

分子気体論による圧縮性乱流の計算

東京電機大 桜井 明 (Akira Sakurai)

いわき明星大 高山文雄 (Fumio Takayama)

1 序

分子気体論は元来、粘性係数などの流体諸定数の導出や稀薄気体の流れなど分子的構造が目立つものに使われてきたが、その後の方法論の進展に伴い巨視的な流れの計算にも応用される様になってきた(例えば文献 [1],[2])。さらに近年には、Micromachine 内の流れなど Navier-Stokes 式での計算が出来ない、あるいは原理的には出来るであろうが実際は差分近似の関係などで計算が困難、はては出来るが計算量でコスト的に問題なものなどに対しての分子論の方法の有効性が注目され始めている。ここではこの様な観点からその乱流の直接計算への応用を考える。この場合、この問題の Navier-Stokes 式による計算では周知のように流れ場の複雑化に見合う差分近似の精度保持の困難性があるのに対して分子流モデルでは Boltzmann 方程式の積分形が利用できるのもので、そのような困難が少ない事が予想される。但し、分子モデルは本質的に気体運動の記述を目的としているため圧縮性乱流の計算に拘る所以である。ここでは研究の第一歩として、乱流場の基本的問題である渦の消長の問題について考える。但し圧縮流では渦に伴い衝撃波が発生しその結合 (eddy shocklet) の消長が問題となる。具体的には Taylor-Green 型の初期値問題を計算する。

2 分子気体論モデル

分子論モデルとしては Boltzmann 式、分子動力学 (MD)、モンテ・カルロ法、——など色々ありうるが、ここでは、 $f(\mathbf{c}, \mathbf{x}, t)$ をある場所 $\mathbf{x}=(x, y, z)$ 、時間 t における分子速度 $\mathbf{c}=(c_x, c_y, c_z)$ に対する分子速度分布関数、 F は外力、 $\frac{\partial_e f}{\partial t}$ は衝突項として、Boltzmann 方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} + F \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} = \frac{\partial_e f}{\partial t} \quad (1)$$

を用いるが、乱流場のような細かい変化に対し、差分近似をさけるため、その特性曲線に沿う微小時間 Δt での積分形で外力のない場合、

$$f(\mathbf{c}, \mathbf{x} + \mathbf{c}\Delta t, t + \Delta t) - f(\mathbf{c}, \mathbf{x}, t) = \Delta t \frac{\partial_e f}{\partial t}, \quad (2)$$

を用いる。この式は実は Boltzmann 方程式を導く際の粒子数保存則であって ($F \neq 0$ の場合も同様)、事実そこで $\Delta t \rightarrow 0$ の極限で Boltzmann 式 (1) がえられる (例えば文献 [3])。なお (2) の使用の実際では $\mathbf{x} + \mathbf{c}\Delta t \rightarrow \mathbf{x}$ と変換して

$$f(\mathbf{c}, \mathbf{x}, t + \Delta t) = f(\mathbf{c}, \mathbf{x} - \mathbf{c}\Delta t, t) + \Delta t \frac{\partial_e f}{\partial t} \quad (3)$$

の形にして、 t におけるデータから $t + \Delta t$ での値を求める形にする。

衝突項 $\frac{\partial_e f}{\partial t}$ には主に BGK モデルを用いるが比較のため、一部 DBE モデルも用いる。それらは、

BGK モデル:

$$\frac{\partial_e f}{\partial t} = \nu(f_0 - f),$$

$$\nu = \frac{1}{\mu} p, \quad (\text{collision frequency, } \mu : \text{粘性係数}), \quad f_0 = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{n/2}} e^{-C^2/2RT},$$

$$\mathbf{C} = \mathbf{c} - \mathbf{u}, \quad C = |\mathbf{C}|, \quad \rho = \rho(\mathbf{x}, t) = \int f d\mathbf{c}, \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho} \int \mathbf{c} f d\mathbf{c},$$

$$T = T(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho} \int \frac{1}{n} C^2 f d\mathbf{c},$$

ここで、 $n=2$ (2次元、Coplanar)、 $n=3$ (3次元) である。

DBE(Discrete Boltzmann Equation)モデル [1]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial_e f}{\partial t_j} &= \frac{1}{K_n} \sum_{j=1}^r \frac{|c_i - c_j|}{m_0} \sum_{(k,l)} (F_k F_l - F_i F_j), \quad i = 1, 2, \dots, r \\ F_i &= F_i(\mathbf{x}, t) = f(c_i, \mathbf{x}, t) \end{aligned}$$

