確かめられた。また、二成分に仮想的な密度比を設けた重力下における相反転の解析では、初期状態における二成分の完全分離および局所的な完全混合状態を扱えることが確認できた。尚、多成分拡張法を実問題に応用する場合、各成分が同じ動粘性係数（熱拡散係数）を持ち、表面張力が無視できる流体解析（例えば、貯水タンク内における新しい水と古い水の循環解析など）に限定して用いるのが望ましいと考えられる¹¹。以上より、動粘性係数（熱拡散係数）が等しい¹²混和混相流体解析において、多成分拡張法は有効な手法であると結論付けられる。

¹¹対象となる問題によって各物理量保存が成立しない影響の大きさが変化するため、一般的な適用限界を示すことは難しいと考えられる。

¹²但し、各相に密度差を与えることは可能である。

第 4 章

格子ボルツマン法の混合多成分拡張

本章では多成分拡張法の物性値の制限を解消した「混合多成分拡張」を示す。混合多成分拡張は粒子衝突時に異成分との相互作用を考慮する手法である。また、多成分拡張法と異なり、流れ場が非平衡状態である（もしくは流れ場の非定常性が強い）場合、成分毎の平衡状態における物理量は成分毎に異なる値を取るのが特徴である。

4.1 混合多成分拡張の概要

「多成分拡張法」では、各成分が異なる物性値を持つ場合に流れ場の各物理量保存が成立しない。このため、「多成分拡張法」では各成分が同じ物性値を持たなければならないという制限が存在する。本章で示す「混合多成分拡張」は、「各成分の単一緩和係数が等しければ各物理量が保存する」という LBM の特性に注目し、「多成分拡張法」の成分間相互作用モデルの改良を行った。

「混合多成分拡張法」の成分間相互作用では、「各成分が混合した流体は、各成分の物性値の平均値¹を持つ」と仮定しモデル化を行った。次節以降で成分間相互作用のモデル化の詳細を示す。

¹実際には各成分の密度比の重み付き平均である。

4.2 混合多成分拡張

混合多成分拡張 (Mixture Multi-component Extension, 以降 MME と略す) は任意の一成分 LB モデルから多成分 LB モデルを導くことが可能である。尚, 非熱流体 LB モデルに MME を適用する場合にはエネルギーに関する式を無視すれば良い。MME では成分毎に格子ボルツマン方程式 (LBE) を用いる。また, MME では平衡分布に成分間の相互作用を考慮したものをを用いる。成分 m の LBE は式 (4.1) となる。通常の LBE とは異なり, 平衡分布を相互作用を考慮した平衡分布に置き換える。尚, m は成分の種類を表すインデックスである。

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

ここで, Δt はタイムステップ, τ_m は成分 m の単一緩和係数, $f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t)$ は各成分の位置 \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 (添字 σ は速さ, i は方向を表す)。 $i f_{m\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)$ は成分 m の相互作用を考慮した平衡分布関数を表す。これらの粒子分布と局所物理量の関係式は式 (4.2),(4.3),(4.4) で対応付けられる。

$$\rho_m(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) \quad (4.2)$$

$$\rho_m(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t) = \sum_{\sigma, i} f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i} \quad (4.3)$$

$$\rho_m(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \right] = \sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i}^2 \quad (4.4)$$

$$(\rho_m(\mathbf{r}, t) = 0 \text{ の場合は } |\mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t)| = 0, \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) = 0 \text{ とする})$$

ここで, $\rho_m(\mathbf{r}, t)$ は位置 \mathbf{r} , 時刻 t における成分 m の局所密度, $\mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t)$ は同位置, 同時刻における成分 m の局所流速, $\varepsilon_m(\mathbf{r}, t)$ は同位置, 同時刻の成分 m の局所内部エネルギーを表す。尚, 0 割りを防ぐため, $\rho_m(\mathbf{r}, t) = 0$ の場合は式 (4.3), (4.4) を計算せずに $|\mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t)| = 0, \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) = 0$ とする。また, 局所総和物理量は式 (4.5) ~ (4.7) から求める。

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_m \sum_{\sigma, i} f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) \quad (4.5)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_m \sum_{\sigma, i} f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t)\mathbf{e}_{\sigma i} \quad (4.6)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t) \right] = \sum_m \sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i}^2 \quad (4.7)$$

$\rho(\mathbf{r}, t)$ は位置 \mathbf{r} , 時刻 t における局所密度, $\mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t)$ は同位置, 同時刻における局所流速, $\varepsilon_m(\mathbf{r}, t)$ は同位置, 同時刻の局所内部エネルギーを表す.

次に, 多成分の相互作用を考慮した平衡分布の導出法を示す. 簡単のため, 各成分の相互作用中は各成分の密度は変化しないと仮定した. 同成分間および異成分間の粒子相互作用を考慮する際, 各成分の平衡状態への緩和は各成分の単一緩和係数の平均値によって進行すると仮定する. 即ち, 混合流体の物性値は各成分の物性値の平均値を持つと仮定する. まず, 各成分の平衡状態の物理量を式 (4.8) と (4.9) から求める.

$$\mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t) + \frac{\tau_m}{\bar{\tau}(\mathbf{r}, t)} [\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) - \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t)] \quad (4.8)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_m^{eq}(\mathbf{r}, t) &= \left(1 - \frac{\tau_m}{\bar{\tau}(\mathbf{r}, t)} \right) \left[\frac{1}{2} \mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t) + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \right] \\ &+ \frac{\tau_m}{\bar{\tau}(\mathbf{r}, t)} \left[\frac{1}{2} \mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t) + \varepsilon(\mathbf{r}, t) \right] - \frac{1}{2} \mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t)^2 \end{aligned} \quad (4.9)$$

ここで, $\mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t)$ は相互作用を考慮した成分 m の局所流速, $\varepsilon_m^{eq}(\mathbf{r}, t)$ は相互作用を考慮した成分 m の局所内部エネルギーを表す. τ_m は成分 m の単一緩和係数, $\bar{\tau}(\mathbf{r}, t)$ は位置 \mathbf{r} , 時刻 t における各成分の単一緩和係数の密度比による重み付き平均である. 即ち, 式 (4.10) となる.

$$\bar{\tau}(\mathbf{r}, t) = \sum_m \frac{\tau_m \rho_m(\mathbf{r}, t)}{\rho(\mathbf{r}, t)} \quad (4.10)$$

LBM では一般的に, 平衡分布は平衡分布関数から算出される. 従って, 各成分の相互作用を考慮した $f_{m\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)$ は, 式 (4.2) ~ (4.10) から求めた成分毎の物理量を用いて平衡分布関数から算出する. 以上により, 各成分の相互作用を考慮した平衡分布の算出, および多成分流体への拡張が行えた.

4.3 各物理量の保存

本節ではMMEが各物理量を保存することを示す。簡単のため、二成分流体へ拡張する場合を扱う。また、物理量保存を議論するために並進過程は考慮せず衝突過程のみを考慮した。尚、成分の種類インデックスをそれぞれ r, b とした。

4.3.1 質量保存

簡単のため、各成分の相互作用中に各成分の密度は保存されると仮定した。従って、成分 r, b の密度は次の方程式を満たす。

$$\begin{cases} \rho_r(\mathbf{r}, t) = \rho_r(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \rho_r^{eq}(\mathbf{r}, t) \\ \rho_b(\mathbf{r}, t) = \rho_b(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \rho_b^{eq}(\mathbf{r}, t) \end{cases} \quad (4.11)$$

$\rho_r(\mathbf{r}, t), \rho_b(\mathbf{r}, t)$ は現在の成分 r, b の局所密度、 $\rho_r(\mathbf{r}, t + \Delta t), \rho_b(\mathbf{r}, t + \Delta t)$ は次タイムステップの成分 r, b の局所密度、 $\rho_r^{eq}(\mathbf{r}, t), \rho_b^{eq}(\mathbf{r}, t)$ は平衡状態の成分 r, b の局所密度を表す。以上より各成分の密度および総和密度が保存されていることは明らかである。

4.3.2 運動量保存

次に、総和運動量が保存することを示す。各成分の運動量は異成分と運動量を交換するために、各成分の運動量保存は成立しないが、総和運動量では運動量保存が成立する必要がある。式(4.1)の両辺に $\mathbf{e}_{\sigma i}$ を掛け、 σ, i について総和を取り、並進過程を無視すると式(4.12)が導かれる。

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma, i} f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{e}_{\sigma i} - \sum_{\sigma, i} f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i} \\ &= -\frac{1}{\tau_m} \left[\sum_{\sigma, i} f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i} - \sum_{\sigma, i} i f_{m\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i} \right] \end{aligned} \quad (4.12)$$

式(4.2),(4.3),(4.4)を代入し、 $m = r$ とすると成分 r の運動量保存の式(4.13)が導かれる。

$$\begin{aligned}\rho_r(\mathbf{r}, t + \Delta t)\mathbf{u}_r(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \left(1 - \frac{1}{\tau_r}\right) \rho_r(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}_r(\mathbf{r}, t) \\ &\quad + \frac{1}{\tau_r}\rho_r^{eq}(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}_r^{eq}(\mathbf{r}, t)\end{aligned}\quad (4.13)$$

同様な手法で成分 b の運動量保存の式 (4.14) を導くと,

$$\begin{aligned}\rho_b(\mathbf{r}, t + \Delta t)\mathbf{u}_b(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \left(1 - \frac{1}{\tau_b}\right) \rho_b(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}_b(\mathbf{r}, t) \\ &\quad + \frac{1}{\tau_b}\rho_b^{eq}(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}_b^{eq}(\mathbf{r}, t)\end{aligned}\quad (4.14)$$

ここで, $\mathbf{u}_r(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{u}_b(\mathbf{r}, t)$ は成分 r, b の現在の局所流速, $\mathbf{u}_r(\mathbf{r}, t + \Delta t)$, $\mathbf{u}_b(\mathbf{r}, t + \Delta t)$ は次タイムステップの局所流速, $\mathbf{u}_r^{eq}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{u}_b^{eq}(\mathbf{r}, t)$ は平衡状態における局所流速を表す. 式 (4.13) と (4.14) の和を取り, 式 (4.8) および (4.11) を代入すると総和運動量の関係式 (4.15) が得られる.

$$\begin{aligned}&\rho_r(\mathbf{r}, t + \Delta t)\mathbf{u}_r(\mathbf{r}, t + \Delta t) + \rho_b(\mathbf{r}, t + \Delta t)\mathbf{u}_b(\mathbf{r}, t + \Delta t) \\ &= \rho_r(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}_r(\mathbf{r}, t) + \rho_b(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}_b(\mathbf{r}, t) \\ &\quad - \frac{1}{\bar{\tau}(\mathbf{r}, t)} [\rho_r(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}_r(\mathbf{r}, t) + \rho_b(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}_b(\mathbf{r}, t)] \\ &\quad + \frac{1}{\bar{\tau}(\mathbf{r}, t)} \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) [\rho_r(\mathbf{r}, t) + \rho_b(\mathbf{r}, t)]\end{aligned}\quad (4.15)$$

式 (4.2), (4.3), (4.5) および (4.6) を代入すると, 総和運動量保存式 (4.16) が得られる.

$$\begin{aligned}&\rho_r(\mathbf{r}, t + \Delta t)\mathbf{u}_r(\mathbf{r}, t + \Delta t) + \rho_b(\mathbf{r}, t + \Delta t)\mathbf{u}_b(\mathbf{r}, t + \Delta t) \\ &= \rho_r(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}_r(\mathbf{r}, t) + \rho_b(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}_b(\mathbf{r}, t)\end{aligned}\quad (4.16)$$

以上より, MME は一タイムステップ間で総和運動量保存を満たすことが確認できた.

4.3.3 エネルギー保存

運動量保存と同様に, 各成分のエネルギーは異成分とのエネルギー交換により成分毎のエネルギー保存は成立しないが, 総和エネルギーは保存する必要がある. 本

項では総和エネルギーが保存することを示す. 式 (4.1) の両辺に $e_{\sigma i}^2/2$ を掛け, σ, i について総和を取り, 並進過程を無視すると式 (4.17) が得られる.

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{e}_{\sigma i}^2 - \sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i}^2 \\ &= -\frac{1}{\tau_m} \left[\sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i}^2 - \sum_{\sigma, i} \frac{1}{2} i f_{m\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i}^2 \right] \end{aligned} \quad (4.17)$$

式 (4.2), (4.3) および (4.4) を代入し, $m = r$ と置くと成分 r のエネルギー保存の関係式 (4.18) が導かれる.

$$\begin{aligned} & \rho_r(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_r(\mathbf{r}, t + \Delta t)^2}{2} + \varepsilon_r(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \\ &= \left(1 - \frac{1}{\tau_r} \right) \left[\frac{\mathbf{u}_r^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon_r(\mathbf{r}, t) \right] \rho_r(\mathbf{r}, t) \\ &+ \frac{1}{\tau_r} \left[\frac{\mathbf{u}_r^{eq}(\mathbf{r}, t)^2}{2} + \varepsilon_r^{eq}(\mathbf{r}, t) \right] \rho_r^{eq}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (4.18)$$

同様な手法で成分 b のエネルギー保存の関係式 (4.19) が得られる.

$$\begin{aligned} & \rho_b(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_b(\mathbf{r}, t + \Delta t)^2}{2} + \varepsilon_b(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \\ &= \left(1 - \frac{1}{\tau_b} \right) \left[\frac{\mathbf{u}_b^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon_b(\mathbf{r}, t) \right] \rho_b(\mathbf{r}, t) \\ &+ \frac{1}{\tau_b} \left[\frac{\mathbf{u}_b^{eq}(\mathbf{r}, t)^2}{2} + \varepsilon_b^{eq}(\mathbf{r}, t) \right] \rho_b^{eq}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (4.19)$$

ここで, $\varepsilon_r(\mathbf{r}, t), \varepsilon_b(\mathbf{r}, t)$ は成分 r, b の現在の局所内部エネルギー, $\varepsilon_r(\mathbf{r}, t + \Delta t), \varepsilon_b(\mathbf{r}, t + \Delta t)$ は次タイムステップの局所内部エネルギー, $\varepsilon_r^{eq}(\mathbf{r}, t), \varepsilon_b^{eq}(\mathbf{r}, t)$ は平衡状態における局所内部エネルギーを表す. 式 (4.18) と (4.19) の和を取り, 式 (4.2) ~ (4.7), (4.9) および (4.11) を代入すると, 総和熱運動エネルギー保存の式 (4.20) が導かれる.

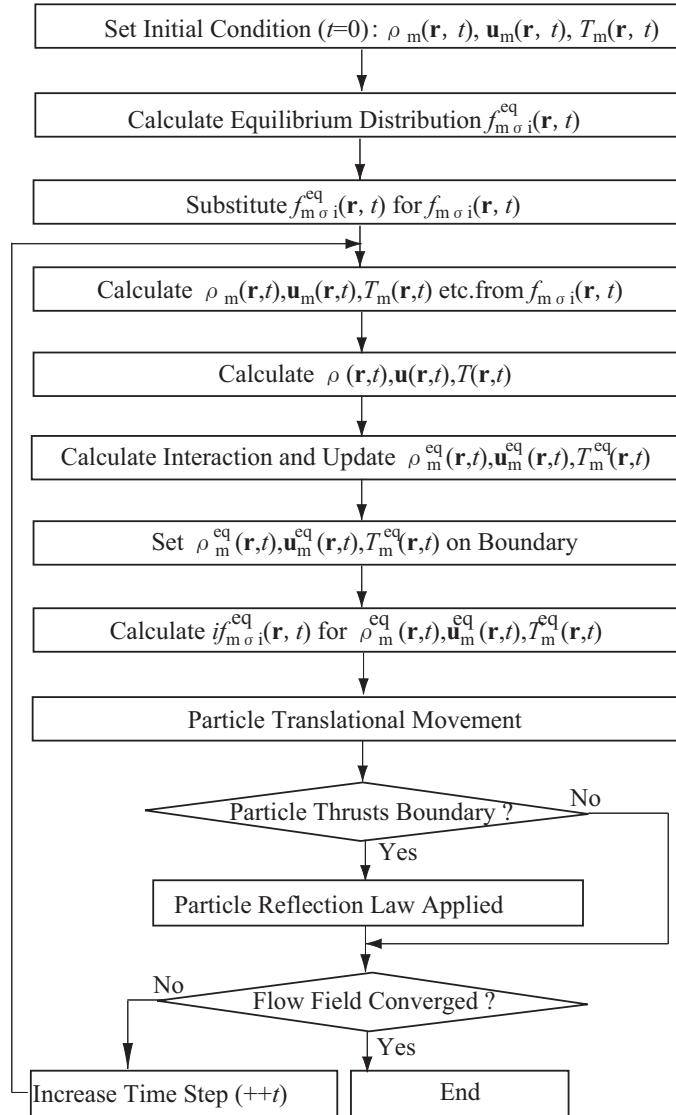
$$\begin{aligned} & \rho_r(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_r(\mathbf{r}, t + \Delta t)^2}{2} + \varepsilon_r(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] + \rho_b(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_b(\mathbf{r}, t + \Delta t)^2}{2} + \varepsilon_b(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \\ &= \rho_r(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_r(\mathbf{r}, t)^2}{2} + \varepsilon_r(\mathbf{r}, t) \right] + \rho_b(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_b(\mathbf{r}, t)^2}{2} + \varepsilon_b(\mathbf{r}, t) \right] \end{aligned} \quad (4.20)$$

上式より, MME は一タイムステップ間で総和熱運動エネルギー保存を満たすことが確認できた. 以上より, MME は相互作用時に各物理量の保存を満たすことが確認できた.

