第 7 章　結 論

格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method, LBM)[1]は, 流体を衝突と並進(移動)を繰り返す多数の流体粒子の集合体と捉える流れの数値計算法であり, 並列計算処理に適した単純なアルゴリズム, 粒子運動に単純なルールを加えることにより複雑な境界(多孔質物体内部, 混相流中の界面)を有する流れを計算できるなどの長所を持つ. 本研究は, このように数値計算法として優れた LBM をより幅広く適用することを念頭に置き, これまで大きく別けて以下の 2 つの項目に沿って進められた. その一つは LBM をより複雑な実際の流れ解析へ適用することを進めるために必要となる境界条件の設定の検討である. もう一方は, 近年提案された圧縮性を考慮できる熱流体モデルでは実際の流れの計算例が少なくモデルの検討も十分でないことから, LBM を圧縮性の効果が現れる流体運動の解析に適用するために, 現在の熱流体モデルが有する問題を解決するための新しい計算方法ならびに粒子分布モデルを提案し, これを理論的側面と流れの数値解析の結果の側面から検討することである.

上記を考慮して得られた LBM の流体運動の数値解析に関するいくつかの知見を以下で述べる.

(1) 非圧縮性流体解析 (第 3 章)

これまでは主に解の妥当性を検討するための簡単な流れの計算が行われてきたことに注目して, LBM をより複雑な実際の流れ解析へ適用することを進めるために必要となる境界条件の設定を検討することを目的とし, 局所平衡分布関数を用いる簡潔な境界条件の設定方法を提案した. まず, この設定方法による固体壁および流出入境界に対する境界条件の妥当性を検討するために 2 次元正方 Cavity 流れや平面 Poiseulli 流れ等の計算を行い, その結果を差分法によるものと比較して良い一致を確認した. 以上の境界条件の妥当性を踏まえて, 2 次元回転円柱周りの非圧縮粘性流れの計算を行った. 流れ場の時間発展に関して本計算結果は同様の差分解と良く一致し, 本境界条件が適切であることがわかった.

次に, LBM では近年圧縮性を考慮できる流れ解析のモデルが提案されその有効性の検討が行われているが、実際の流れの計算例が少なくモデルの検討も十分でないことから、次に LBM を圧縮性の効果が現れる流体流れの解析に適用することを目的とし, 以下の知見を得た.

(2) 簡潔化された局所平衡分布関数の提案 (第 4 章)

従来の格子 BGK モデルでは複雑な局所平衡分布関数を用いて衝突演算が行われていた．この関数は粒子の運動方程式から Navier-Stokes 方程式が導出できるように決められているが，その条件を上回る数のパラメータが存在するためにいくつかの任意の仮定を導入しなければならなかった．これに対して本研究では低 Mach 数流れにおける Maxwell 分布の展開式を基礎にして一意的に決定できる簡潔な構造の関数を提案し，局所平衡分布の計算手順の短縮を進めた．この平衡分布関数を持つ粒子分布を用いた衝撃波管問題や Couette 流れ等いくつかの簡単な流れの数値計算では，モデルの持つ粘性や音速等の理論値が計算値と一致し，Navier-Stokes 方程式の差分解や理論解に対しても良好な結果が得られて，簡潔化された平衡分布関数とその粒子分布モデルは流れの計算に有効であることを確認した．

(3) 非定常衝撃波の反射・回折を伴う流れ場の数値解析 (第 5.2・5.3・5.4 節)

格子ボルツマン法では，これまでは主にモデルを検討するため簡単な流れ場しか扱っていなかった．本研究では流れの解析の一例として楔を通過する平面衝撃波の反射および疑似穿孔壁を有するトンネル内の衝撃波の減衰を取り上げ、本結果と実験や数値解との比較から LBM が定性的に衝撃波の伝播や反射の現象を良く表すことがわかった．

(4) 3 次元熱流体モデルの提案および流れの数値解析 (第 4.3・5.5・5.6 節)

3 次元熱流体モデルはすでに提案されているが，実際には流れの計算へ適用されておらず，負の数密度を持つ粒子分布を含んでいた．本研究では(1)の局所平衡分布関数を用いた 3 次元モデルを新たに提案してこの点を改善し，3 次元 Cavity 流れおよび立方体を通過する衝撃波の非定常反射について適切な計算結果を得た．

(5) 計算可能な温度領域の制限緩和の提案 (第 6.2 節)

LBM では格子形状に合わせて粒子速度を離散化しており移動方向およびスピードの種類とも有限の数で構成されている．このために粒子運動により表現され得る流れ場の温度の領域は制限される．この計算可能な温度領域はすべての種類の粒子数密度が正の値を持つ領域に相当し，その定義を外れて負になる場合解は発散する．温度の制限を緩和するためには粒子の速度を大きく取る限定されることから，その領域が異なる 2 種類の粒子分布モデルを組み合わせた複合モデルを提案し，衝撃波管問題の数値計算で本計算法がより幅の広い温度領域に適応できることが示された．