ここで、 r は速度空間の分割数、 Δt は微小時間、 K_n はクヌーセン数、 m_0 をサンプルを取る回数となり、方程式としては結局、BGKモデルでは

$$f(\mathbf{c}, \mathbf{x}, t + \Delta t) = \Delta t \cdot \nu(\mathbf{x}, t) f_0(\mathbf{c}, \mathbf{x}, t) + [1 - \Delta t \cdot \nu(\mathbf{x}, t)] f(\mathbf{c}, \mathbf{x} - \mathbf{c} \Delta t, t), \quad (4)$$

$$\begin{aligned} f_0 &= \frac{\rho}{(\pi T)^{n/2}} e^{-C^2/T}, \quad \mathbf{C} = \mathbf{c} - \mathbf{u}, \quad C = |\mathbf{C}|, \quad \rho = \rho(\mathbf{x}, t) = \int f d\mathbf{c}, \\ \mathbf{u} &= \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho} \int \mathbf{c} f d\mathbf{c}, \quad T = T(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\rho} \int \frac{1}{n} C^2 f d\mathbf{c}, \quad n = 2, 3 \end{aligned}$$

を、DBEモデルでは

$$F_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) = F_i(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta t, t) + \frac{\Delta t}{K_n} \sum_{j=1}^r \frac{|c_i - c_j|}{m_0} \sum_{(k,l)} (F_k F_l - F_i F_j), \quad i = 1, 2, \dots, r \quad (5)$$

を用いる。

3 Taylor-Green型初期値、境界値問題

Taylor-Green[4]は、乱流の基本的な過程である大きな渦から小さな渦が発生する機構を見るために、時間 t での速度 $\mathbf{u} = (u, v, w)$ が

$$u = A \cos ax \sin by \sin cz,$$

$$\begin{aligned}
 v &= B \sin ax \cos by \sin cz, & \text{但し } Aa + Bb + Cc = 0 (\text{非圧縮 } \operatorname{div} \mathbf{u} = 0), \\
 w &= C \sin ax \sin by \cos cz,
 \end{aligned} \tag{6}$$

で与えられる流れを考え、これを t の冪級数の形に求めた。これは t の精々5乗程度のものであるが、それが具体的な解であることから渦や場のエネルギーの変遷について有意義な情報を与えることになった。とくに Kolomogorov はこの論文をよんでヒントを得、有名な-5/3乗則を導いたと言われている[5]。

ここでは気体ということで (6) に加えて密度 ρ と温度 T についても同じような初期値 ρ_{00} 、 T_{00} を与え、それらで与えられる Maxwell 分布 f_{00} を f の初期値、すなわち $f(\mathbf{c}, \mathbf{x}, 0) = f_{00}$ とする。

ここで f_{00} は一様密度、温度およびそれによる音速を基にした無次元表現での速度、密度、温度 $\mathbf{u}_{00} = (u_{00}, v_{00}, w_{00})$ 、 ρ_{00} 、 T_{00} により 2D(2次元 coplanar gas モデル [6]) および 3D(3次元) で、それぞれ以下のようになる。

$$\begin{aligned}
 2D : f_{00} &= \frac{\rho_{00}}{\pi T_{00}} e^{-C^2/T_{00}}, & \mathbf{C} &= \mathbf{c} - \mathbf{u}_{00}, \\
 u_{00} &= (A \sin 2\pi x \cos 2\pi y, B \cos 2\pi x \sin 2\pi y), \\
 \rho_{00} &= 1 + C \sin 2\pi x \sin 2\pi y, \\
 T_{00} &= 1 + D \cos 2\pi x \cos 2\pi y,
 \end{aligned} \tag{7}$$

$$\begin{aligned}
 3D : f_{00} &= \frac{\rho_{00}}{(\pi T_{00})^{3/2}} e^{-C^2/T_{00}}, & \mathbf{C} &= \mathbf{c} - \mathbf{u}_{00}, \\
 u_{00} &= A \cos 2\pi x \sin 2\pi y \sin 2\pi z, \\
 v_{00} &= B \sin 2\pi x \cos 2\pi y \sin 2\pi z, \\
 w_{00} &= C \sin 2\pi x \sin 2\pi y \cos 2\pi z, \\
 \rho_{00} &= 1 + D \sin 2\pi x \sin 2\pi y \sin 2\pi z,
 \end{aligned} \tag{8}$$

$$T_{00} = 1 + E \cos 2\pi x \cos 2\pi y \cos 2\pi z,$$

ここで A, B, \dots, E, F は定数である。

さらに計算では 2D では単位正方形 ($0 \leq x, y \leq 1$)、3D では単位立方体 ($0 \leq x, y, z \leq 1$) の領域を考え、そのため周期境界条件としてすべての関数 $f(x, y)$ (2D) および $f(x, y, z)$ (3D) に対し

$$\begin{aligned} 2D : \quad & f(x+1, y+1) = f(x, y), \\ 3D : \quad & f(x+1, y+1, z+1) = f(x, y, z) \end{aligned} \quad (9)$$