4.4 混合多成分拡張のアルゴリズム

本節では混合多成分拡張のアルゴリズムを図 4.1 のフローチャートを用いて概説する。

- 1: 各成分の初期物理量設定 初期状態における各成分の巨視的な物理量を指定する。
- 2: 各成分の平衡分布算出 初期物理量および平衡分布関数を用い, 各成分の平衡分布を求める。
- 3: 各成分の初期粒子分布設定 2 で求めた平衡分布を初期状態の粒子分布とする。
- 4: 各成分の巨視的物理量の算出 各成分の粒子分布から巨視的物理量を求める。
- 5: 混合流体としての巨視的物理量の算出 各成分の粒子分布を総和し, 混合流体としての巨視的物理量を求める。
- 6: 成分間相互作用の計算 4, 5 で求めた物理量を基に成分間の相互作用を計算し, 各成分の巨視的物理量を更新 (上書き) する。
- 7: 巨視的な境界条件 各成分の境界上の巨視的物理量を指定した物理量で上書きを行う。
- 8: 成分毎の平衡分布の計算 6, 7 の巨視的物理量を用い平衡分布関数を計算することで各成分の平衡分布を求める。
- 9: 成分毎の粒子並進移動 (粒子追跡) 成分毎に各成分の LBE に従い, 粒子を移動させる。
- 10: 粒子位置の確認 計算領域外もしくは壁面を通過する粒子を判別する。粒子が壁面などを通過する場合, 「粒子反射則または周期境界条件」を適用する。
- 11: 流れ場の収束判定 流れ場が収束していない場合は, 「4: 巨視的物理量の算出」の部分に戻り, 流れ場が収束した場合は計算を終了する。尚, 非定常性の強い問題の場合は予め指定した反復回数で計算を終了させる必要がある。



⊗ 4.1: Flow chart of MME

4.5 数値解による検証

本節では MME の妥当性検証を数値解を用いて行った。多成分流体を構成している各成分の存在比が等しい場合、混合流体としての物性値は各成分の算術平均値を持つと考えられる。この時、多成分流体は平均物性値を持つ一成分流体と同じ振る舞いをする必要がある。簡単のため、本節では MME を適用した二成分流体モデルによる検証を行った。また、境界条件は一成分のみに適用（駆動力を片方の成分にのみ考慮）し、運動量および熱運動エネルギーが異成分へ正しく伝播するかを検証した²。尚、二成分流体の各成分のインデックスをそれぞれ r, b とした。

4.5.1 キャビティ流れ

3.6.1 節で示したキャビティ流れ問題を用いて検証を行った。上壁において一方の成分 r に流速 U を与え、もう一方の成分 b は滑り壁とした。尚、単一緩和係数が異なる二成分流体のシュミット数 Sc [16] は式 (4.21) となる。

$$Sc = \frac{2\tau_r - 1}{2\tau_b - 1} \quad (4.21)$$

詳細な解析条件を表 4.1 に示す。粒子反射条件として上壁に滑りあり条件、その他の壁に滑りなし (Bounce-back) 条件を与えた。また、境界上の格子点にディリクレ条件 (巨視的物理量) を与えた。表 4.1 の 2 列目は元の 2D9V モデルに対する解析条件で、3 列目は MME による二成分 2D9V モデルに対する解析条件である。二成分 2D9V モデルでは片方の成分 r にのみ境界条件を与えている。尚、解析に用いた物理量は全て無次元数である。

図 4.2 に定常状態におけるキャビティ中心における流速分布を示す。実線は元の 2D9V モデルによる流速、 \square は MME を用いた二成分 2D9V モデルによる流速を表す。また、比較として FLUENT 社の有限体積法ソルバー FLUENT6.1 の二次風上差分による流速を + で示した。尚、縦軸の曲線は $x = 64$ における水平方向の流速、

²時間変動の無い流れ場が定常状態に達した時、各成分は流れ場の平均流速 (平均温度) を持つため二成分は同じ運動をするはずである。但し、各成分の慣性力と比較して粘性力が小さいと仮定する。

表 4.1: Details of cavity flow (MME)

	1Comp (Original)	2Comp (MME)
Single relaxation time	0.788	$r:0.688, b:0.888$
Local density(Entire domain)	1.00	$r:0.500, b:0.500$
Moving wall	0.300	$r:0.300, b:free$
Fixed wall	0.000	$r:0.000, b:free$

横軸の曲線は $y = 64$ における鉛直方向の流速を表す。尚、流速は 0.3、空間は 64 で規格化を行い中心座標を 0 とした。

図 4.2 より MME により導いた二成分 2D9V モデルは元の 2D9V モデルの結果と良く一致していることが分かる。計算領域全体における密度および流速の比較では、二成分 2D9V モデルは元の 2D9V モデルと同じ結果が得られることが確認できた。また、二成分の存在比は計算領域全体で 1:1 となっていることが確認できた。また、LBM は有限体積法による結果と良く一致することも確かめられた。また、定常状態に達するまでの一成分モデルと二成分モデルの結果は一致していることから、MME は非定常流れに対しても有効であると考えられる。以上より、MME は非熱流体モデルにおいて妥当な結果が得られる有効な拡張法であることが確かめられた。

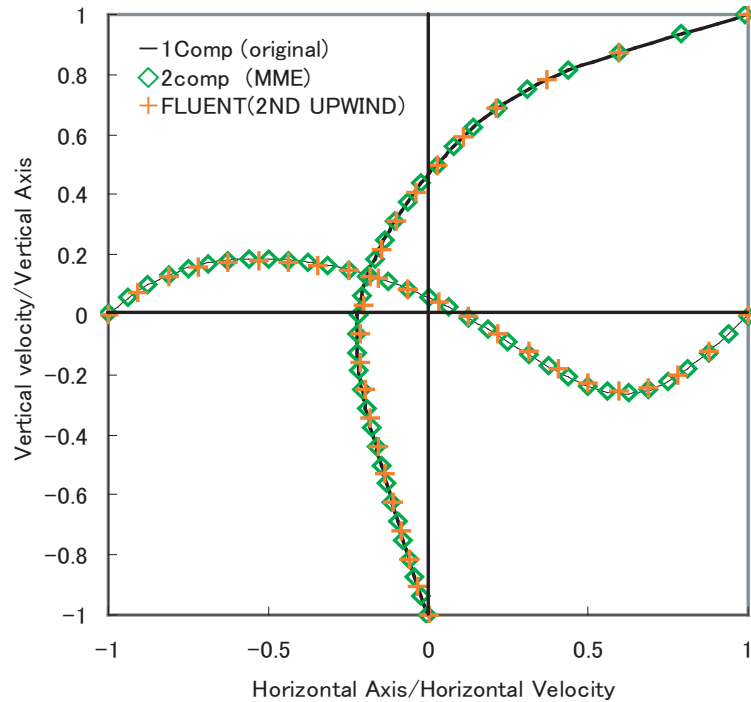


図 4.2: Velocity at cavity center (Re=400)

4.5.2 サーマルクエット流れ

3.6.2 節のサーマルクエット流れ問題を用い, 熱を考慮した場合の MME の検証を行った. また, 熱流体 LBM モデルとして 3.6.2 節で示した 葛原らによる 2D21V モデルを用いた. その他の解析条件は表 4.2 のように置いた. 二成分 2D21V モデルでは相互作用の検証のため, 片方の成分 r にのみ境界条件 (ディリクレ条件) を与えた. また, 定積比熱 $C_v = 1$ とし, 局所温度 $T(\mathbf{r}, t)$ を $T(\mathbf{r}, t) = \varepsilon(\mathbf{r}, t)/C_v = \varepsilon(\mathbf{r}, t)$ とした. 尚, 各物理量は全て無次元数である.

図 4.3 は定常状態において $x = 64$ における水平方向流速をプロットしたものである. 横軸は水平方向の流速, 縦軸は垂直座標を示す. 実線は拡張前の 2D21V モデルの流速, は MME を用いた二成分 2D21V の流速を表す. 図 4.3 より二つのモデルの流速はよく一致していることが分かる. また, 参考のため解析解を + として示した. LBM の水平方向流速は解析解と一致していることが確認できる. また, 図 4.4 は定常状態における $x = 64$ での温度分布である. 横軸は水平方向の温度, 縦軸は垂直座標を示す. 実線は拡張前の 2D21V モデルの温度, は MME を用いた二

表 4.2: Details of thermal Couette flow

	1Comp (Original)	2Comp (MME)
Single relaxation time	1.0	$r:0.90, b:1.1$
Local density(Entire domain)	0.10	$r:0.050, b:0.050$
Moving wall(Speed)	0.30	$r:0.30, b:free$
Moving wall(Static temperature)	0.52	$r:0.52, b:adiabatic$
Fixed wall(Speed)	0.00	$r:0.00, b:free$
Fixed wall(Static temperature)	0.48	$r:0.48, b:adiabatic$

成分 2D21V の温度である。温度分布に関しても二つのモデルはよく一致していることが分かる。また、二成分 2D21V モデルにおいて二成分の存在比は計算領域全体で 1:1 となっていることが確認できた。図 4.4 の + は解析解であり、LBM の温

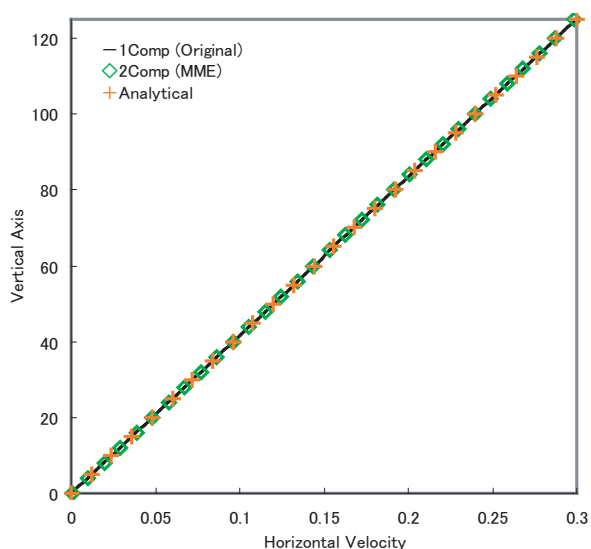
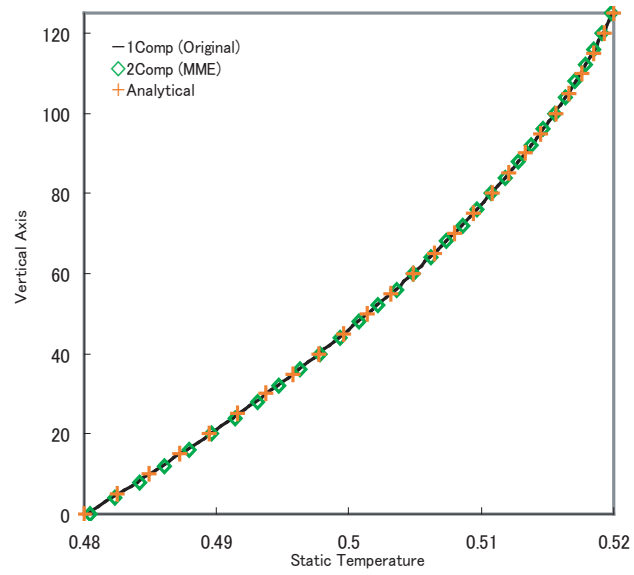


図 4.3: Horizontal velocity of thermal Couette flow (MME)

度分布は解析解と一致していることが確認できる。尚、定常状態に達するまでの一成分モデルと二成分モデルの結果は一致していることから、MME は非定常流れに対しても有効であると考えられる。以上より、MME は熱を考慮した LBM モデルにおいて有効であることが確かめられた。



⊗ 4.4: Static temperature of thermal Couette flow (MME)

4.6 重力下における二成分サーマルキャビティ流れ

4.5.2節のMMEを用いた二成分LBモデルを用い, 動粘性係数の異なる混和二成分流体のサーマルキャビティ流れ解析を行った. 図4.5に解析条件を示す. 格子点数は 100×100 とし, 上壁および下壁を断熱固定壁(滑りなし), 右壁を発熱固定壁(滑りなし), 左壁を冷却固定壁(滑りなし)とした. また, 初期状態では静止流体を仮定し, 図4.5のように二成分を完全分離状態に設定した. 尚, 二成分のインデックスを r, b とした.

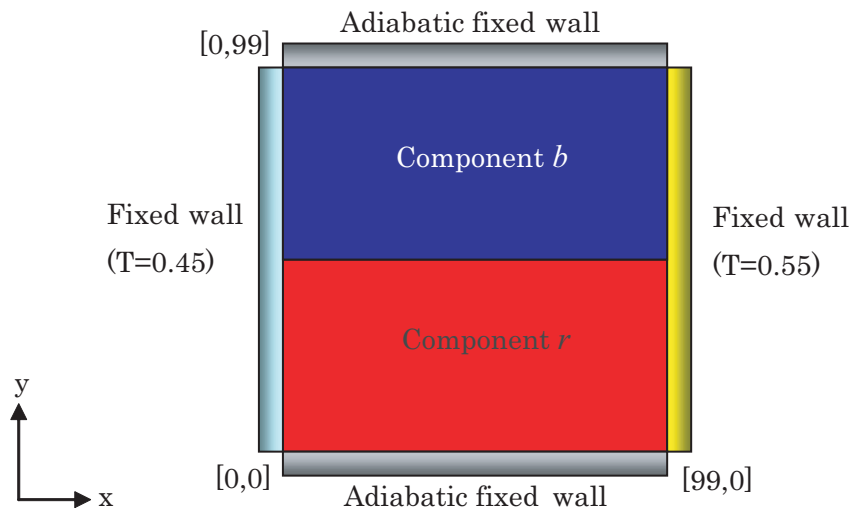


図 4.5: Problem specification of mixing phases

また, 重力と浮力の考慮にブジネスク近似を用い, David R.Nobleらによる仮想外力項をLBEの右辺に追加した. 成分 m の仮想外力項 $F_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t)$ は式(4.22)より導出される.

$$\sum_{\sigma i} F_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) \mathbf{e}_{\sigma i} = \beta_m [\bar{T} - T_m(\mathbf{r}, t)] \mathbf{g} \quad (4.22)$$

ここで, β_m は成分 m の体膨張率, \bar{T} は流れ場の代表温度, \mathbf{g} は重力加速度を表す. 仮想外力項を付加したLBEは式(4.23)となる.

$$f_{m\sigma i}(\mathbf{r} + \mathbf{e}_{\sigma i} \Delta t, t + \Delta t) - f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{\tau_m} [f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) - i f_{m\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t)] + F_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) \quad (4.23)$$

重力加速度は $-y$ 方向に 0.002 とした. その他の条件は表 4.3 を用いた. 尚, 各物理量は全て無次元数である.

表 4.3: Details of mixing phases

	Component r	Component b
Single relaxation time	1.0	1.1
Initial local density ($y = 49 \sim 99$)	0.00	0.10
Initial local density ($y = 0 \sim 48$)	0.10	0.00
Initial static temperature	0.50	0.50
Thermal expansion coefficient	2.5	2.5

4.6.1 解析結果

本項では初期状態からの流れ場の時間変化を示す. 尚, 二成分流体の存在比を示すため, 式 (4.24) を用いて可視化を行った.

$$ratio(\mathbf{r}, t) = \rho_r(\mathbf{r}, t) - \rho_b(\mathbf{r}, t) \quad (4.24)$$

・初期状態 ($t = 0$)

図 4.6 は二成分の存在比であり, 赤い領域は成分 r , 青い領域は成分 b を表す. 初期状態では二相は完全に分離をしている. 尚, 初期状態では流体は完全静止している.

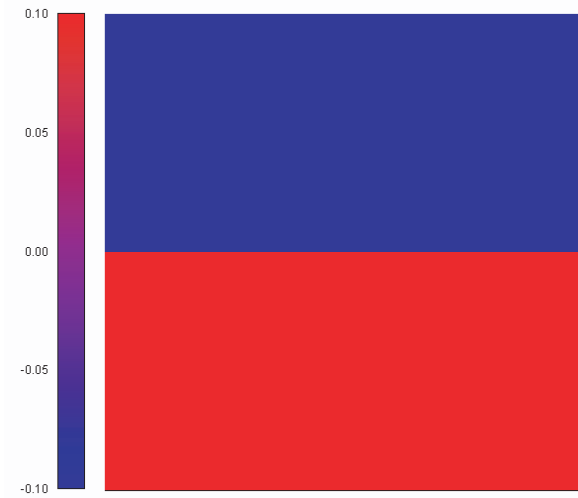


図 4.6: Initial state of two phases in 2D-cavity

・ 分子拡散による混合 ($t = 500$)

図 4.7 は $t = 500$ における二成分の存在比である。二成分の境界では分子拡散により混合が生じている。また、右壁の方が左壁より温度が高いため、分子拡散の影響が大きくなり、右壁付近の混合は左壁よりも僅かに早く進行している。

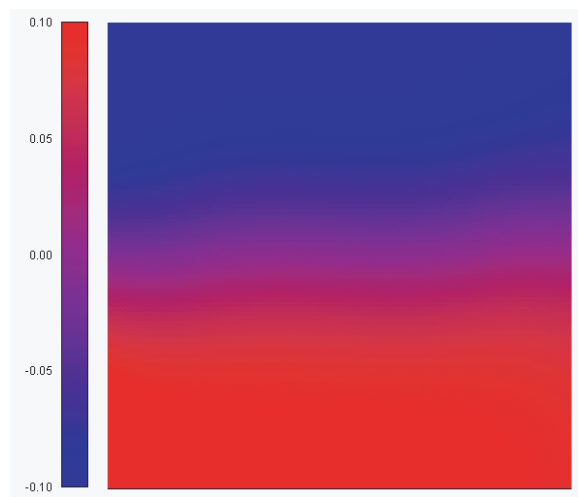


図 4.7: Mixing state of two phases by particle dispersion at $t = 500$

・対流による混合 ($t = 2,500$)

図 4.8 は $t = 2,500$ の流線である。尚、流速は各成分の流速の平均値を用いた。右壁面付近での上昇流と左壁面付近の下降流により、流れ場には大きな一つの渦が形成されている。図 4.9 はこの時の二成分の存在比である。成分 r の相は右壁で加熱され上昇しており、成分 b の相は左壁で冷却され下降している。二相は流れ場の対流により、右上と左下付近で混合が促進されていることが分かる。

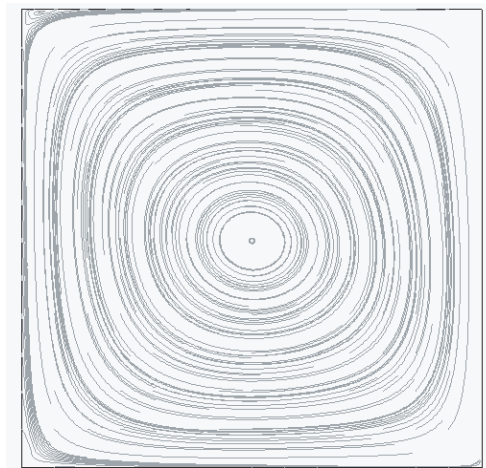


図 4.8: Streamlines of averaged velocity at $t = 2,500$

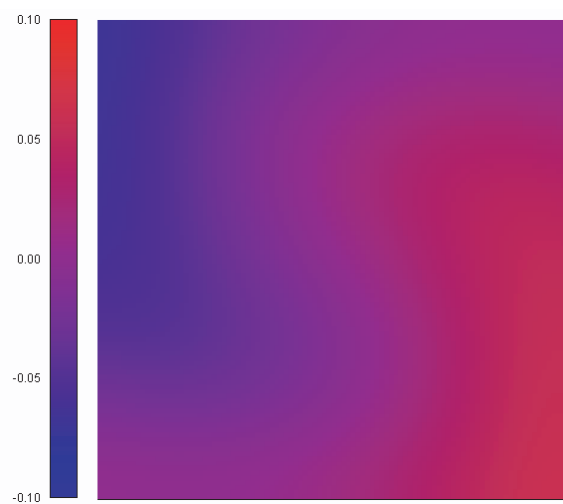


図 4.9: Mixing of two phases caused from convection at $t = 2,500$

- ・ 定常状態 ($t = 10,000$)

図 4.10 は定常状態における二成分の存在比であり, 二相は完全混合していることが確認できる. 混和二相流体の場合, 定常状態では二相は完全に混合すると考えられる. 従って, MME は定性的に妥当であることが確認できた.