(6) 内部自由度を有する格子 BGK モデルの提案 (第 6.3 節)

従来の LBM において粒子運動は並進のみを考慮していたため扱い得る流体の比熱比は一定であった．回転運動を考慮した内部自由度を持つモデルの提案で，比熱比を変更できるようになった．本モデルではこれまでと同様の方法によって流れの支配方程式を導出し，これが Navier-Stokes 方程式と一致することを確認している．本内部自由度モデルでは並進以外の運動エネルギーが衝突によって粒子分布と同様の傾向で平衡状態に向かって緩和すると仮定している．これにより，従来使用していた計算手順を変更せず，かつ局所平衡分布関数をほとんど変更すること無しに内部自由度を考慮し比熱比を変更することができるという利点を持つ．また，従来の粒子の運動方程式に新たにエネルギー分布の時間発展式を加えることにより内部自由度を実現するため，局所平衡分布関数は本研究で用いる簡潔化された形式の関数に限らず,あらｙ屡種類の分布関数にも応用できる．ただし，本モデルでも Prandtl 数はこれまで同様 1 であり，変更はできない．

(7) 緩和時間の局所的変更による数値振動の抑制 (第 6.4 節)

低粘性の非定常衝撃波流れで解の発散を起こす数値振動は，局所的に平衡緩和時間を大きくとることで解を鈍らせず抑制できることを衝撃波管流れの数値計算において確認した．緩和時間の変更は，局所的な粒子の非平衡数密度の絶対値から判断され，ある一定量以上の非平衡量が観測された場合に対して適用される．この方法は，LBM が持つ粒子運動の演算の局所性を利用したものであり，簡潔な数値振動の抑制を与える．ただし，緩和時間の変更は空間の解像度の変更を意味しており，大幅な変更は逆に歪んだ解をもたらす可能性をはらんでおり，緩和時間は小さな範囲内で変更されるべきである．

(8) Holway 方程式に基づく格子 BGK モデルの提案 (第 6.6 節)

Boltzmann 方程式を衝突項に関してモデル化した BGK 方程式を内部自由度を持つ多原子分子気体へ拡張したも Holway 方程式に基づき，内部自由度を考慮可能な粒子分布モデルを提案した．これを用いた衝撃波管流れの計算において，数値的安定性を確認した．今後は更なる詳細なモデルの検証と巨視的な流れのエネルギー方程式を導出する必要がある．

以上の熱流体格子 BGK モデルに関する提案のほかに，空間の離散化に関しても次

のような提案を行った.

(9) 非一様性空間格子の提案 (第 6.5 節)

LBM におけるこれまでの格子形状は，規則的な粒子運動の反復を考慮して格子気体セル・オートマトン法から引き続いて全空間に一様に分布し同じ大きさを持っている．正三角形格子や正方格子などによる単純な空間離散化では境界適合格子や空間解像度の局所的変更に対応できず，その結果 LBM を工学的に興味のある流れの解析へ適用することが困難であった．この問題を解決するために近年有限体積法を取り入れた自由な格子分布の選択に関する研究が行われている．本研究でも，相似性を有する複数のサイズの格子を組み合わせた複合格子による局所的空間解像度の変更を提案した．この格子による計算の一例として Couette 流れを取り上げ, Navier-Stokes 解に一致する適切な解を得ることができた．ただし，格子サイズが変わる場所で解にわずかながら不連続性が見られることから，より滑らかな解を得るためには粒子数密度についてより高次精度の補間法の適用が必要と考えられる.

以上の各項目における結論から，本研究において格子ボルツマン法を用いた非圧縮流体ならびに熱の影響を考慮した流体運動の数値解析に必要な知見を得ることができ，上述の提案により LBM を実際に適用する流れ場の対象領域が広がったと考えられる．尚, LBM では音速より十分小さい流速を仮定した平衡分布が与えられることから計算対象となる流れは亜音速領域にあり，本研究の計算でも背後の流速が亜音速になる弱い非定常衝撃波流れを取り扱い，適切な圧力や温度変化等を得た.

ただし，知見(6)でも指摘したように，格子ボルツマン法で模擬できる流れにはまだ制約があり提案したモデルも十分ではない．また，流れ場の数値解析結果では，衝撃波が接する固体壁面上の圧力分布や密度勾配について実験や他の数値解では現れない現象が確認されている．本来格子ボルツマン法が得意とする混相流解析への適用を進める上でも，今後も本計算法における境界条件や粒子運動のモデル化の更なる検討が望まれる.