を課する。さらに、以上の式では (4) あるいは (5) で、 f の格子点以外の値が必要となるが、それを 2D では三角形領域、3D では四面体領域で、それぞれ線形関数 $f = a_0 + a_1x + a_2y$ 、 $f = a_0 + a_1x + a_2y + a_3z$ で表わして内挿する。

4 計算結果

計算では 2D では正方形内、3D では立方体内で境界条件 (9) の下、 $t = 0$ での初期値 (7) あるいは (8) から出発し、式 (4)、(5) により時刻 Δt ごとに求めていく。

初期値については、2D では

$$(2-1) \quad A = 0.5, B = -0.4, C = D = 0.1,$$

$$(2-2) \quad A = 1.5, B = -1.0, C = D = 0.2$$

で行なった。ここで、速度は一様状態 $T = T_0$ に対応する音速で無次元化しており、従って (2-1) は subsonic、(2-2) は supersonic に対応している。しかし、結果ではこれらで本質的な違いは見つけられなかった。3D では

$$(3-1) A = 0.5, B = C = -0.2, D = F = 0.01$$

とした。

x の範囲は上述のように正方形内あるいは立方体内だが、 c もそのような範囲に制限し、その外では $f=0$ とする。その中での分割で $\Delta x, \dots, \Delta c_x, \dots$ などの設定にはいろいろな場合についての予備計算を行なって決定した。また、 Δt は十分小さいことが必要で 10^{-4} (単位は音速で一辺を行く時間) としたが、 5×10^{-4} でも結果に大きな違いがなかった。何れにしても $t \sim 1$ 程度までの計算で、その計算時間はワークステーションで数時間程度である。これらの結果の例を図 1、2 に示してある。ここで、図 1 は 2D での初期値が (2-1) で $K_n=0.01$ (x は 100×100 分割、 c は $-6 \leq c_x, c_y \leq 6$ で 24×24 分割) の場合の密度分布とエネルギースペクトルを示す [6]。図 1 (a)-(d) は密度の等高線で、(a) はその $t=0$ での、(b)、(c)、(d) はともにその $t=0.1$ の様子であるが、(b) は BGK、(c) は DBE による結果、さらに (d) は比較のための対応する問題の Navier-Stokes 式による DNS の結果である。そこで、レイノルズ数 R_e は関係 $K_n R_e \sim 1$ を利用し 100 としている。一方、図 1-(e) ではそれらの密度の $y=0.5$ 上での分布を比較している。図 1-(f) では計算からの速度のフーリエ変換から導出したエネルギー $E(k)$ の波数 k による分布を示している。

図 2 は 3D(3-1) の $K_n = 0.1$ の場合 (x は $20 \times 20 \times 20$ 分割、 c は $-4 \leq c_x, c_y, c_z \leq 4$ で $8 \times 8 \times 8$ 分割) で図 2-(a)、(b)、(c) で密度の $z = 0.5$ での $t = 0, 0.1, 0.3$ での変化の様子、また図 2-(d) ではそのエネルギー分布を示してある。ここでは、渦-衝撃波のようなものが見える。ここではまた参考のために勾配-5/3 の線 (図 1-(f) では-3) も示してある。