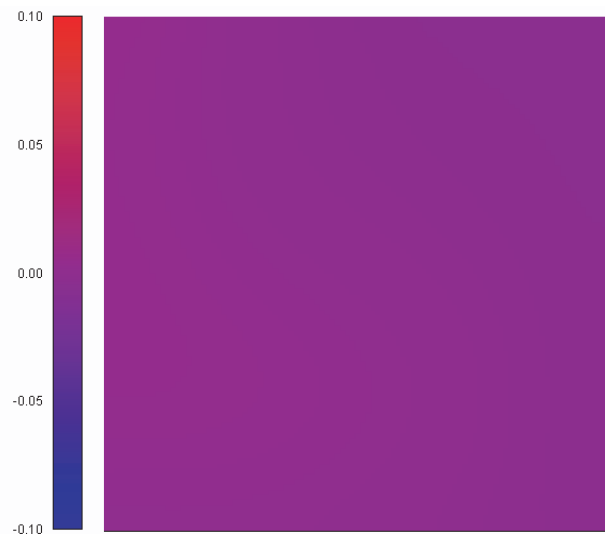


図 4.10: The steady mixing state of two phases at $t = 10,000$

4.7 まとめ

本節では各成分の単一緩和係数 (物性値) が異なる多成分流体において各物理量の保存を正しく考慮可能な混合多成分拡張 (Mixture Multi-component Extension) を提案した。また, MME は 1 タイムステップ間で質量保存, 運動量保存およびエネルギー保存が成立することを示し, 二成分に拡張した非熱流体 LB モデルおよび熱流体 LB モデルの数値解析からも妥当な結果が得られることが確認できた。但し, 完全混合状態では各成分の物性値 (単一緩和係数) は各成分の平均値となるため, 成分毎の詳細な運動状態を厳密に解析することは難しい。混合状態に依存せず, 各成分の運動状態を詳細に解析できるよう MME を改良するのが今後の課題である。しかしながら, MME は混合流体としての正しい解析が行えると考えられる。二成分サーマルキャビティ流れ解析では従来手法では扱いが難しい分子拡散が扱えることが確認できた。また, 温度差による分子拡散の大きさの違い, および対流による混合が生じることから, MME は混和多成分流体解析において有効な解析手法であると考えられる。尚, MME を実問題に応用する場合は, 表面張力を無視でき, 各相の物性値の差異が小さい³問題 (例えば, 塩水楔解析など) に限定して用いるのが望ましいと考えられる。以上より, MME は一成分 LB モデルから容易に多成分 LB モデルを導く有用な手法であると考えられる。

³各相の物性値が大きく異なる場合, 各相の混合領域では平均物性値でしか解析を行えない。

第 5 章

格子ボルツマン法の多成分相互作用 拡張

本章では異成分と混合している状態でも各成分の詳細な運動状態を解析可能な多成分相互作用拡張を示す。この拡張法は、仮の次タイムステップ物理量を用いて各物理量保存を考慮するのが特徴である¹。多成分相互作用拡張の概要、解析的な証明、数値解による検証、および解析例を示す。

5.1 多成分相互作用拡張の概要

「混合多成分拡張」では各成分が異なる物性値を持つことが可能である。しかし、各成分の混合領域では平均化された物性値で解析が行われるため、各成分の物性値が大きく異なる場合に各成分の詳細な流れ場解析を行うことが難しい。

そこで、「混合多成分拡張」の成分間相互作用のモデルに更に改良を加え、各成分が混合している領域でも各成分の物性値を保つことが可能な「多成分相互作用拡張」を提案した。「多成分相互作用拡張」の成分間相互作用は、まず、平衡状態で各成分は流れ場の平均流速および平均温度を持つと仮定し、仮の次タイムステップの物理量を求める。次に、流れ場の物理量保存が成立するように次タイムステップの物理量を補正することによりモデル化を行っている。また、「各成分の中で最も緩和が遅い成分が成分間相互作用を支配する」、「物理量の補正量は局所密度が

¹予測子・修正子法の考え方と類似している。

大きい成分程大きい」, 「物理量の補正量は単一緩和係数が大きい成分程大きい」と仮定し物理量の補正を行うのが特徴である。「多成分相互作用拡張」の成分間相互作用の詳細を次節以降に示す。

5.2 多成分相互作用拡張

多成分相互作用拡張 (Multi-component Interaction eXtension, 以降 MIX と略す) は成分毎に LBE を解くことにより多成分流体解析を行う。一タイムステップ間の各物理量保存を議論するために, MIX では LBE の並進過程を無視して議論を進める。尚, 成分 m の並進過程を考慮しない LBE は式 (5.1) となる。

$$f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{1}{\tau_m}\right) f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\tau_m} f_{m\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (5.1)$$

5.2.1 質量

MIX では各成分との相互作用中の質量変化を考慮しない。従って, LBE における並進過程を考慮しない場合, 成分 m の質量は定数となる。

$$\rho_m(\mathbf{r}, t) = const. \quad (5.2)$$

また, 式 (5.2) を m について総和を取ると総和質量となる。各成分の質量は定数なので総和質量も定数となる。

$$\sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) = const. \quad (5.3)$$

従って, 並進過程を考慮しない場合, 以下の二式が成立する。

$$\rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) = \rho_m(\mathbf{r}, t) = \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \quad (5.4)$$

$$\rho^{eq}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \quad (5.5)$$

以上により, 各成分の平衡状態の密度が算出できた。

5.2.2 運動量

一タイムステップ間で総和運動量が保存すると仮定すると、式 (5.6) が成立する。

$$\rho(\mathbf{r}, t + \Delta t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \rho^{eq}(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (5.6)$$

ここで、 $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_m \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{u}^{eq}(\mathbf{r}, t) = \sum_m \mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \sum_m \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)$ である。平衡状態では各成分が同じ流速を持つと仮定し、並進過程を考慮しない LBE より成分 m の仮の次タイムステップ運動量は式 (5.7) になる。

$$\begin{aligned} \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)|_{tmp} &= \left(1 - \frac{1}{\tau_m}\right) \rho_m(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t) \\ &\quad + \frac{1}{\tau_m} \rho_m(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (5.7)$$

式 (5.7) の左辺を m について総和を取ると、仮の次タイムステップ総和運動量の式が得られる。

$$\rho(\mathbf{r}, t + \Delta t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t + \Delta t)|_{tmp} = \sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)\mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)|_{tmp} \quad (5.8)$$

仮の次タイムステップでの総和運動量と現在の総和運動量の差分が、一タイムステップ間の総和運動量保存を満たすための補正量 $\Delta\text{momentum}(\mathbf{r}, t)$ となる。従って、

$$\Delta\text{momentum}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t + \Delta t)|_{tmp} - \rho(\mathbf{r}, t)\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \quad (5.9)$$

この $\Delta\text{momentum}(\mathbf{r}, t)$ を各成分の単一緩和係数、および密度比²に応じて分配することにより補正を行う。補正を行った成分 m の次タイムステップ運動量は以下の式となる。尚、 τ_{max} は各成分の中で最大の単一緩和係数 τ_m を表す³。

$$\begin{aligned} \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)\mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)\mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)|_{tmp} \\ &\quad - \Delta\text{momentum}(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\rho_m(\mathbf{r}, t)(\tau_{max} - \tau_m)}{\sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t)(\tau_{max} - \tau_m)} \right) \end{aligned} \quad (5.10)$$

尚、一タイムステップ間の運動量変化 $\Delta\rho_m\mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t)$ を考慮する場合、成分 m の次タイムステップ運動量は

² τ_m は時間および空間の関数であっても良い。即ち $\tau_m(\mathbf{r}, t)$ でも MIX を適用可能である。

³最大の単一緩和係数を持つ成分は幾つであっても良い。

$$\begin{aligned} \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)|_{tmp} + \Delta \rho_m \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t) \\ &\quad - \Delta \mathbf{momentum}(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\rho_m(\mathbf{r}, t)(\tau_{max} - \tau_m)}{\sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t)(\tau_{max} - \tau_m)} \right) \end{aligned} \quad (5.11)$$

となる. この次タイムステップにおける式 (5.11) を満たすように平衡状態の運動量を LBE から求めると,

$$\rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t) = \tau_m \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) - (\tau_m - 1) \rho_m(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t)$$

式 (5.11) を代入すると, 式 (5.12) となる.

$$\rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t) = \tau_m \left\{ \begin{array}{l} \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)|_{tmp} + \Delta \rho_m \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t) \\ - \Delta \mathbf{momentum}(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\rho_m(\mathbf{r}, t)(\tau_{max} - \tau_m)}{\sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t)(\tau_{max} - \tau_m)} \right) \\ - (\tau_m - 1) \rho_m(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t) \end{array} \right\} \quad (5.12)$$

以上より, 総和運動量を保存し, 各成分の相互作用を考慮した平衡状態の運動量を求めることができた.

5.2.3 エネルギー

一タイムステップ間で総和エネルギーが保存すると仮定すると,

$$\begin{aligned} &\rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \\ &= \rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t) \right] = \rho^{eq}(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^{eq}(\mathbf{r}, t)^2}{2} + \varepsilon^{eq}(\mathbf{r}, t) \right] \end{aligned} \quad (5.13)$$

尚, $\varepsilon(\mathbf{r}, t) = \sum_m \varepsilon_m(\mathbf{r}, t)$, $\varepsilon^{eq}(\mathbf{r}, t) = \sum_m \varepsilon_m^{eq}(\mathbf{r}, t)$, $\varepsilon(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \sum_m \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)$ である.

次に, 平衡状態では各成分は同じ熱運動エネルギーを持つと仮定し, 並進過程を考慮しない LBE より仮の次タイムステップのエネルギーを求める. 成分 m のエネ

ルギーは以下の式となる。尚、流速は 5.2.2 節で求めた補正後の次タイムステップ流速を用いる⁴。

$$\begin{aligned} & \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \Big|_{tmp} = \\ & \left(1 - \frac{1}{\tau_m} \right) \rho_m(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \right] + \frac{1}{\tau_m} \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t)^2}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t) \right] \end{aligned} \quad (5.14)$$

式 (5.14) の左辺を m について総和を取ると、総和エネルギーの式 (5.15) が得られる。

$$\begin{aligned} & \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \Big|_{tmp} \\ & = \sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \right] \Big|_{tmp} \end{aligned} \quad (5.15)$$

仮の次タイムステップにおける総和エネルギー式 (5.15) と現在の総和エネルギー式 (5.13) の差分が、一タイムステップ間の総和エネルギー保存を満たすための補正量 $\Delta energy(\mathbf{r}, t)$ となる。

$$\begin{aligned} \Delta energy(\mathbf{r}, t) = & \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \Big|_{tmp} \\ & - \rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t) \right] \end{aligned} \quad (5.16)$$

この $\Delta energy(\mathbf{r}, t)$ を τ_m 、および各成分の密度比に応じて分配することで総和エネルギー保存を満たすように補正を行う。従って、補正後の成分 m の次タイムステップにおけるエネルギーは以下となる。

$$\begin{aligned} & \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \\ & = \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \Big|_{tmp} \\ & \quad - \Delta energy(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\rho_m(\mathbf{r}, t)(\tau_{max} - \tau_m)}{\sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t)(\tau_{max} - \tau_m)} \right) \end{aligned} \quad (5.17)$$

一タイムステップ間にエネルギーが $\Delta \varepsilon_m(\mathbf{r}, t)$ だけ変化する場合は、

⁴補正した流速 (運動量) を用いることで運動量保存とエネルギー保存両方を同時に考慮することができる。

$$\begin{aligned}
& \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \\
= & \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \Big|_{tmp} \\
- & \Delta energy(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\rho_m(\mathbf{r}, t)(\tau_{max} - \tau_m)}{\sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t)(\tau_{max} - \tau_m)} \right) + \Delta \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \quad (5.18)
\end{aligned}$$

となる. 式 (5.18) を満たすように LBE より成分 m の平衡状態におけるエネルギーを求めると,

$$\begin{aligned}
\rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t)^2}{2} + \varepsilon_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \right] &= \tau_m \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \\
&+ (\tau_m - 1) \rho_m(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \right] \quad (5.19)
\end{aligned}$$

式 (5.18) を代入すると, 以下の式となる.

$$\begin{aligned}
& \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t)^2}{2} + \varepsilon_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \right] \\
= & \tau_m \left\{ \begin{aligned} & \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \Big|_{tmp} \\ & - \Delta energy(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\rho_m(\mathbf{r}, t)(\tau_{max} - \tau_m)}{\sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t)(\tau_{max} - \tau_m)} \right) \\ & + \Delta \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \right\} \\
& + (\tau_m - 1) \rho_m(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \right]
\end{aligned}$$

以上より, 一タイムステップ間の総エネルギー保存を満たし, 各成分の相互作用を考慮可能な熱運動エネルギーを求めることができた.

5.3 各物理量の保存

本節では MIX において各物理量が保存することを示す. 尚, 各物理量の保存を議論するため, LBE における並進過程は考慮せず, 衝突過程のみを考慮する.

5.3.1 質量保存

式 (5.1) の両辺を σ, i について総和を取ると,

$$\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{1}{\tau_m}\right) \rho_m(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\tau_m} \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (5.20)$$

式 (5.4) より成分 m の質量保存が成立する.

$$\begin{aligned} \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \left(1 - \frac{1}{\tau_m}\right) \rho_m(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\tau_m} \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \\ &= \rho_m(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (5.21)$$

式 (5.21) を m について総和を取ると, 総和質量保存が成立する.

$$\rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \rho(\mathbf{r}, t) \quad (5.22)$$

以上より, MIX は各成分の質量保存および総和質量保存が成立する.

5.3.2 運動量保存

式 (5.1) に $\mathbf{e}_{\sigma i}$ を掛け σ, i について総和を取ると,

$$\begin{aligned} \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \left(1 - \frac{1}{\tau_m}\right) \rho_m(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t) \\ &\quad + \frac{1}{\tau_m} \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (5.23)$$

式 (5.12) を代入し, 両辺を m について総和を取ると式 (5.24) となる.

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t + \Delta t)|_{tmp} \\ &\quad - \Delta \text{momentum}(\mathbf{r}, t) + \Delta \rho \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (5.24)$$

式 (5.9) を代入すると, 総和運動量保存の式が導かれる.

$$\rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) + \Delta \rho \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \quad (5.25)$$

式 (5.25) において一タイムステップ間の総和運動量変化 $\Delta \rho \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = 0$ の時, 一タイムステップ間での総和運動量が保存する. 以上より, MIX は総和運動量保存を満たすことが確認できた.

5.3.3 エネルギー保存

式 (5.1) に $e_{\sigma i}/2$ を掛け σ, i について総和を取ると,

$$\begin{aligned} & \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] = \\ & \left(1 - \frac{1}{\tau_m} \right) \rho_m(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \right] + \frac{1}{\tau_m} \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t)^2}{2} + \varepsilon_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \right] \end{aligned} \quad (5.26)$$

式 (5.19) を代入し, 両辺を m について総和を取ると総和エネルギー保存の式が導かれる.

$$\begin{aligned} & \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] = \\ & \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \Big|_{tmp} - \Delta energy(\mathbf{r}, t) + \Delta \varepsilon(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

上式に式 (5.16) を代入すると,

$$\begin{aligned} & \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] = \\ & \rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t) \right] + \Delta \varepsilon(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (5.27)$$

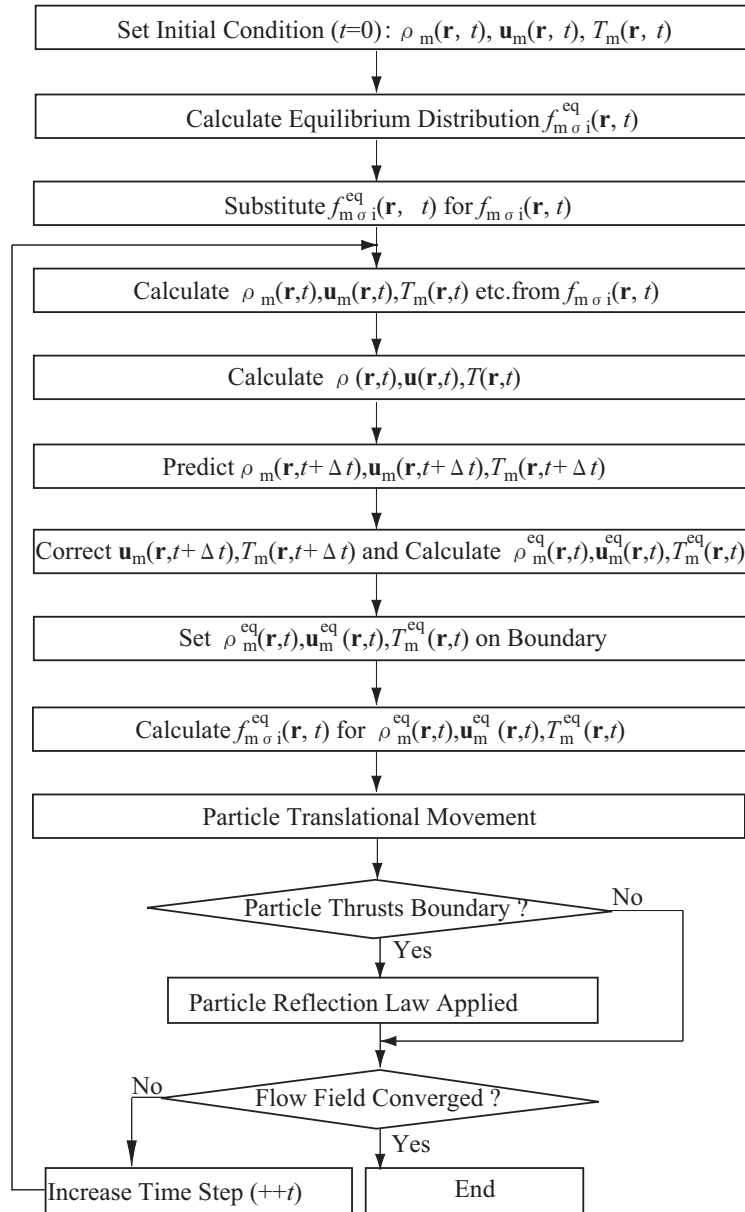
式 (5.27) において一タイムステップ間の総和エネルギー変化 $\Delta \varepsilon(\mathbf{r}, t) = 0$ の時, 総和エネルギー保存が成立する. 以上より, MIX では総和エネルギー保存を満たすことが確認できた.

5.4 多成分相互作用拡張のアルゴリズム

多成分相互作用拡張のフローチャートを図 5.1 に示す。また、処理の概要を以下に示す。

- 1: 各成分の初期物理量設定 初期状態における各成分の巨視的な物理量を指定する。
- 2: 各成分の平衡分布算出 初期物理量および平衡分布関数を用い、各成分の平衡分布を求める。
- 3: 各成分の初期粒子分布設定 2 で求めた平衡分布を初期状態の粒子分布とする。
- 4: 各成分の巨視的物理量の算出 各成分の粒子分布から巨視的物理量を求める。
- 5: 混合流体としての巨視的物理量の算出 各成分の粒子分布を総和し、混合流体としての巨視的物理量を求める。
- 6: 予測：仮の次タイムステップ計算 4, 5 で求めた物理量を用いて仮の次タイムステップ物理量を求める。尚、物理量保存を考慮するために並進過程は考慮せず、衝突過程のみを計算する。
- 7: 修正：各成分の物理量の補正 6 で求めた仮のタイムステップ物理量を物理量保存が成立するように修正を行う。
- 8: 各成分の境界条件設定 各成分の境界上の巨視的物理量を指定した物理量で上書きを行う。
- 9: 成分毎の平衡分布の計算 7, 8 で求めた巨視的物理量を用い、各成分の平衡分布関数を計算することで各成分の平衡分布を求める。
- 10: 成分毎の粒子並進移動 (粒子追跡) 成分毎に各成分の LBE に従い、粒子を移動させる。
- 11: 粒子位置の確認 計算領域外もしくは壁面を通過する粒子を判別する。粒子が壁面などを通過する場合、「粒子反射則または周期境界条件」を適用する。

12: 流れ場の収束判定 流れ場が収束していない場合は、「4: 巨視的物理量の算出」の部分に戻り、流れ場が収束した場合は計算を終了する。尚、非定常性の強い問題の場合は予め指定した反復回数で計算を終了させる必要がある。



⊗ 5.1: Flow chart of MIX

5.5 数値解による検証

本節では MIX を用いて拡張した三成分流体 LB モデルで数値解検証を行った。混和多成分流体の場合、各成分が等しい割合で完全混合した混合流体は各成分の物性値の算術平均値を持つ一成分流体と一致すると考えられる。本節では三成分流体の場合を扱い、MIX の妥当性を検討した。また、MIX の相互作用を検証するため、三成分流体の一成分にのみ境界条件を与えた。定常状態において、三成分流体 LB モデルは拡張前の LB モデルの結果と同じになる必要がある。尚、本節では各成分のインデックスをそれぞれ r, g, b とした。

5.5.1 クエット流れ

クエット流れ問題において、3.6.1 節で示した S.Hou らの 2D9V モデルを用いて検証を行った。解析条件を図 5.2 に示す。格子点数は 161×161 とし、上壁を移動壁 (滑りあり)、下壁を固定壁 (滑りなし)、左右を周期境界とした。

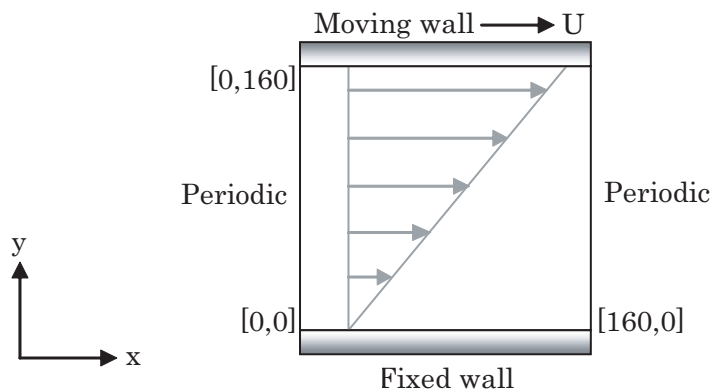


図 5.2: Problem description of Couette flow

その他の解析条件は表 5.1 のように置いた。三成分 2D9V モデルでは相互作用の検証のため、一成分にのみ境界条件を与えた。尚、レイノルズ数 $Re=100$ とした。

図 5.3 は定常状態における $x = 80$ における x 方向流速である。横軸は水平方向流速、縦軸は y 座標である。実線は拡張前の 2D9V モデルによる結果、 \square は MIX による三成分 2D9V モデルの結果、 $+$ は解析解を表す。2 つのモデルの解析結果はよく

表 5.1: Detailed condition of Couette flow using MIX

	1Comp (Original)	3Comp (MIX)
Single relaxation time	1.00	$r:0.900, g:1.00, b:1.10$
Local density	6.00	$r:2.00, g:2.00, b:2.00$
Moving wall (Speed)	0.104	$r:0.104, g:\text{free}, b:\text{free}$
Fixed wall (Speed)	0.00	$r:0.00, g:\text{free}, b:\text{free}$

一致していることが確認できる。また、三成分 2D9V モデルでは常に密度比を 1:1:1 に保っていることが確認できた。尚、定常状態に達するまでの各タイムステップにおける一成分モデルと三成分モデルの各物理量が一致していることから、MIX は非定常流れに対しても有効であると考えられる。以上の結果より、MIX は非熱流体 LB モデルにおいて有効な手法であると考えられる。

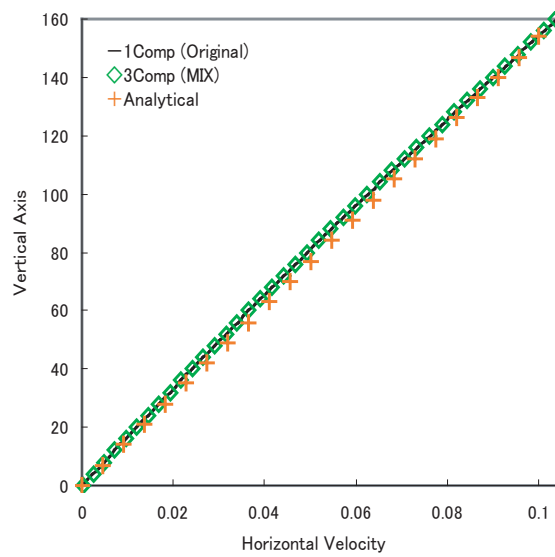


図 5.3: Horizontal velocity of MIX at $x = 80$

5.5.2 サーマルクエット流れ

3.6.2節で示したサーマルクエット流れを用いて MIX の数値解検証を行った。詳細な解析条件を表 5.2 に示す。尚、レイノルズ数 $Re=300$ とした。

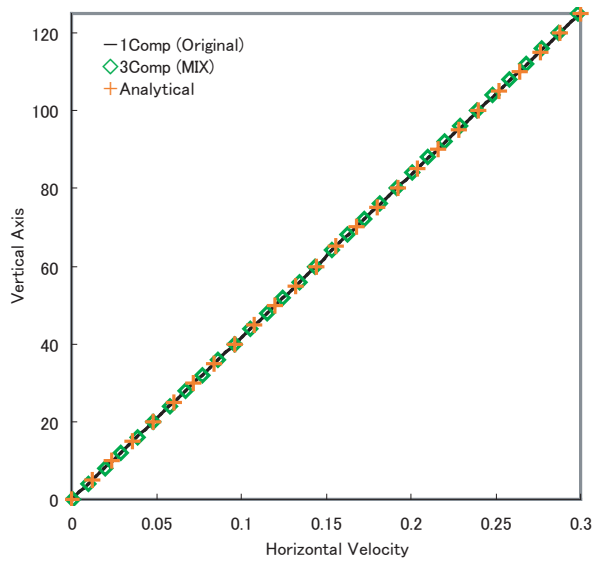
表 5.2: Details of thermal Couette flow problem using MIX

	1Comp (Original)	3Comp (MIX)
Single relaxation time	1.0	$r:0.90, g:1.0, b:1.1$
Local density	6.0	$r:2.0, g:2.0, b:2.0$
Moving wall (Speed)	0.30	$r:0.30, g:\text{free}, b:\text{free}$
Moving wall (Static temperature)	0.52	$r:0.52, g:\text{free}, b:\text{free}$
Fixed wall (Speed)	0.00	$r:0.00, g:\text{free}, b:\text{free}$
Fixed wall (Static temperature)	0.48	$r:0.48, g:\text{free}, b:\text{free}$

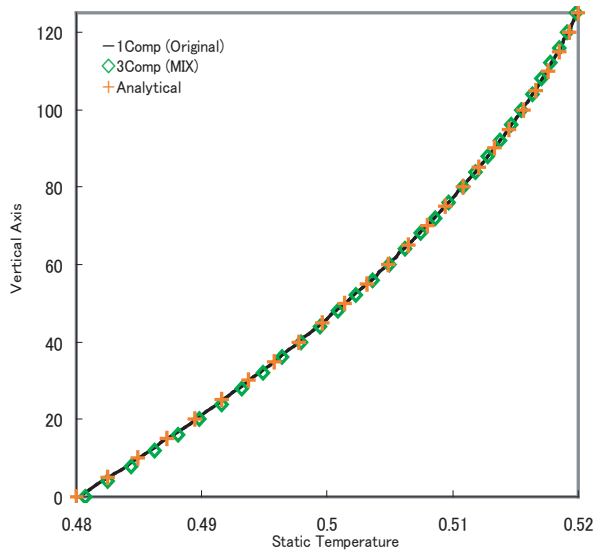
図 5.4 は定常状態における計算領域中心 ($x = 64$) における水平方向流速である。横軸は x 方向の流速, 縦軸は y 軸座標を表す。また, 実線は元の 2D21V モデルの x 方向流速, \square は MIX による三成分 2D21V モデルの x 方向流速, $+$ は解析解である。MIX による三成分 2D21V モデルの x 方向流速は元の 2D21V モデルの流速と良い一致が見られる。

図 5.5 は定常状態における計算領域中心 ($x = 64$) での温度分布であり, 横軸は温度, 縦軸は y 軸座標を表す。また, 実線は元の 2D21V モデルの温度, \square は MIX による三成分 2D21V モデルの温度, $+$ は解析解である。二つのモデルとも同じ温度分布となっていることが分かる。また, 定常状態に到達するまでの二つのモデルの各物理量が等しいことから, MIX は非定常流れに対しても有効であると考えられる。

以上の結果より, MIX は非熱流体 LB モデルを多成分熱流体 LB モデルに拡張する有効な手法であると考えられる。



⊗ 5.4: Horizontal velocity of MIX at $x = 64$



⊗ 5.5: Static Temperature of MIX at $x = 64$

5.6 混和三成分流体解析

5.6.1 解析条件

前節で示した三成分 2D21V モデルを用い, 三成分の混合 (攪拌) シミュレーションを行った. 解析条件を図 5.6 に示す. 格子点数は 126×126 , 上壁を $T = 0.55, U_{TOP} = 0.05$ の加熱移動壁 (滑りあり), 下壁を $T = 0.45, U_{BOTTOM} = -0.05$ の冷却固定壁 (滑りあり), 左右を周期境界とした. 各成分の単一緩和係数はそれぞれ $\tau_r = 1.0, \tau_g = 1.01, \tau_b = 1.02$ とした. また, 初期状態では静止流体を仮定し, 各成分を三相に分離させた. 尚, レイノルズ数 $Re=100$ である.

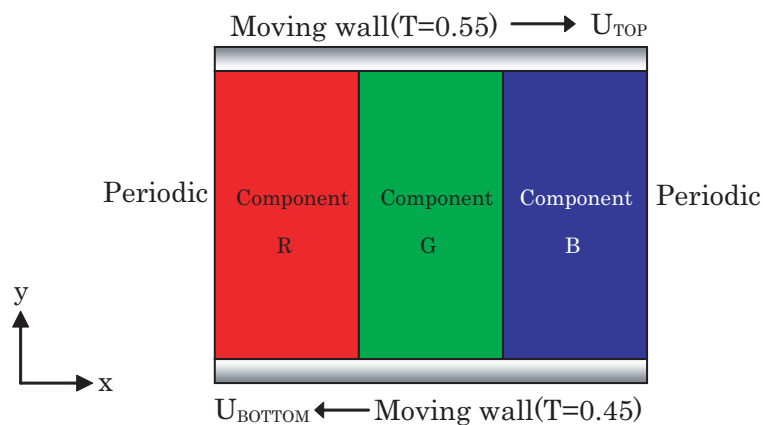


図 5.6: Problem description of mixing 3 phases

5.6.2 解析結果

以下に三成分の混合状態の時間変化を示す. 三成分の存在比を RGB の色成分の大きさと対応させ可視化を行った. カラーレジェンドと三相の混合状態の関係を表 5.3 に示す.

表 5.3: Relation between color-map and mixing states

Color	State of mixing
Black	Vacuum
Red	Particle R only
Green	Particle G only
Blue	Particle B only
Violet	Particle R and B mixed
Sky blue	Particle G and B mixed
Yellow	Particle R and G mixed
White	All Particle mixed

・初期状態 ($t = 0$)

図 5.7 は初期状態の三成分の存在比であり, 三成分は分離していることが確認できる.

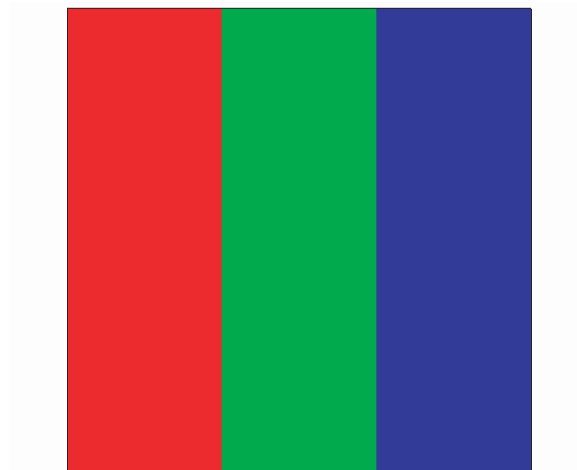


図 5.7: Initial state of three phases at $t = 0$

・混合の開始 ($t = 500$)

図 5.8 は $t = 500$ における温度分布である。尚、温度分布は三成分の平均温度を用いた。加熱壁および冷却壁付近では熱伝導により流れ場の温度変化が見られる。

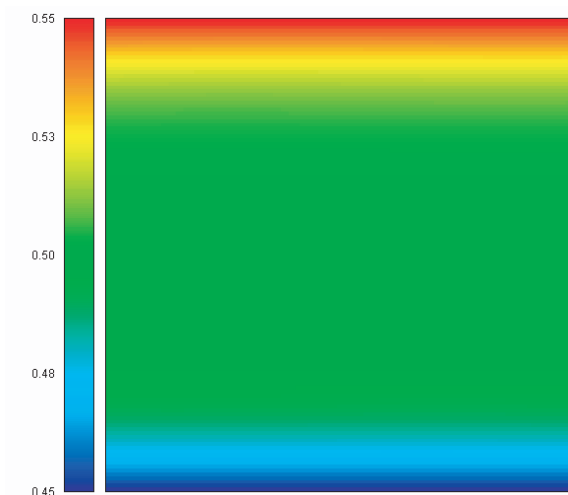


図 5.8: Static temperature profile of three phases mixing at $t = 500$

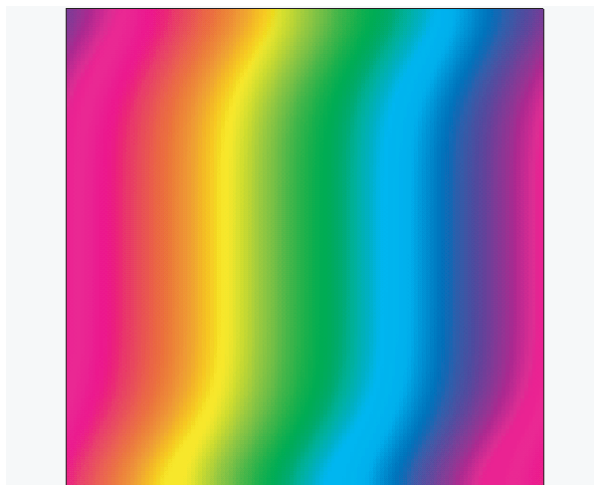


図 5.9: Existence ratio of three phases mixing at $t = 500$

図 5.9 は $t = 500$ における三成分の存在比である。上壁および下壁では移動壁の影響により各相が水平方向に移動していることがわかる。垂直方向の領域中心では移動壁の影響が少ないために、三成分の混合は分子拡散により生じていると考え

られる。上壁付近の三成分の混合は下壁付近に比べて早く進行していることが確認できる。これは温度が高い程分子拡散が強くなるためであり、定性的に妥当な結果と考えられる。

・ 定常状態 ($t = 10,000$)

図 5.10 は定常状態における三成分の存在比であり、各相は完全に混合していることが確認できる。

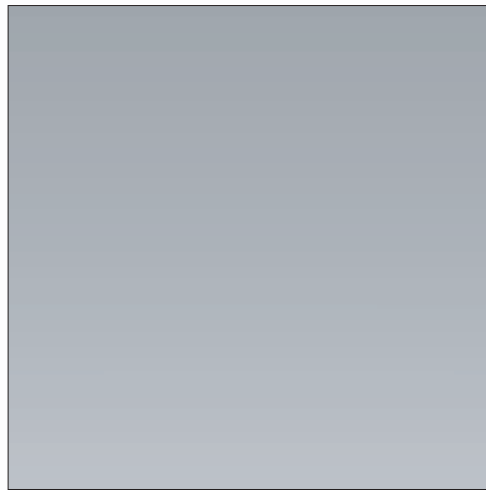


図 5.10: The steady mixing state of three phases at $t = 10,000$

以上の解析より、MIX は各相の分離状態から完全混合状態までを扱うことが可能であることが確かめられた。

5.6.3 まとめ

本章では任意の成分数において、動粘性係数が異なる場合でも各物理量保存を正しく考慮可能な多成分相互作用拡張 (Multi-component Interaction eXtension) を提案した。また、一タイムステップ間の各物理量が保存すること、実際の LB モデルに MIX を適用した場合、妥当な解析結果が得られることを示した。尚、MIX を実問題に応用する場合、各相が異なる物性値を持つことが可能であるが、表面張力の効果が無視できる問題 (例えば、酸素と二酸化炭素の混合解析など) への適用が望ましいと考えられる。以上より、MIX は LB モデルを混和多成分流体モデルに拡張する有効な手法であると結論付けられる。

第 6 章

格子ボルツマン法の反応多成分相互作用拡張

本章では化学反応などによる質量変化を扱うことが可能な反応多成分拡張について議論を行う。この手法は、MIX を化学反応などによる各成分の質量変化を考慮できるよう改良したものである。反応多成分相互作用拡張の概要、解析的な証明、数値解による検証、および解析例を示す。

6.1 反応多成分相互作用拡張の概要

「多成分相互作用拡張」では、成分間相互作用において各成分の質量保存が成立すると仮定している。従って、「多成分相互作用拡張」では化学反応などによる各成分の質量変化を考慮することが難しい。そこで、化学反応などによる各成分の質量変化を考慮できるよう「多成分相互作用拡張」を改良した「反応多成分相互作用拡張」を提案した。

「反応多成分相互作用拡張」では、各成分の質量変化を化学反応式やアレニウス式などを用いて算出し、次タイムステップの各成分の質量変化を考慮するのが特徴である。また、各物理量補正は、次タイムステップの密度比 (化学種分率) を用いて分配を行うことで物理量保存を考慮する。尚、「反応多成分相互作用拡張」の詳細を次節で示す。

6.2 反応多成分相互作用拡張

反応多成分相互作用拡張 (REaction Multi-component Interaction eXtension, 以下 REMIX と略す) では, 一タイムステップ間の各物理量保存を議論するために並進過程を考慮せず, 衝突過程のみを考慮する. 並進過程を考慮しない場合, 成分 m の LBE は以下の式となる.

$$f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{1}{\tau_m}\right) f_{m\sigma i}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\tau_m} f_{m\sigma i}^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (6.1)$$

6.2.1 質量

Δt 後の成分 m の密度を

$$\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \rho_m(\mathbf{r}, t) + \Delta\rho_m(\mathbf{r}, t) \quad (6.2)$$

とすると¹, Δt 後の成分 m の密度変化を実現する平衡状態の成分 m の密度は LBE より式 (6.3) となる.

$$\rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) = \tau_m \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) - (\tau_m - 1) \rho_m(\mathbf{r}, t) \quad (6.3)$$

また, 式 (6.2) を成分 m について総和を取ると, 次タイムステップの総和密度が得られる.

$$\rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \rho(\mathbf{r}, t) + \Delta\rho(\mathbf{r}, t) \quad (6.4)$$

以上より, 質量変化を考慮した平衡状態の密度を求めることができた.

6.2.2 運動量

平衡状態の密度は式 (6.3) より求めたものを用いると², $\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)$, $\rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t)$ は定数とみなせる. 次に, 平衡状態の流速を求める. 成分 m の LBE に $\mathbf{e}_{\sigma i}$ を掛け σ, i について総和を取ると,

$$\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{1}{\tau_m}\right) \rho_m(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t)$$

¹各成分の質量 (密度) 変化は, 質量変化に関する式を用いて求める. 例えば, 化学反応の場合はアレニウスの反応速度式などを用いる.