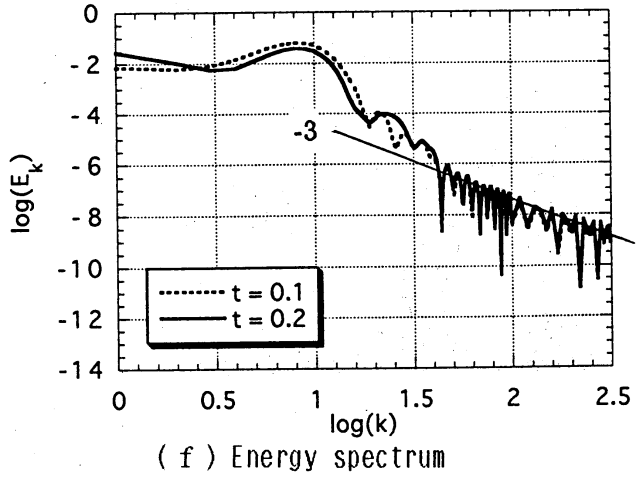
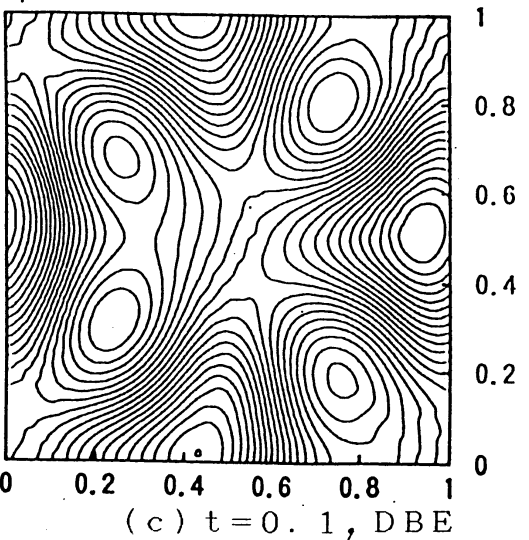
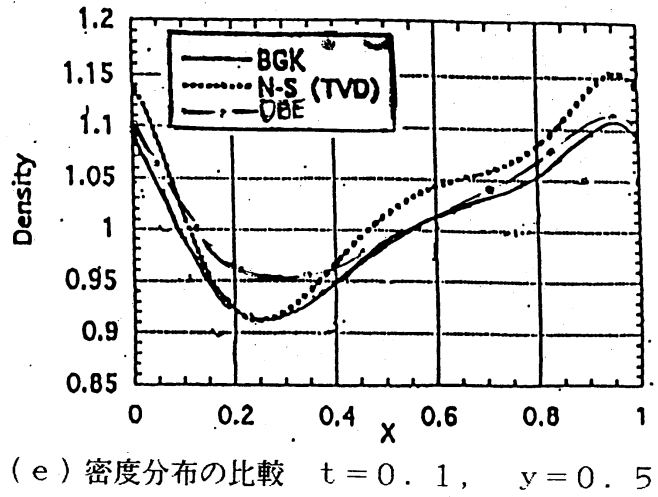
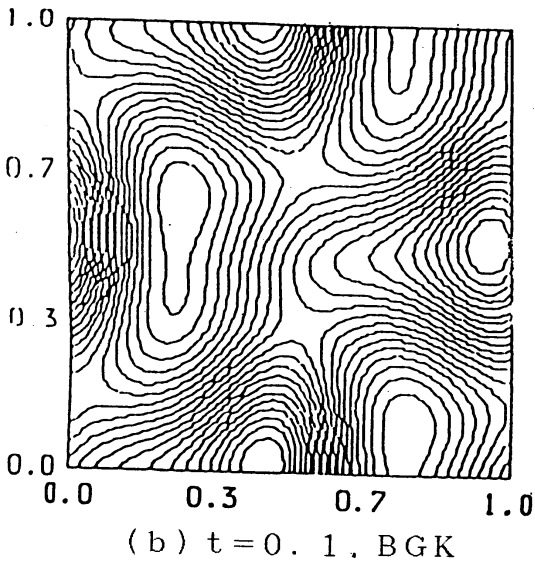
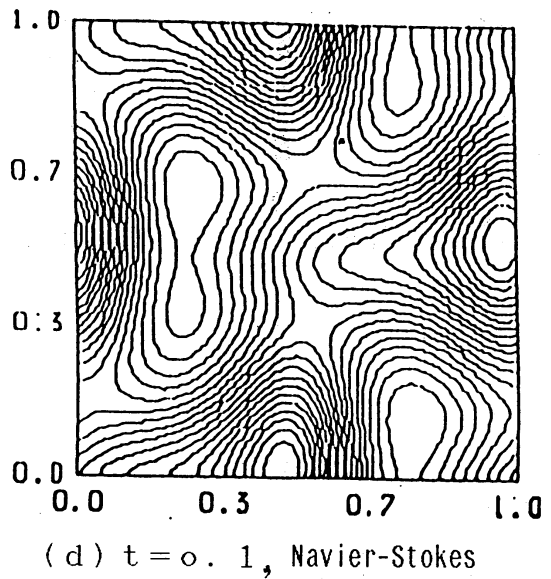
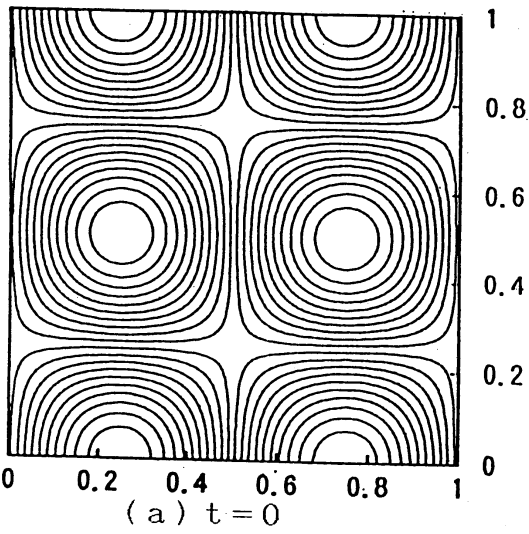
5 考察