²式 (6.3) で求めた密度を用いれば次タイムステップの密度変化を考慮できる.

$$+ \frac{1}{\tau_m} \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (6.5)$$

各成分の現在および次タイムステップの運動量について m で総和を取ると,

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t) \quad (6.6)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \quad (6.7)$$

また, 平衡状態における流速は現在の平均流速になると仮定すると,

$$\mathbf{u}^{eq}(\mathbf{r}, t)|_{tmp} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \quad (6.8)$$

となる. 式 (6.8) の流速を用いて仮の次タイムステップ運動量を LBE より求めると,

$$\begin{aligned} \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)|_{tmp} &= \left(1 - \frac{1}{\tau_m}\right) \rho_m(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t) \\ &+ \frac{1}{\tau_m} \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \left\{ \mathbf{u}^{eq}(\mathbf{r}, t)|_{tmp} \right\} \end{aligned} \quad (6.9)$$

式 (6.9) の左辺について m で総和を取ると,

$$\rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t + \Delta t)|_{tmp} = \sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)|_{tmp} \quad (6.10)$$

となる. 仮の次タイムステップ総和運動量式 (6.10) と現在の総和運動量式 (6.7) の差分 $\Delta \text{momentum}(\mathbf{r}, t)$ が総和運動量を保存するための補正量となる.

$$\Delta \text{momentum}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t + \Delta t)|_{tmp} - \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \quad (6.11)$$

この $\Delta \text{momentum}(\mathbf{r}, t)$ を各成分の単一緩和係数 τ_m , および各成分の次タイムステップの密度比に応じて分配することで次タイムステップの運動量を補正する. 尚, τ_{max} は各成分の中で最大の τ_m を表す.

$$\begin{aligned} \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)|_{tmp} \\ &- \Delta \text{momentum}(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)(\tau_{max} - \tau_m)}{\sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)(\tau_{max} - \tau_m)} \right) \end{aligned} \quad (6.12)$$

また, 成分 m が一タイムステップ間に $\Delta \rho_m \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t)$ だけ運動量に変化した場合は

$$\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)|_{tmp} + \Delta \rho_m \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t)$$

$$-\Delta \mathbf{momentum}(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)(\tau_{max} - \tau_m)}{\sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)(\tau_{max} - \tau_m)} \right) \quad (6.13)$$

となる. この次タイムステップの運動量を用いて, 平衡状態の運動量を LBE より求めると,

$$\begin{aligned} \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t) &= \tau_m \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \\ &\quad - (\tau_m - 1) \rho_m(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (6.14)$$

式 (6.13) を代入すると,

$$\begin{aligned} \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t) &= \tau_m \left\{ \begin{aligned} &\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)|_{tmp} + \Delta \rho_m \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t) \\ &-\Delta \mathbf{momentum}(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)(\tau_{max} - \tau_m)}{\sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)(\tau_{max} - \tau_m)} \right) \end{aligned} \right\} \\ &\quad - (\tau_m - 1) \rho_m(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t) \end{aligned}$$

となる. 以上より, 総和運動量保存が成立し, Δt 間の各成分の質量変化, および成分間の相互作用を考慮した平衡状態における運動量を求めることができる.

6.2.3 エネルギー

平衡状態の密度は式 (6.3) より, 平衡状態の流速は式 (6.14) から求めたので³, 以後 $\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)$, $\rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t)$ および $\mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)$, $\mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t)$ は定数として扱う. まず, 平衡状態の内部エネルギーを求める. 成分 m の LBE の両辺に $e_{\sigma i}^2/2$ を掛け, σ, i で総和を取ると, 成分 m のエネルギーに関する式が導かれる.

$$\begin{aligned} &\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \\ = &\left(1 - \frac{1}{\tau_m} \right) \rho_m(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \right] + \frac{1}{\tau_m} \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t)^2}{2} + \varepsilon_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \right] \end{aligned} \quad (6.15)$$

各成分の現在のエネルギーについて m で総和を取ると,

$$\rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t) \right] = \sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \right] \quad (6.16)$$

³平衡状態の密度および流速を用いることにより, 質量変化および総和運動量保存を考慮することができる.

また, 各成分の次タイムステップのエネルギーについて m で総和を取ると,

$$\begin{aligned} & \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \\ = & \sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \end{aligned} \quad (6.17)$$

となる. 平衡状態における内部エネルギーは現在の平均内部エネルギーになると仮定すると,

$$\varepsilon^{eq}(\mathbf{r}, t)|_{tmp} = \varepsilon(\mathbf{r}, t) \quad (6.18)$$

となる. この内部エネルギーを用い, 仮の次タイムステップ熱エネルギーを求めると,

$$\begin{aligned} & \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \Big|_{tmp} \\ = & \left(1 - \frac{1}{\tau_m} \right) \rho_m(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \right] \\ & + \frac{1}{\tau_m} \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t)^2}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t)|_{tmp} \right] \end{aligned} \quad (6.19)$$

式 (6.19) の左辺を m について総和を取ると,

$$\begin{aligned} & \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \Big|_{tmp} \\ = & \sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \Big|_{tmp} \end{aligned} \quad (6.20)$$

式 (6.20) の仮の次タイムステップエネルギーと式 (6.17) の現在のエネルギー差分 $\Delta energy(\mathbf{r}, t)$ が総和エネルギーを保存するために必要な補正量となる.

$$\begin{aligned} \Delta energy(\mathbf{r}, t) = & \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \Big|_{tmp} \\ & - \rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t) \right] \end{aligned} \quad (6.21)$$

この $\Delta energy(\mathbf{r}, t)$ を τ_m , 及び次タイムステップの各成分の密度比に応じて分配し, 次タイムステップのエネルギーの補正を行う. 従って, 成分 m の次タイムステップエネルギーは,

$$\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right]$$

$$\begin{aligned}
&= \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \Big|_{tmp} \\
&\quad - \Delta energy(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)(\tau_{max} - \tau_m)}{\sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)(\tau_{max} - \tau_m)} \right)
\end{aligned} \tag{6.22}$$

となる. また, 成分 m が一タイムステップ間に $\Delta\varepsilon_m(\mathbf{r}, t)$ だけエネルギーが変化する場合は

$$\begin{aligned}
&\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \\
&= \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \Big|_{tmp} \\
&\quad - \Delta energy(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)(\tau_{max} - \tau_m)}{\sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)(\tau_{max} - \tau_m)} \right) + \Delta\varepsilon_m(\mathbf{r}, t)
\end{aligned} \tag{6.23}$$

となる. 式 (6.23) の次タイムステップのエネルギーを用いると, 平衡状態のエネルギーはLBEより,

$$\begin{aligned}
&\rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t)^2}{2} + \varepsilon_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \right] \\
&= \tau_m \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \\
&\quad + (\tau_m - 1) \rho_m(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \right]
\end{aligned} \tag{6.24}$$

式 (6.23) を代入すると,

$$\begin{aligned}
&\rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t)^2}{2} + \varepsilon_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \right] \\
&= \tau_m \left\{ \begin{aligned} &\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \Big|_{tmp} + \Delta\varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \\ &- \Delta energy(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)(\tau_{max} - \tau_m)}{\sum_m \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t)(\tau_{max} - \tau_m)} \right) \end{aligned} \right\} \\
&\quad + (\tau_m - 1) \rho_m(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \right]
\end{aligned}$$

となる. 以上より, 総エネルギー保存を満たし, 各成分の相互作用および各成分の密度変化を考慮した平衡状態のエネルギーを求めることができた.

6.3 各物理量の保存

本節では REMIX が各物理量保存を満たすことを示す。尚、各物理量の保存を検証するため、LBE における並進過程は考慮せず議論を行う。

6.3.1 質量保存

式 (6.1) の両辺を σ, i について総和を取ると、成分 m の密度に関する式 (6.25) が導かれる。

$$\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{1}{\tau_m}\right) \rho_m(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{\tau_m} \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \quad (6.25)$$

式 (6.2) および (6.3) を代入すると、成分 m の質量保存の式が得られる。

$$\rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \rho_m(\mathbf{r}, t) + \Delta\rho_m(\mathbf{r}, t) \quad (6.26)$$

m について総和を取ると、総和質量保存の式となる。

$$\rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \rho(\mathbf{r}, t) + \Delta\rho(\mathbf{r}, t) \quad (6.27)$$

以上より、一タイムステップ間の成分 m の密度変化 $\Delta\rho_m(\mathbf{r}, t) = 0$ の時、各成分の密度保存が成立する。また、密度変化の総和 $\Delta\rho(\mathbf{r}, t) = 0$ の時に総和質量保存が成立する。

6.3.2 運動量保存

並進過程を考慮しない成分 m の LBE は式 (6.1) となる。式 (6.1) に $\mathbf{e}_{\sigma i}$ を掛け σ, i について総和を取ると、成分 m の運動量関係式 (6.28) が得られる。

$$\begin{aligned} \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \left(1 - \frac{1}{\tau_m}\right) \rho_m(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m(\mathbf{r}, t) \\ &\quad + \frac{1}{\tau_m} \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (6.28)$$

式 (6.13) および (6.14) を代入し、 m について総和を取ると、

$$\rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t + \Delta t)|_{tmp}$$

$$-\Delta \text{momentum}(\mathbf{r}, t) + \Delta \rho \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \quad (6.29)$$

となる。また、式 (6.9) を代入すると総和運動量保存の式

$$\rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) + \Delta \rho \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \quad (6.30)$$

が得られる。一タイムステップ間の運動量変化 $\Delta \rho \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = 0$ の時、総和運動量保存が成立することが確認できる。

6.3.3 エネルギー保存

並進過程を考慮しない成分 m の LBE, 式 (6.1) の両辺に $e_{\sigma i}^2/2$ を掛け σ, i について総和を取ると、成分 m のエネルギーに関する式 (6.31) が得られる。

$$\begin{aligned} & \rho_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \\ &= \left(1 - \frac{1}{\tau_m} \right) \rho_m(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon_m(\mathbf{r}, t) \right] \\ & \quad + \frac{1}{\tau_m} \rho_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}_m^{eq}(\mathbf{r}, t)^2}{2} + \varepsilon_m^{eq}(\mathbf{r}, t) \right] \end{aligned} \quad (6.31)$$

式 (6.23) および (6.24) を代入し、 m について総和を取ると、総和エネルギー保存の式 (6.32) が導かれる。

$$\begin{aligned} & \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \\ &= \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \Big|_{tmp} \\ & \quad - \Delta \text{energy}(\mathbf{r}, t) + \Delta \varepsilon(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (6.32)$$

式 (6.21) を代入すると、

$$\begin{aligned} & \rho(\mathbf{r}, t + \Delta t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t + \Delta t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t + \Delta t) \right] \\ &= \rho(\mathbf{r}, t) \left[\frac{\mathbf{u}^2(\mathbf{r}, t)}{2} + \varepsilon(\mathbf{r}, t) \right] + \Delta \varepsilon(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (6.33)$$

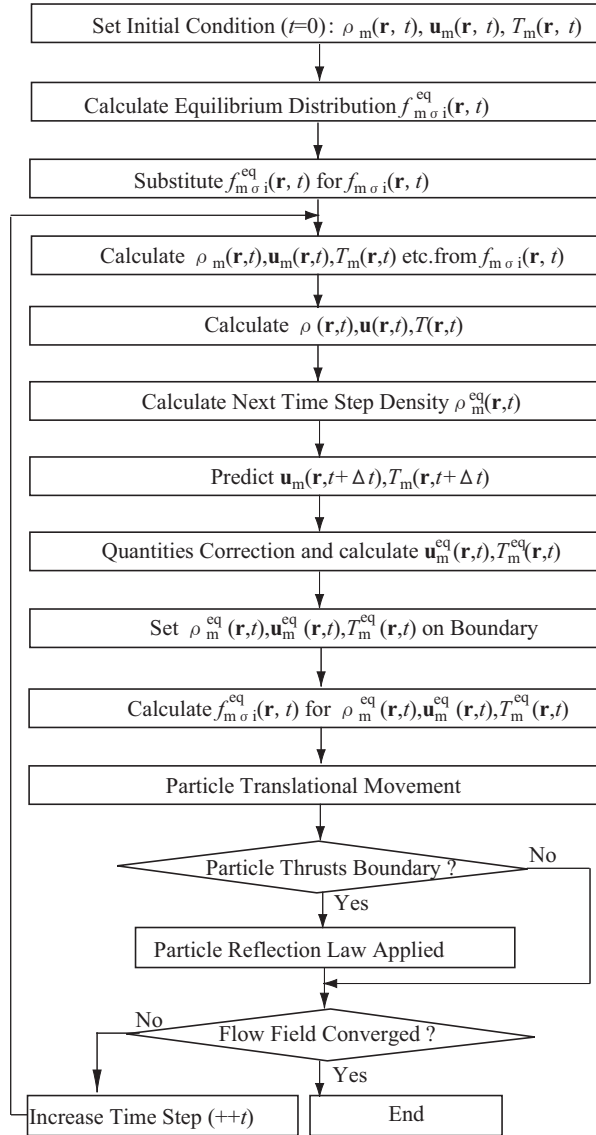
となる。一タイムステップ間の総和エネルギー変化 $\Delta \varepsilon(\mathbf{r}, t) = 0$ の時、総和エネルギー保存が成立することが確認できる。以上より、REMIX は各物理量保存を正しく考慮可能であることが確認できた。

6.4 反応多成分相互作用拡張のアルゴリズム

反応多成分相互作用拡張のフローチャートを図 6.1 に示す。多成分相互作用拡張を基にしているため、変更点はステップ 6:が追加されているだけである。

- 1: 各成分の初期物理量設定 初期状態における各成分の巨視的な物理量を指定する。
- 2: 各成分の平衡分布算出 初期物理量および平衡分布関数を用い、各成分の平衡分布を求める。
- 3: 各成分の初期粒子分布設定 2で求めた平衡分布を初期状態の粒子分布とする。
- 4: 各成分の巨視的物理量の算出 各成分の粒子分布から巨視的物理量を求める。
- 5: 混合流体としての巨視的物理量の算出 各成分の粒子分布を総和し、混合流体としての成分毎の巨視的物理量を求める。
- 6: 次タイムステップの各成分の密度算出 4, 5で求めた流速(および温度)を基に、各成分の次タイムステップ密度を求める。尚、密度算出にはアレニウス式など他の方程式を用い、流れ場解析と反応式を連成させる。
- 7: 予測：仮の次タイムステップ計算 4, 5, 6で求めた物理量を用いて仮の次タイムステップ物理量を求める。尚、物理量保存を考慮するために並進過程は考慮せず、衝突過程のみを考慮する。
- 8: 修正：各成分の物理量の補正 7で求めた仮のタイムステップ物理量を物理量保存が成立するように修正を行う。
- 9: 各成分の境界条件設定 各成分の境界上の巨視的物理量を指定した物理量で上書きを行う。
- 10: 成分毎の平衡分布の計算 8, 9で求めた巨視的物理量を用い、各成分の平衡分布関数を計算することで各成分の平衡分布を求める。
- 11: 成分毎の粒子並進移動(粒子追跡) 各成分のLBEに従い、成分毎に粒子を移動させる。

- 12: 粒子位置の確認 計算領域外もしくは壁面を通過する粒子を判別する。粒子が壁面などを通過する場合、「粒子反射則または周期境界条件」を適用する。
- 13: 流れ場の収束判定 流れ場が収束していない場合は、「4: 巨視的物理量の算出」の部分に戻り、流れ場が収束した場合は計算を終了する。尚、非定常性の強い問題の場合は予め指定した反復回数で計算を終了させる必要がある。



⊗ 6.1: Flow chart of REMIX

6.5 数値解による検証

REMIX を用いて LB モデルを三成分 LB モデルに拡張し、数値解検証を行う。各成分が均等に混合した場合、三成分流体は三成分の物性値の平均値を持つ一成分流体と一致するかどうかを検討した。三成分 LB モデルでは一成分にのみ境界条件を与え、REMIX の相互作用を検証した。三成分 LB モデルの結果は定常状態において元の LB モデルの結果と一致する必要がある。

6.5.1 クエット流れ

5.5.1 節のクエット流れにおける数値解検証を REMIX を用いて行った。三成分流体の拡張に REMIX を用いた以外は、全て 5.5.1 節の解析条件と同じである。REMIX では反応などによる各成分の質量変化を考慮することが可能であるが、本検証では簡単のため質量変化は考慮しない。

図 6.2 は定常状態における $x = 80$ での x 方向流速である。横軸は x 方向流速、縦軸は y 軸座標を表す。実線は元の 2D9V モデルの x 方向流速であり、 \circ は三成分 2D9V モデルの x 方向流速、 $+$ は解析解である。三成分 2D9V モデルの流速分布は元の 2D9V モデルの流速分布と良く一致していることが分かる。また、定常状態に達するまでの二つのモデルの各物理量が一致していることから REMIX は非定常流れに対して有効であると考えられる。以上の結果から、REMIX は非熱流体 LB モデルにおいて有効な手法であることが確かめられた。

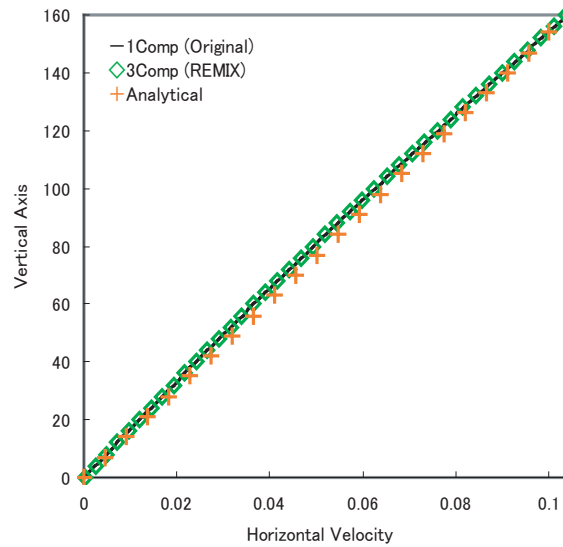
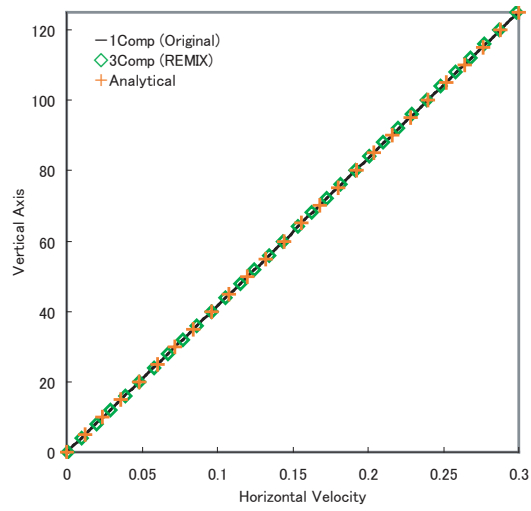


図 6.2: Horizontal velocity of Couette flow at $x = 80$ (REMIX)

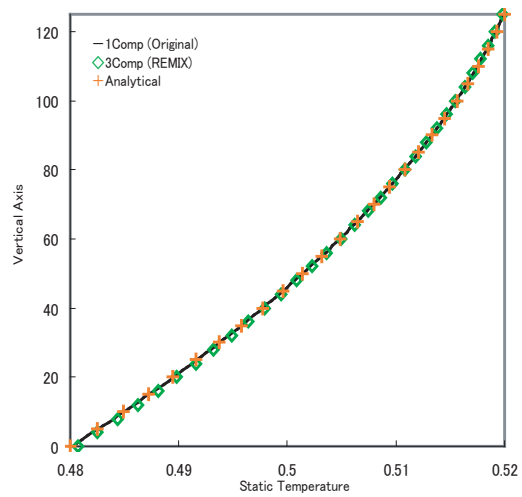
6.5.2 サーマルクエット流れ

3.6.2 節のサーマルクエット流れの問題を REMIX に適用し数値解検証を行った。三成分流体への拡張に REMIX を用いた以外は、3.6.2 節と同じ解析条件である。簡単のため、反応等による各成分の質量変化は考慮しない。

図 6.3 は定常状態における $x = 64$ の x 方向流速である。横軸は x 方向流速、縦軸は y 軸方向座標を表す。実線は元の 2D21V モデルによる x 方向流速、 \diamond は REMIX による三成分 2D21V モデルの x 方向流速であり良い一致が見られる。参考のため、解析解を $+$ で示した。また、図 6.4 は定常状態における $x = 64$ の温度分布であり、横軸は温度、縦軸は y 軸座標を表す。実線は元の 2D21V モデルによる温度分布、 \diamond は REMIX による三成分 2D21V モデルによる温度分布、 $+$ は解析解である。二つのモデルの温度分布は良く一致している。また、定常状態に達するまでの二つのモデルの各物理量が一致していることから、REMIX は非定常流れに対して有効であると考えられる。以上より、熱流体 LB モデルにおいても REMIX は有効な手法であると結論付けられる。



6.3: Horizontal velocity of thermal Couette flow at $x = 64$ (REMIX)



6.4: Static temperature of thermal Couette flow at $x = 64$ (REMIX)

6.6 反応性混和三成分流体解析

6.6.1 解析条件

6.5.2節の REMIX による三成分 2D21V モデルを用いて、反応を考慮した混和多成分流体解析を行った。REMIX において成分 R,G,B は以下の式に従い、反応による質量変化を考慮した。但し、逆反応および反応前後での発熱は考慮しない。



ここで a, b, c はモル数を表し、 $c = a + b$ であり、各成分の粒子 1 個の質量は等しいと仮定した。また、反応速度 ω は温度依存性を無視し、アレニウス式を用いた。

$$\omega = 10^{-2} [R_a]^a [G_b]^b \quad (6.35)$$

図 6.5 に問題設定を示す。格子点数は 126×126 、上壁を断熱移動壁 (滑りあり)、その他の壁を断熱固定壁 (滑りなし) とした。初期条件として初期密度 $\rho = 0.1, T = 0.5$ の静止流体を仮定し、図 6.5 のように成分 R と G を分離して配置した。各成分の単一緩和係数はそれぞれ $\tau_r = 1.0, \tau_g = 1.01, \tau_b = 1.02$ とした。

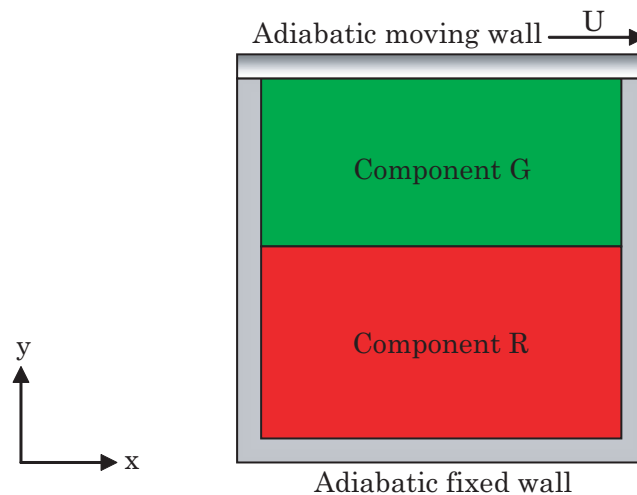


図 6.5: Problem description of reaction miscible multi-phase flow

6.6.2 解析結果

反応による各成分の質量変化を示す。尚, 三成分の存在比は 5.6 節と同様に RGB を用いて可視化した。

- ・ 初期状態 ($t = 0$)

図 6.6 は初期状態の三成分の存在比である。初期状態では成分 R と G のみ流れ場に存在している。

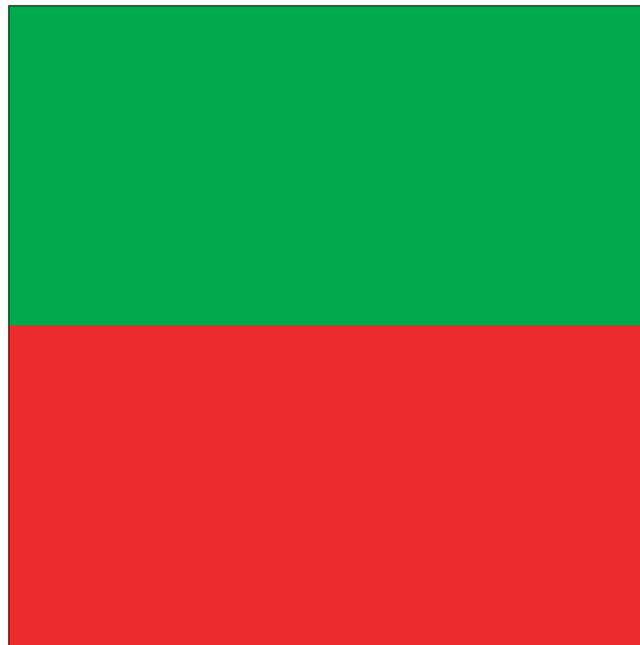


図 6.6: Initial state of existence ratio of reaction flow at $t = 0$

・ 反応による質量変化 ($t = 1,000$)

図 6.7 は $t = 1,000$ における三成分の存在比である。反応により成分 B が境界相付近で生成されていることが確認できる。また、上壁の移動の影響により境界相が変形している。

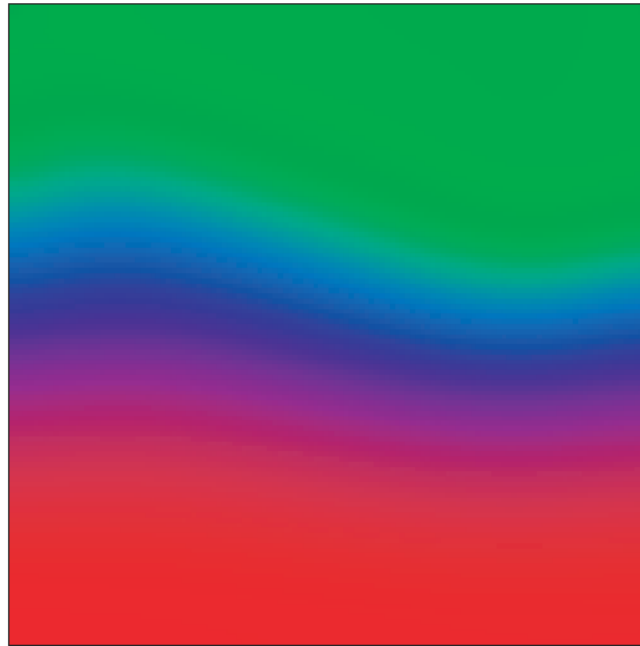


図 6.7: Mixing state of existence ratio of reaction flow at $t = 1,000$

・分子拡散と対流混合による反応速度差 ($t = 2,500$)

図 6.8 は $t = 2,500$ における流線である。尚、流速は三成分の平均流速を用いた。計算領域中央部付近ではメインフローは水平方向に流れており、計算領域の左壁および右壁付近ではメインフローは垂直方向に流れている。

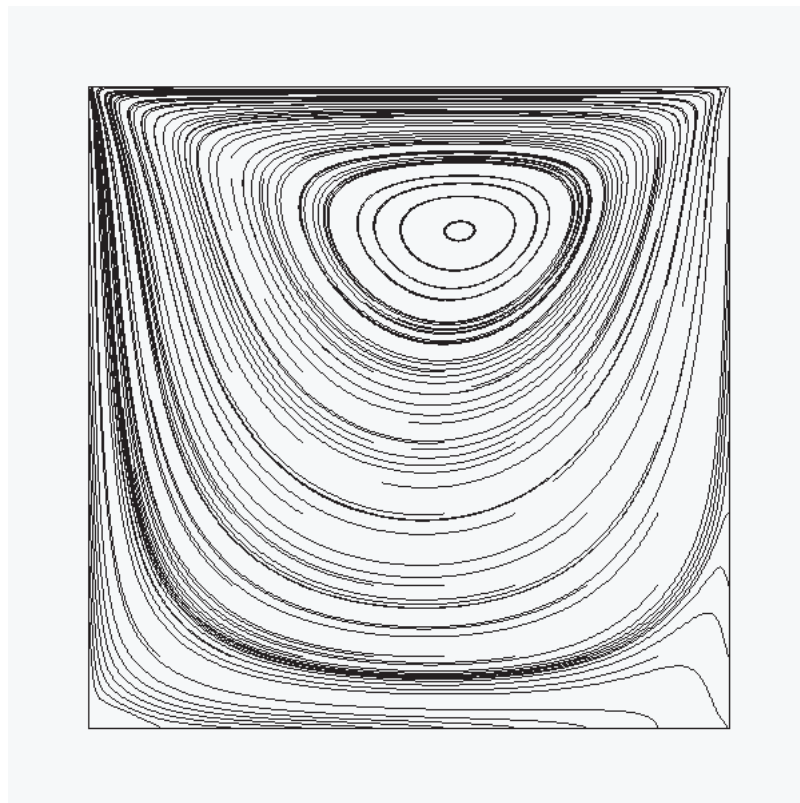


図 6.8: Streamlines of reaction flow at $t = 2,500$

図 6.9 はこの時の三成分の存在比であり、計算領域左上付近で反応が早く進行している。これは流れ場の影響により成分 R と G の混合が促進されたためと考えられる。計算領域中央部辺りでは鉛直方向の流れがないために、主に分子混合により反応が進行しているものと考えられる。



図 6.9: The steady state of existence ratio of reacted flow at $t = 2,500$

- ・ 定常状態 ($t = 20,000$)

図 6.10 は定常状態における三成分の存在比である。流れ場には成分 B のみが分布していることから、定性的に妥当な解析結果であると言える。



図 6.10: Existence ratio of reacted flow ($t = 20,000$)

6.7 まとめ

本節では反応による質量変化を考慮可能な反応多成分拡張 (REaction Multi-component Interaction eXtension) を提案した. REMIX は一タイムステップ間の各物理量保存を正確に考慮することが可能である. また, 数値解検証では妥当な解析結果が得られることが確認できた. 反応性混和多成分流体解析例では反応による各成分の質量変化を扱えることが確認できた. 尚, REMIX は各成分が異なる物性値を持つことが可能であるが, 表面張力が顕著な問題への適用は難しいと考えられる. REMIX の実問題への応用例として, NO_x や SO_x と水蒸気の反応などが挙げられる. 以上より, REMIX は LB モデルを反応性多成分流体解析可能に拡張できる有効な手法であると結論付けられる.

第 7 章

反応多成分拡張法の並列性能

本章では本研究で提案した四つの拡張法の中で最も相互作用計算負荷が高い反応多成分相互作用拡張の並列性能について議論を行う. REMIX を S.Hou らによる 2D9V モデルと葛原らによる 2D21V モデルに適用し, Cray T3E 1200E で並列ベンチマークを行った. 表 7.1 に T3E の仕様を示す.

表 7.1: Specification of Cray T3E 1200E

Architecture	Distributed Memory (Scalar)
Network	3D Torus
Number of PE	128
CPU(1PE)	Alpha 21164a 600MHz
Memory(1PE)	512MByte (3rd cache)
OS	Cray unicos 2.0.6.08
Compiler	Cray Standard C 6.6.0.2
Parallel Library	MPI

7.1 並列化手法

7.1.1 領域分割法

LBMの並列化手法としては領域分割 [18] および David R.Noble らによる機能分散 [15] が挙げられる。本稿ではLBMの変数の空間依存性が少ないことに着目し、領域分割による並列化を行った。並列化手法として二次元領域分割を行い、各PEの配列確保は計算に必要な部分だけ確保した。

7.1.2 ノンブロッキング通信および通信隠蔽

図 7.1 に境界上の格子点の粒子分布交換の概念図を示す。PE0 は領域外に飛んでいく粒子を PE1 に渡し、PE1 から飛んでくる粒子を受け取る。従って、粒子が Δt の間に $N\Delta x$ 移動するモデルの場合、 N 格子点分だけ依存関係が発生する。

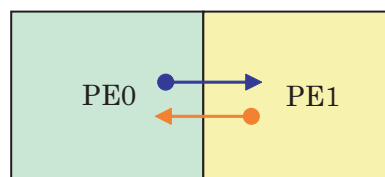


図 7.1: Concept of exchanging particles between PEs

従って、図 7.2 のような 1 次元領域分割の場合、通信が必要となる領域は斜線の部分のみであり、その他の部分は通信状態に依存せず処理が可能である。従って、通信と計算を同時に行うこと (通信隠蔽)[23] が可能となる。また、通信隠蔽を行うために PE 間の通信はノンブロッキング通信を用いて行った。

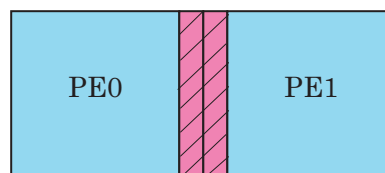


図 7.2: Dependencies of communication between PEs

7.2 並列性能評価

7.1 節で示した並列化手法を用いて、並列性能の評価を行った。本節では PE 毎の計算負荷を一定にして並列ベンチマークを行い、並列化によるスケーラビリティを測定し、大規模問題への適用性を検証した。ここでは、3.6.1 節のキャビティ流れ問題を用いた。

7.2.1 2D9V モデルのスケーラビリティ

1PE あたりの計算量を図 7.3 のように固定 (PE 数を増やした場合、計算領域サイズを PE 数分だけ大きく) し、通信負荷の評価を行った。例えば、図 7.3 の場合、4PE を使用時には計算領域を 4 倍にする¹。ベンチマーク問題として 3.6.1 節のキャビティ流れ問題を用いた。但し、計算条件は表 7.2 とした。尚、 n は使用 PE 数を表す²。

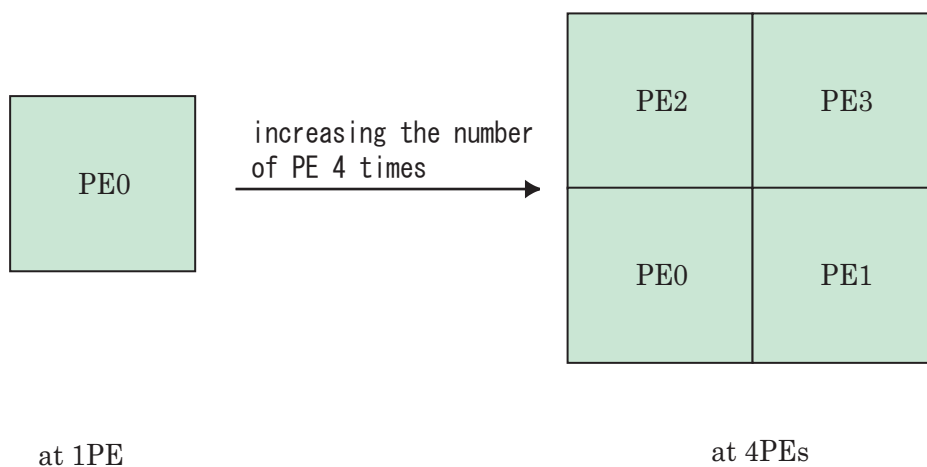


図 7.3: Speed-up ratio of REMIX

図 7.4 は格子点数 $n \times 128^2$, 500 タイムステップ経過時の並列効率である。横軸は PE 数、縦軸はスケーラビリティを表す。実線は理想のスケーラビリティ、

¹並列化のオーバーヘッドが無ければ、1PE 使用時の実行時間と N PE 使用時の実行時間は等しくなる。

²尚、反応多成分拡張法では計算時間は N 成分の場合、一成分の計算時間の約 N 倍となる。また、他の拡張法の計算時間も同様の傾向がある。

表 7.2: Calculation condition of overhead measurement

Single relaxation time	1.265
Lattice size per 1PE	128 × 128
Total lattice size (n PE)	128 × 128 × n
Parallelization	2 dimensional decomposition
Measured time step	500
Number of components	1, 2, 4

元の 2D9V モデルのスケーラビリティ, その他は REMIX による多成分 2D9V モデルのスケーラビリティである. 尚, 本稿ではスケーラビリティを以下の式で定義した. $Totaltime$ は計算時間と通信時間の総和, PE は使用 PE 数, CMP は成分の数を表す.

$$Scalability(CMP, PE) \equiv \frac{Totaltime(CMP, 1)}{Totaltime(CMP, n)} \quad (7.1)$$

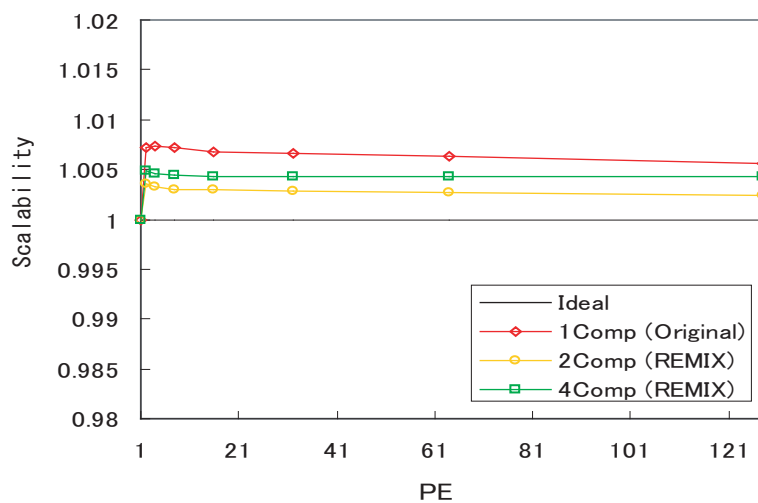


図 7.4: Scalability of REMIX (2D9V)

図 7.4 から任意の成分数に対し、スケーラビリティはほぼ 1 であることが確かめられた³。以上より、2D9V モデルにおいて REMIX は成分数に依存せずに理想的な並列処理が行えることを確認できた。

7.2.2 2D21V モデルのスケーラビリティ

本節では葛原らによる 2D21V モデルに REMIX を適用し並列ベンチマークを行った。2D21V モデルでは仮想粒子の速度が増えるために PE 間の通信量が増加し、また通信の依存関係も 2D9V モデルと比較して大きくなる。本節では 2D21V モデルにおいても REMIX が高いスケーラビリティを保てるかどうかを検証した。ベンチマーク問題として 7.2.1 節のキャビティ流れ問題を用いた⁴。

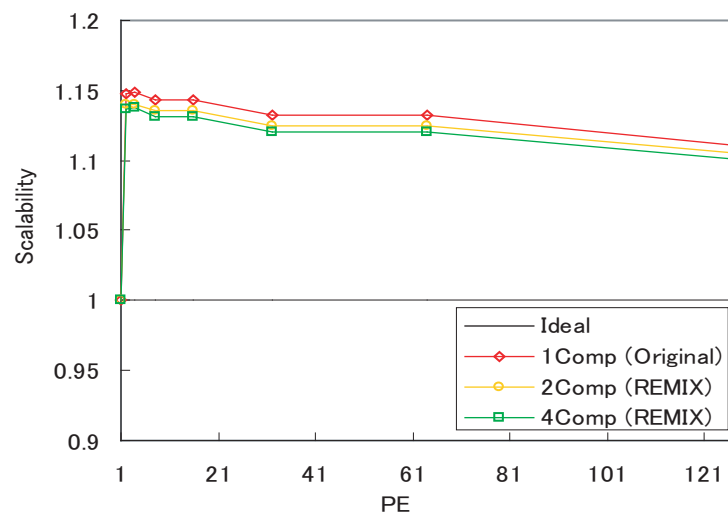


図 7.5: Scalability of REMIX (2D21V)

図 7.5 は格子点数 $n \times 128^2$, 500 タイムステップ経過時の並列効率である。横軸は PE 数、縦軸はスケーラビリティを表す。実線は理想のスケーラビリティ、は元の 2D21V モデルのスケーラビリティ、その他は REMIX による多成分 2D21V モデルのスケーラビリティである。図 7.5 から各成分数とも、スケーラビリティはほ

³Cray T3E では 1PE の時のみ実行時間が長くなる傾向があるため、スーパーニアは見かけ上のものと考えられる。

⁴但し、壁面を等温壁とし解析を行った。

ば1であるとみなせる. 以上より, 2D21V モデルにおいて REMIX は成分数に依存せずに理想的な並列処理が行えることを確認できた.