分子流モデルによる乱流計算の可能性を見るために、それをまず Taylor-Green 型の流れに適用して見た。結果は大体において満足行くように見える。しかし、これで漸く 1937 年代 (Taylor-Green) に達したというところで、その一層の発展はこれからの課題である。

6 参考文献

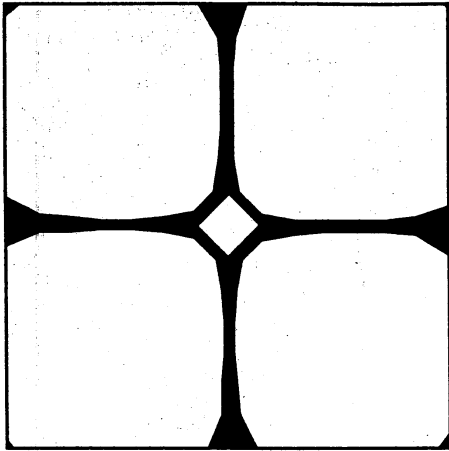
- [1] Satofuka, N., Morinshi K., and Oishi T., Numerical solution of the kinetic model equations for hypersonic flows, *Comput. Mec.* 11, (1993), p.452.
- [2] Xu, D.Q., Honma, H., Numerical simulation for nonstationary Mach reflection of a shock wave: a kinetic-model approach, *Shock Wave* 1, (1991), p.43.
- [3] Chapman, S and Cowling, T.G., *The Mathematical theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge Univ. Press, (1970), p.46.
- [4] Taylor, G.I. and Green A. E., Mechanism of the production of small eddies from large ones, *Proc. of Royal Soc. London A*, 158, (1937), p.499.
- [5] Yaglom, A.M., A.M. Kolomogorov as a Fluid Mechanician and Founder of a School in Turbulence, *Annual Review of Fluid Mechanics*, 26, (1994).
- [6] Sakurai, A. and Takayama F., Eddy shocklet in coplanar gas flow, *Fluid Dynamics Research (Elsevier)*, 21, (1997), p.211.

密度分布



第1図 (2D)

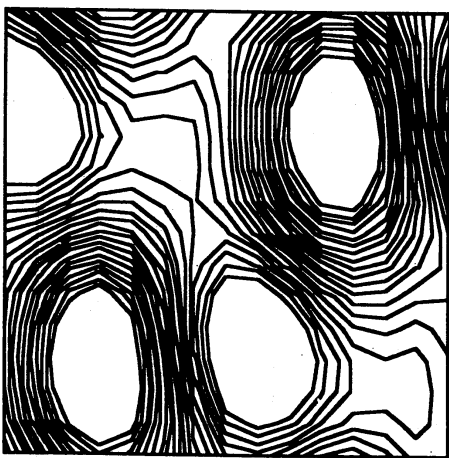
密度分布 ($z=0.5$)



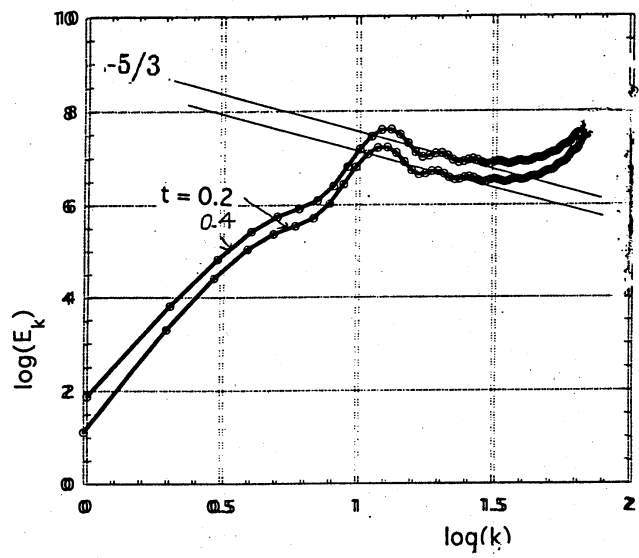
(a) $t=0$



(b) $t=0.1$



(c) $t=0.3$



(d) Energy spectrum