7.3 まとめ

2D9V モデルおよび 2D21V モデルを用いた並列ベンチマークから REMIX は任意の成分数に対し, スケーラビリティはほぼ1となることが確認できた. このことから REMIX は並列計算機を用いた大規模計算に適していると考えられる. 以上より, REMIX は並列計算機の性能を有効に活用できる混相流解析手法であると言える.

第 8 章

結言

本稿では一成分 LB モデルを多成分流体に拡張する手法を四つ提案した。これらの手法は、従来では扱いが難しい熱を考慮した多成分 LB モデルを一成分 LB モデルから導くことが可能である。各手法の特徴を以下に示す。

- ・多成分拡張法 (Multi-Component Extension Method)
単一緩和係数 (動粘性係数や熱伝導係数に関連するパラメータ) が等しい多成分流体への拡張が可能であり、アルゴリズムは最もシンプルである。また、単相流の流れの可視化に応用可能であると考えられる。
- ・混合多成分拡張 (Mixture Multi-component Extension)
単一緩和係数が異なる多成分流体への拡張が可能である。但し、混合領域では各成分の単一緩和係数は平均化されるため各成分の運動状態を精密に解析することは難しいと考えられる。
- ・多成分相互作用拡張 (Multi-component Interaction eXtension)
単一緩和係数が異なる多成分流体への拡張が可能である。また、成分間の相互作用を正しく考慮可能であり、各成分の詳細な運動を解析することが可能である。

- ・ 反応多成分相互作用拡張 (REaction Multi-component Interaction eXtension)
反応多成分相互作用拡張を反応などによる各成分の質量変化を扱えるよう拡張した手法である。反応による質量変化, 運動量変化, エネルギー変化を扱うことも可能であるが, アルゴリズムは最も複雑である。

これら四つの拡張法を, 適用する問題に応じて使い分けることで高効率な多成分流体解析が行えるものと期待される。¹

8.1 本研究のまとめ

本研究では格子ボルツマンモデルに依存せず, 一成分 LB モデルを多成分 LB モデルに拡張する手法を四つ提案した。これらの拡張手法は従来扱いが難しかった熱を考慮した多成分 LB モデルを容易に導くことが可能であり, 各物理量保存を考慮することができる。また, 従来手法では扱いが難しい各成分の対流と分子拡散による混合を同時に解析することが可能である。以上より, 本研究では LBM において混和混相流を解析する手法を開発し, LBM を用いた混和混相流解析を行うことができた。

8.2 今後の展望

本研究で提案した一連の拡張法は混和多成分流体モデルへの拡張であり, 反応性流体解析などへの応用や並列計算機を用いた大規模数値計算への適用が期待される。今後, 非混和多成分流体解析への拡張手法を検討する予定である。

¹尚, 適用する問題において四つの手法の選択が難しい場合, 反応多成分相互作用拡張を用いるのが良いと考えられる。但し, 各手法とも表面張力が顕著に存在する問題には適用できない。

第 9 章

Appendix A 代表物理量と無次元化

格子ボルツマン法 (LBM) は格子ガス法を基に発展した経緯があり, 物理量は Cellular Automata Unit (CA) と呼ばれる無次元数で表されるのが一般的である. しかし, LBM を工学的に応用する場合, 物理量は SI(CGS) 単位系である方が有用であることも多い. 本章では LBM 研究者が提唱している三通りの LBM の有次元物理量の扱い方を紹介する.

9.1 有次元解析

各物理量を規格化せず, 有次元物理量を用いた解析を行う手法である [17]. 尚, 仮想粒子速度 (タイムステップサイズと格子間隔に依存) は, 流れ場の代表流速よりも十分に大きい限り, 任意の値を取ることが可能である¹. この任意の仮想粒子速度は, 通常妥当な解が得られる値を探し, 経験的に決定する必要がある.

9.2 微視的な物理量での無次元化

微視的な物理量を基準として CA を CGS 単位系に変換する方法である [18]. 各代表物理量の算出方法を表 9.1 に示す.

ここで, L は計算領域の代表長さ [cm], N は格子点数, m は単位体積 [cm^3] あたりの質量 [g], n は単位体積中の粒子数 [cm^{-3}], ε は有次元のエネルギー [$\text{g} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-2}$],

¹この議論は Jian Guo Zhou 博士とのプライベートコミュニケーションからの抜粋である.

表 9.1: Normalization based on microscopic physical quantities

Quantities	Reference quantities
Length S_l [cm]	$S_l = L[\text{cm}]/N$
Time S_t [s]	$S_t = c_s \cdot \Delta x[\text{cm}]/C_s[\text{cm} \cdot \text{s}^{-1}]$
Mass S_m [g]	$S_m[\text{g}] = m [\text{g}]$
Number of particle S_n	$S_n = n[\text{cm}^{-3}] \cdot S_l^3[\text{cm}^3]/(b \times d)$
Energy S_e [g · cm ² · s ⁻²]	$S_e = m[\text{g}] \cdot S_l^2[\text{cm}^2]/S_t^2[\text{s}^2]$
Pressure S_p [g · cm ⁻¹ · s ⁻²]	$S_p = \varepsilon[\text{g} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}]/S_l^3[\text{cm}^3]$
Temperature S_T [K]	$S_T = \varepsilon[\text{g} \cdot \text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-2}]/K_b[\text{cm}^2 \cdot \text{g} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}]$

K_b はボルツマン定数 [$\text{cm}^2 \cdot \text{g} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$] であり, b, d は仮想粒子速度の速さと方向を表す. また, C_s は音速の実測値 [$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$], c_s は無次元の格子音速 (理論上の音速) であり密度の微小擾乱の伝播の速さを表す. 尚, c_s は格子ボルツマンモデルによって異なるが, 一般的に

$$c_s = \frac{\Delta x}{\Delta t \sqrt{D}} \quad (9.1)$$

である. Δx は格子間隔 (無次元), Δt は時間間隔 (無次元), D は空間次元数である. 規格化物理量を微視的スケールに合わせているため, 格子間隔および時間間隔は非常に小さくなるためミクロスケールの解析に適している².

9.3 巨視的な物理量での無次元化

マッハ数 Ma が 0.1 以下程度の遅い流れの場合, 巨視的な物理量で規格化を行う手法である [19]. 代表長さ及び代表時間とは独立して, 代表速度を仮想粒子速度で規格化するのが特徴である. これは $\text{Ma}=0.1$ 程度の流れ場の場合, 音速程度で運動している仮想粒子を長い時間スケールで観測すると非圧縮性流体に近似できる (仮想粒子の詳細運動を時間方向および空間方向で省略可能である) という考えに基づ

²この議論は Sauro Succi 博士, 林 秀光博士とのプライベートコミュニケーションからの抜粋である.

いている³. 表 9.2 に代表的な規格化物理量を示す.

表 9.2: Normalization based on macroscopic physical quantities

Quantities	Reference quantities
Length S_l [m]	$S_l = L$ [m]
Time S_t [s]	$S_t = L$ [m]/ U [m · s ⁻¹]
Velocity S_v [m · s ⁻¹]	$S_v = c$ [m · s ⁻¹]
Density S_ρ [kg · m ⁻³]	$S_\rho = \rho_0$ [kg · m ⁻³]
Pressure S_p [kg · m ⁻¹ · s ⁻²]	$S_p = \rho c^2$ [kg · m ⁻¹ · s ⁻²]
Temperature S_T [K]	$S_T = T_0$ [K]
Dynamic viscosity S_ν [m · s ⁻¹]	$S_\nu = c \cdot L$ [m · s ⁻¹]
Thermal conductivity S_k [m · kg · s ⁻² · K ⁻¹]	$S_k = \rho_0 \cdot C_p \cdot c \cdot L$ [m · kg · s ⁻² · K ⁻¹]

ここで L は流れ場の代表長さ, U は代表速さ (最大速さ), c は粒子速度, ρ_0 は代表密度, T_0 は代表温度を表す. 通常の代表物理量により規格化をしているため, 対象としている空間および時間間隔を大きく取ることができるという利点がある⁴.

³この考えを基にした S 展開により格子ボルツマン方程式から非圧縮ナビエ・ストークス方程式を導くことができる [19].

⁴この議論は稲室 隆二教授とのプライベートコミュニケーションからの抜粋である.

第 10 章

Appendix B FLUENT の検証

格子ボルツマン法の数値解検証に用いた Fluent 社の有限体積流体解析ソルバー FLUENT を検証する。本章では FLUENT の数値解を解析解および実験と比較し、妥当性を検証した。解析解の検証ではクエット流れ及び熱伝導問題を用いた。実験による測定値との比較には石川県地域産官学連携豊かさプロジェクト「ほっとメルト」の汚泥溶融炉を用いた。

10.1 解析解による検証

10.1.1 クエット流れ

熱流動の解析解を求めることは難しいため、熱流動問題を非熱流体解析と熱伝導解析に分けて検証を行う。クエット流れは図 10.1 のような剪断流れであり、上壁は水平方向に速度 U で移動し下壁は静止している。また、左右は周期境界となっている。この時解析解は

$$U(y) = U \times y/10 \quad (10.1)$$

となり、水平方向流速は垂直方向座標に線形比例する。

計算領域 $10[\text{m}] \times 100[\text{m}]$ 、非構造 4 角形要素を用い壁近傍には境界層を設け要素数は 5,600 とした。解析は FLUENT6.1.22 で行い浮動小数点精度は倍精度とし、速度は一次風上差分、速度及び圧力補正は SIMPLE 法を用いた。上壁は $+x$ 方向に $1.460735 \times 10^{-4}[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]$ で移動、下壁は静止、左右は周期境界とした。また、物

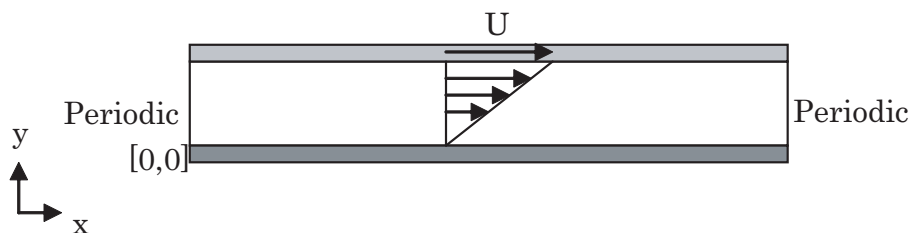


図 10.1: Couette flow

性値は空気を用い密度 $1.225[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$, 粘性係数 $1.7894 \times 10^{-5}[\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}]$ とした。この時のレイノルズ数 Re は 100 である。図 10.2 は定常状態の水平方向流速をプロットしたものであり、縦軸は垂直方向座標、横軸は水平方向の流速を表す。実線は解析解 [22], 点は FLUENT による数値解を表す。解析解と数値解の平均相対誤差は 10^{-12} であり FLUENT の数値解は妥当であると言える。

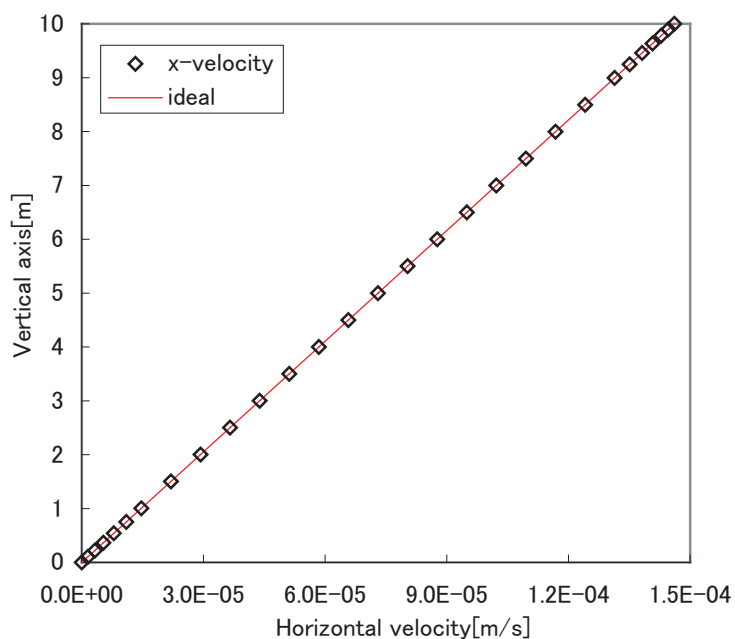


図 10.2: Horizontal velocity at $x = 50$

10.1.2 熱伝導問題

熱対流問題は解析解との比較が困難であるため，流体中の熱伝導のみの解析を行い解析解との比較を行った．計算領域は図 10.3 の一辺の長さ $L = 100[\text{m}]$ の正方形領域であり，流体は固定壁の中に存在する．この時の温度分布の解析解は左壁の温度を T_{\min} ，右壁の温度を T_{\max} とすると以下の式で表される．

$$T(x) = T_{\min} + x(T_{\max} - T_{\min})/L \quad (10.2)$$

尚，無重力下における非圧縮性流体を仮定しているため熱による対流は生じない．

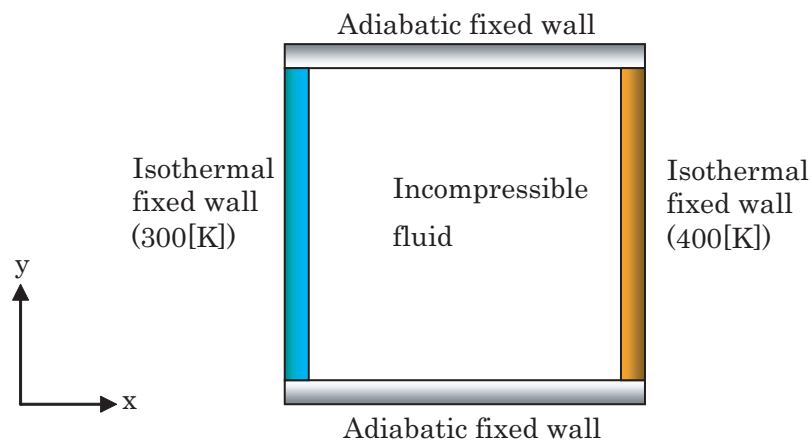


図 10.3: Thermal conductivity

計算領域は $100 \times 100[\text{m}]$ ，非構造 4 角形で要素数 10,000 とした．解析は FLUENT6.1.22 で行い浮動小数点精度は倍精度とし，速度及び温度は一次風上差分，速度及び圧力補正には SIMPLE 法を用いた．左壁は $300[\text{K}]$ の冷却壁，右壁は $400[\text{K}]$ の加熱壁，上下壁は断熱壁とした．また，重力及び輻射は考慮せず熱伝導のみの解析を行った．また，物性値は空気を用い密度 $1.225[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$ ，粘性係数 $1.7894 \times 10^{-5}[\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}]$ とした．図 10.4 は定常状態における y 軸中心 ($y = 50$) における温度分布であり，実線は解析解，点は FLUENT による数値解を表す．FLUENT の数値解は定量的に解析解と一致することが確認できた．

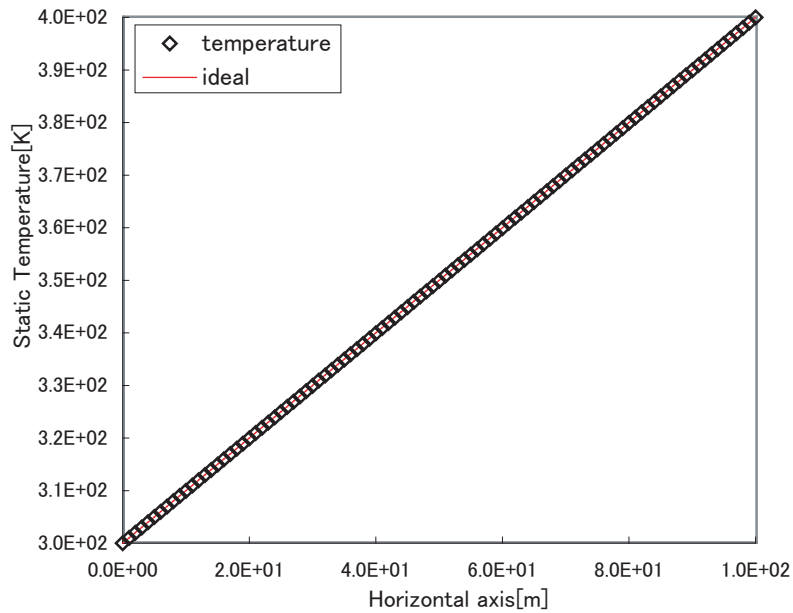


図 10.4: Static temperature at $y = 50$

10.1.3 まとめ

クエット流れ解析では FLUENT の数値解は解析解と定量的に同じ結果が得られることが確認できた。また、熱伝導解析においても FLUENT の数値解は解析解と定量的に同じ結果が得られることが確認できた。以上より FLUENT の妥当性を確認することができた。

10.2 実験結果との比較

10.2.1 測定機器

流速の測定には単孔式ピトー管を用いた。図 10.5 はピトー管先端部の拡大図である。測定孔の直径は 12[mm]、ピトー管係数は 0.852 である。また、流速の測定範囲は $0.1 \sim 100.0[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]$ 、測定精度は小数点 1 桁であるため測定値には最大 $\pm 0.05[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]$ の誤差が含まれると考えられる。また、流速測定値は測定孔断面積で平均化されている。

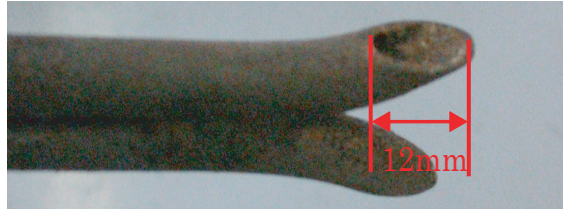


図 10.5: Pitot tube

10.2.2 測定条件

炉全体図を図 10.6 に示す. 常温の空気を炉内に流入させ, 炉内の流速分布の測定を行う. 尚, 流速分布測定は以下の条件で行った.

- ・ 炉内温度: 常温 (約 285[K])
- ・ 流入条件: 図 8 の A から常温の空気を流入
 - 流入量 132 と 182 [$\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$] の 2 通り
- ・ 流出境界: 図 8 の D から自由流出
- ・ その他: 全ての出口を閉鎖

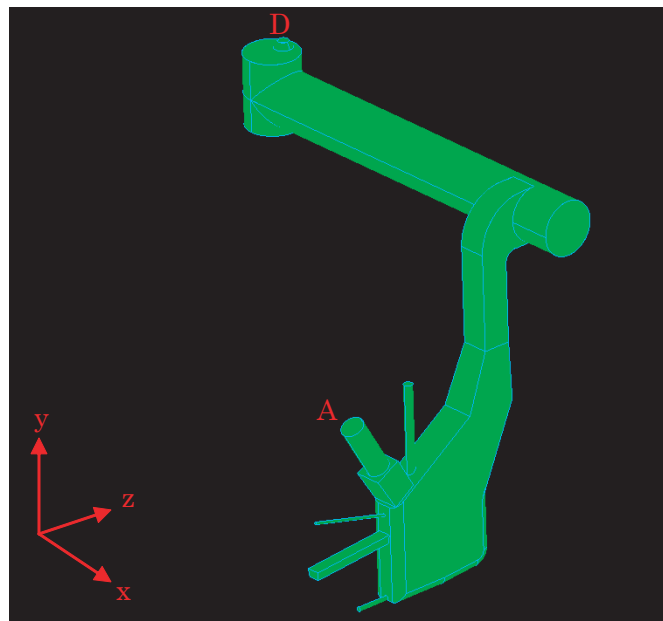


図 10.6: Overview of plant

- ・流速測定箇所

流速分布測定は図 10.7 の枠で囲った部分で行った.

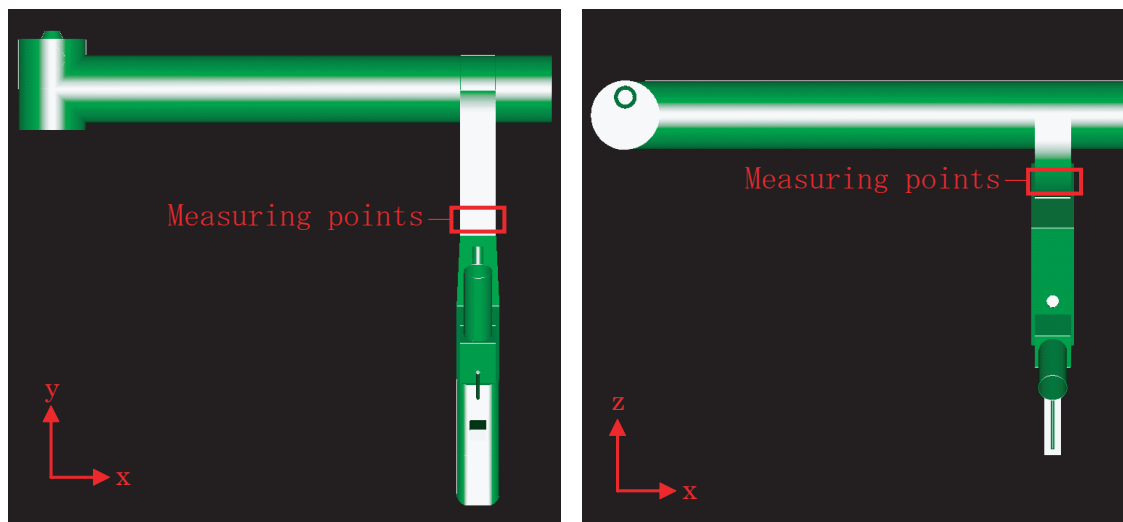


図 10.7: Measuring points

また，測定箇所の詳細を以下に示す.

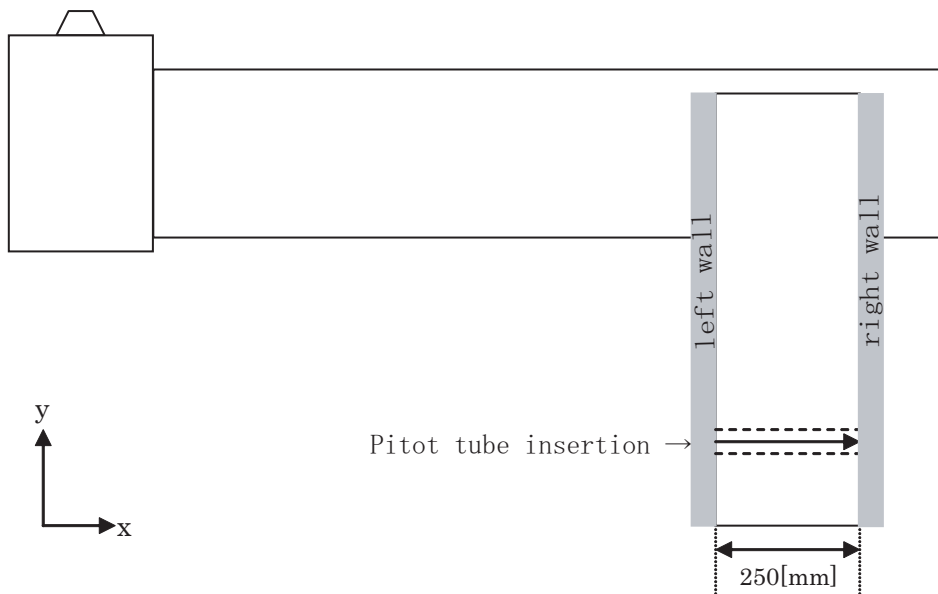


図 10.8: Details of measuring points

10.2.3 数値解析条件

解析形状は図 10.6 に示した実形状を用いた。図 10.6 のノズル A を空気流入ノズルとし、ノズル D を自由流出として解析を行った。メッシュ生成には Pointwise 社の Gridgen 15 を用いて非構造 4 面体メッシュを生成し、壁面近傍に境界層メッシュを設けた。要素数は約 160 万、節点数は約 30 万点である。解析には FLUENT 社の汎用有限体積ソルバー FLUENT6.1.22 を用いた。浮動小数点精度は単精度とし、速度（及び温度）は一次風上差分、速度及び圧力補正には SIMPLE 法を用いた。また、熱を考慮しない非定常非圧縮性流体の非定常解析を行った。乱流モデルには SGS モデルを用いスマンゴリンスキー定数 $C_s = 0.1$ とした。流体密度 ρ は $1.225[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$ 、粘性係数は $1.7894 \times 10^{-5}[\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}]$ とした。ノズル A からの流入量は $132[\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}]$ （流入速度 $1.16[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]$ ）と $182[\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}]$ （流入速度 $1.60[\text{m} \cdot \text{s}^{-1}]$ ）の 2 通りを検討した。

10.2.4 測定結果と数値解の比較

i) 空気流入量 $132[\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}]$ の時

図 10.9 は空気流入量が $132[\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}]$ の時の流速分布比較である。縦軸は y 軸方向の流速、横軸は x 軸方向の測定位置を表す。また、* は数値シミュレーション結果、丸は測定結果を表す。中心付近で若干のずれが認められるが、壁面付近の流速は良く一致している。この時の数値解と測定値の誤差は平均 12.7% である。

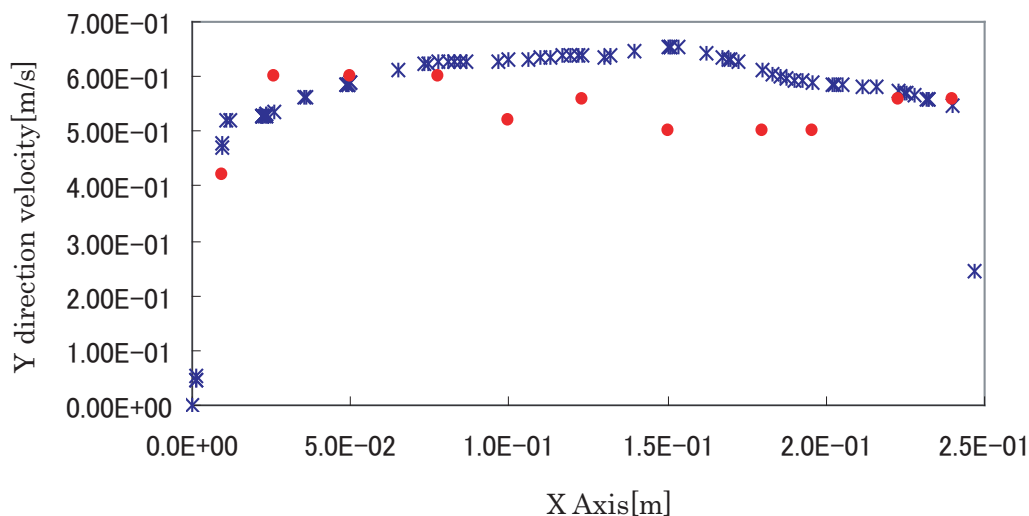


図 10.9: Comparison of experimental and CFD (Mass flow inlet $132[\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}]$)

ii) 空気流入量 $182[\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}]$ の時

図 10.10 は空気流入量が $182[\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}]$ の時の流速分布比較である。縦軸は y 軸方向の流速、横軸は x 軸方向の測定位置を表す。また、* は数値シミュレーション結果、丸は測定結果を表す。中心付近で若干のずれが認められるが、壁面付近の流速は良く一致している。この時の数値解と測定値の誤差は平均 14.1% である。

以上より、測定値と数値解の比較において壁面付近の流速が左右で異なる点が定性的に再現できていることが確認できた。尚、燃焼室中心付近で若干のずれが認められた。測定値と数値解の誤差は平均 1 割弱であったことから FLUENT による数値解は妥当であると考えられる。誤差の主な発生要因として、測定値側ではピトー管の測定精度及び空気流入速度の時間変動が考えられる。また実プラントは観測のための孔があり、これがリークの原因となり流速が減少している可能性が

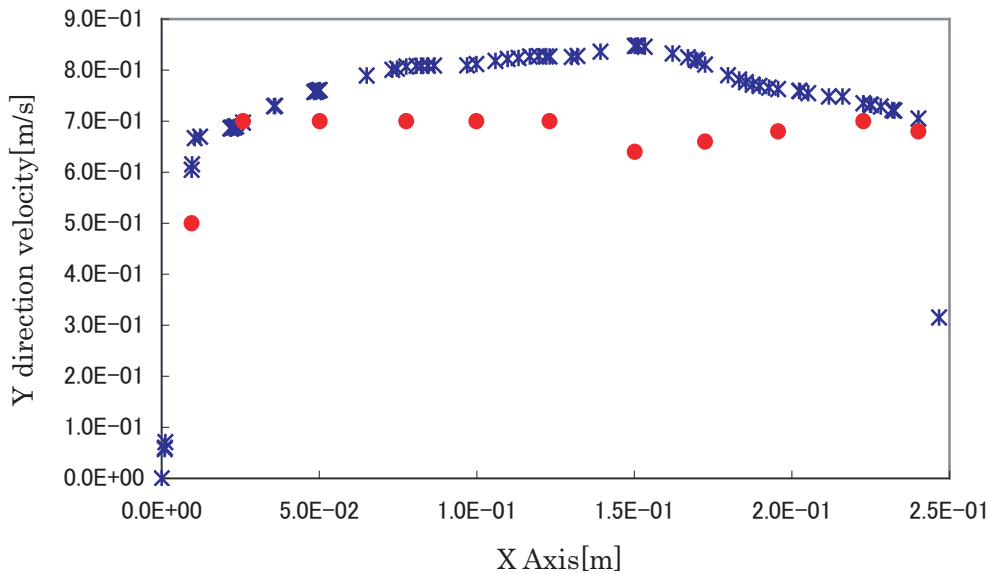


図 10.10: Comparison of experimentals and CFD (Mass flow inlet $182[\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}]$)

考えられる。また、数値解側では燃焼室中心付近におけるメッシュが粗いことが原因と考えられる。

10.3 まとめ

FLUENT の数値解を解析解と比較した結果、定量的に解析解と一致することが確かめられた。また、FLUENT の数値解を実験による測定値と比較した結果、流速分布を定性的に再現できていることが確かめられた。以上の結果から、FLUENT は数値解検証用ソルバーとして信頼性が高いと考えられる。

謝辞

本研究を行なうにあたり、終始御指導を賜った松澤 照男教授に深謝致します。また、多数の貴重な御助言を頂いた京都大学大学院工学研究科の稲室 隆二教授、神戸大学大学院自然科学研究科の蔦原 道久教授、株式会社豊田中央研究所の林 秀光博士、産業技術総合研究所の高田 尚樹博士、Istituto per le Applicazioni del Calcolo の Sauro Succi 博士、University of Leicester の Jian Guo Zhou 博士に深く感謝致します。

本論文をまとめるにあたり有益な御助言、御審査を頂いた、東北大学大学院情報科学研究科(本学客員教授)堀口 進教授、中央大学理工学部の檜山 和男教授、本学情報科学研究科の井口 寧助教授、富山大学工学部の瀬田 剛先生に深く感謝致します。

また、溶融炉の流速分布測定を行うにあたり御協力を頂いた株式会社アクトリーの増井 芽様、金沢大学の坂野 健夫博士に感謝致します。

最後に本研究を行うにあたり、様々な御支援を頂いた松澤研究室の皆様、家族に御礼申し上げます。

参考文献

- [1] Shiyi Chen and Gary D. Doolen, "LATTICE BOLTZMANN METHOD FOR FLUID FLOWS", *Annual Review Fluid Mechanics*, Vol.30, pp329-364, (1998).
- [2] Xiaowen Shan, Hudoung Chen, "Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components", *Physical Review E*, Vol.47, pp.1815-1819, (1993).
- [3] 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, pp.5041-5052, (1996).
- [4] Richard Holme, Daniel H. Rothman, "Lattice-Gas and Lattice Boltzmann Models of Miscible Fluids", *Journal of Statistical Physics*, Vol.68, pp.409-429, (1992).
- [5] E.G.Flekkøy, "Lattice Bhatnagar-Gross-Krook models for miscible fluids", *Physical Review E*, Vol.47, pp.4247-4257, (1993).
- [6] S.Ponce Dawson, S.Chen, and G.D.Doolen, "Lattice Boltzmann computations for reaction-diffusion equation", *Journal of Chemical Physics*, Vol.98, pp.1514-1523, (1992).
- [7] DANIEL H. ROTHMAN, STEPHANE ZALESKY, "Lattice-Gas Cellular Automata", Cambridge University Press, (1997).
- [8] キッテル,(斎藤 信彦, 広岡 一共訳), "統計物理", サイエンス社, (1977).
- [9] SHULING HOU AND QISU ZOU, SHIYI CHEN, GARY DOOLEN, AND ALLEN C. COGLEY, "Simulation of Cavity Flow by Lattice Boltzmann

- Method”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 118, pp.329-347, (1995).
- [10] 日本機会学会・編, ”原子・分子の流れ”, 共立出版株式会社, pp.31-32, (1996).
- [11] 加藤 恭義, 光成 友孝, 築山 洋, ”セルオートマトン法”, 森北出版株式会社, (1998).
- [12] 蔦原 道久, 高田 尚樹, 片岡 武, ”格子気体法・格子ボルツマン法”, コロナ社, pp.99-120, (1999).
- [13] Dieter A. Wolf-Gladrow, ”Lattice-Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann Models”, Springer, (2000).
- [14] U.Ghia, K. N. Ghia and C. T. Shin, ”High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method”, *Journal of Computational Physics*, Vol.48, pp.387-411, (1982).
- [15] DAVID R.NOBLE, JOHN G.GEORGIADIS AND RICHARD O.BUCKIUS, ”COMPARISON OF ACCURACY AND PERFORMANCE FOR LATTICE BOLTZMANN AND FINITE DIFFERENCE SIMULATION OF STEADY VISCOUS FLOW”, *International Journal For Numerical Methods In Fluids*, Vol.23, pp.1-18, (1996).
- [16] Takaji Inamuro, Masato Yoshino, Hiroshi Inoue, Riki Mizuno and Fumimaru Ogino, ”A Lattice Boltzmann Method for a Binary Miscible Fluid Mixture and Its Application to a Heat-Transfer Problem”, *Journal of Computational Physics*, Vol.179, pp.201-215, (2002).
- [17] Jian Guo Zhou, ”Lattice Boltzmann Methods for Shallo Water Flows”, Springer, (2004).
- [18] Sauro Succi, ”The Lattice Boltzmann Equation”, Oxford Science Publications, (2001).
- [19] 稲室 隆二, ”格子ボルツマン法”, *物性研究* 77-2, 京都大学 物性研究刊行会, pp.197-232, (2001).

- [20] 植田 利久, "反応系の流体力学", コロナ社, (2002).
- [21] 神部 勉, "流体力学", 裳華房, (1995).
- [22] 巽 友正, "連続体の力学", 岩波書店, (1995).
- [23] P. パチェコ著, 秋葉 博訳, "MPI 並列プログラミング", 培風館, (2001).

本研究に関する発表論文

[I] 査読付き論文

- 廣川 雄一, 松澤 照男, ”格子ボルツマン法の多成分拡張法”, 日本計算工学会論文集, Vol.6, pp.99-108, 2004.5.
- 廣川 雄一, 松澤 照男, ”格子ボルツマン法の混合多成分拡張法”, 日本計算工学会論文集 (投稿中).
- 廣川 雄一, 松澤 照男, ”格子ボルツマン法の多成分相互作用拡張”, (投稿準備中).
- 廣川 雄一, 松澤 照男, ”格子ボルツマン法の反応多成分相互作用拡張”, (投稿準備中).

[II] 国際会議発表論文

- Yuichi Hirokawa, Teruo Matsuzawa, ”An Evaluation of Advanced Multi-Components, Expansion Method of LBM on Parallel Computer”, HPC-Asia 2004, 2004.7.

[III] 研究会・口頭発表等

- 廣川 雄一, 増井 芽, 松澤 照男, ”FLUENT を用いたプラント内の熱流動解析”, 第 17 回数値流体力学シンポジウム, 2003.12.
- 廣川 雄一, 松澤 照男, ”多成分拡張法を用いた格子ボルツマン法による二成分流体解析”, 第 16 回数値流体力学シンポジウム, 2002.12.
- 廣川 雄一, 松澤 照男, ”格子ボルツマン法の多成分拡張法の提案”, 第 28 回北陸流体力学研究会, 2002.3.

- 廣川 雄一, 松澤 照男, ”格子ボルツマン法による 2 相流シミュレーション”, 第 15 回数値流体力学シンポジウム, 2001.12.
- 廣川 雄一, ”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修士論文, 2002.
- 小島 正樹, 廣川 雄一, 松澤照男, ”廃棄物処理溶融炉の実形状を用いた燃焼流れ解析”, 第 18 回数値流体力学シンポジウム, 2004.12.
- 林 亮子編, ”JAIST における並列計算機および計算サーバ利用研究 (2003 年度)”, 北陸先端科学技術大学院大学 附属図書館所蔵 情報科学研究科テクニカルメモランダ, 2004.10.