

論文の内容の要旨

論文題目 **Lattice Boltzmann Analysis of Complex Hydrodynamics**

和訳 (格子ボルツマン法による複雑流体解析)

氏名 平林 美樹

格子ボルツマン法は、気体分子の運動の記述に統計力学的な手法を取り込むことにより流体现象を解析する手法として開発されたもので、アルゴリズムが単純で複雑な流動システムの解析に適している。また同様なマイクロモデルである分子動力学法やモンテカルロ法に比べて、疎視化の必要がなく、アルゴリズムの局所性が高いため並列化に適している効率の良い計算手法である。本研究は、格子ボルツマン法による新しいモデルを提案して複雑流体の解析を行うと共に、複雑な流動システムの解析手法としての本手法の有効性を実証するものである。ここでは、格子ボルツマン法の偏微分方程式の数値解法としての側面と、連続体近似によらないマイクロモデルとしての側面に着目して、非線形な成長方程式を用いた流動現象の臨界特性の解析と、運動論に基づいた磁性流体の力学的挙動に関する解析を行った。

格子ボルツマン法を偏微分方程式の解法としてとらえると、適切な平衡分布関数を導入することにより、Quenched Kardar-Parisi-Zhang (QKPZ)方程式として

知られる時間に依存しないノイズ項を含む次の成長方程式を解くことができる。

$$\frac{\partial h}{\partial t} = F + \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\mathbf{x}, h) \quad (1)$$

h は界面の高さ、 t は時間、 F は外力、 \mathbf{x} は位置、 ν 、 λ は係数、 $\eta(\mathbf{x}, h)$ はノイズ項を表す。(1)式を解くための格子ボルツマン方程式は BGK 衝突項を用いて次のように表される。

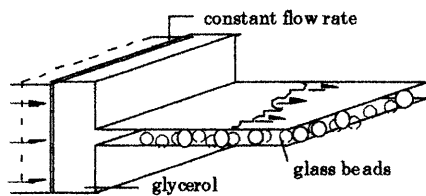
$$n_a(\mathbf{x} + \mathbf{c}_a, t+1) - n_a(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [n_a(\mathbf{x}, t) - n_a^{(0)}(\mathbf{x}, t)] \quad (2)$$

n_a は a 方向の粒子分布関数、 \mathbf{c}_a は a 方向にある隣接格子に向かう単位速度ベクトル、 τ は平衡への緩和時間、 $n_a^{(0)}$ は局所的な平衡分布関数を表す。QKPZ 解法は先に我々が開発したポアソン解法[1]を差分法と組み合わせて解くものである。ポアソン解法は拡散モデルより導かれたもので、(2)式の計算に用いる平衡分布関数を新しく次のように定め直したものである。

$$n_a^{(0)} = \frac{1}{2D} \left[\sum_a n_a(\mathbf{x}, t) - \kappa f_s \right], \quad \kappa = \frac{c^2}{D} \left(\tau - \frac{1}{2} \right) \quad (3)$$

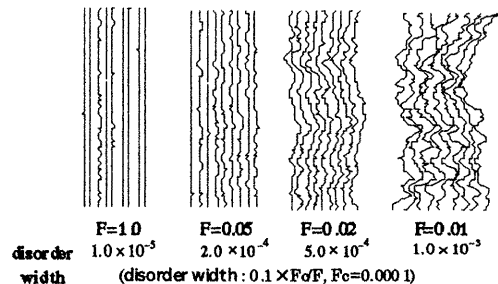
D は空間の次元、 f_s はポアソン方程式のソース項で、 κ は拡散係数である。ここでは(1)式の非線形項を中心差分により求め、拡散項以外の右辺の項をポアソン方程式のソース項として解く。ノイズはピニング現象を考慮しつつ、一様分布関数を用いて格子上に配置する。衝突過程においては、解が振動するのを防ぐため、格子点の中央で衝突するという新しい衝突則を採用している。

QKPZ 方程式は、ランダムメディアにおける界面の成長現象一般を表すユニバーサルな方程式である。ここでは(1)式を使って Hele-Shaw cell を用いた流体浸透実験 (図 1) における臨界特性の解析を行う。QKPZ 方程式が表す成長現象は時間に依存しないノイズ項の効果により、ピニングが外れる臨界点 ($F = F_c$) 付近でフラクタル性を有する臨界挙動を示すこと (図 2) がその大きな特徴である。この臨界挙動の解析手法には、連続な成長方程式を本解法のような数値解析により解く方法、あるいはくりこみ群 (Renormalization group, RG) や次元解析 (dimensional analysis, DA) のような理論解析により解く方法の他 Random field Ising model (RFIM)あるいは Directed Percolation Depinning (DPD)



[D.E.Wolf, Kinetic roughening, IFF-Bulletin 39, 4-33 (1991)]

図1 流体浸透実験



The time-lapse interface profile from left to right.

図2 臨界現象に伴うフラクタル

に代表される離散モデルを用いた数値実験による方法があり、スケーリング特性などが議論されてきた。図3は $f = (F - F_c) / F_c$ と定義される f を用いて $(1 + 1)$ 次元における相転移点近傍における成長速度 v と界面の傾斜の平均値 m の関係を外力を変えて計算し本モデルの有効性を検証したものである。図3(a)は相転移点近傍で $\lambda \rightarrow 0$ となる時、RFIM に代表される等方的な成長を示すユニバーサリティクラスに属することが示されている。図3(b)は相転移点近傍で $\lambda \rightarrow \infty$ となる時、非等方的な成長を行う DPD モデルを模擬するために、界面の傾斜に応じて λ を切り替えクロスオーバーを回避する “noncrossing” 効果 (図3(d)) を考慮して計算を行ったもので、DPD の数値実験の結果の特性とよく一致している。さらに本モデルを用いて新たなユニバーサリティクラスとして $\lambda = const$ の場合の計算を行った (図3(c))。これは λ が外力の大きさに依らず系全体で一様であるような現象が存在するならば、それは第3のユニバーサリティクラスに属するものであることを予言するものである。次に次式で表されるスケーリング指数 α と β に関してその他の解析手法により求めた値と比較を行った結果を表1に示す。 d は界面の次元である。

$$w_{sat}(L) \sim L^\alpha \tag{4}$$

$$w(L,t) \sim t^\beta \tag{5}$$

ここで、 w は界面の深さの平均で次式で表される。

$$w(L,t) = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L [h(i,t) - \bar{h}(t)]^2} \tag{6}$$

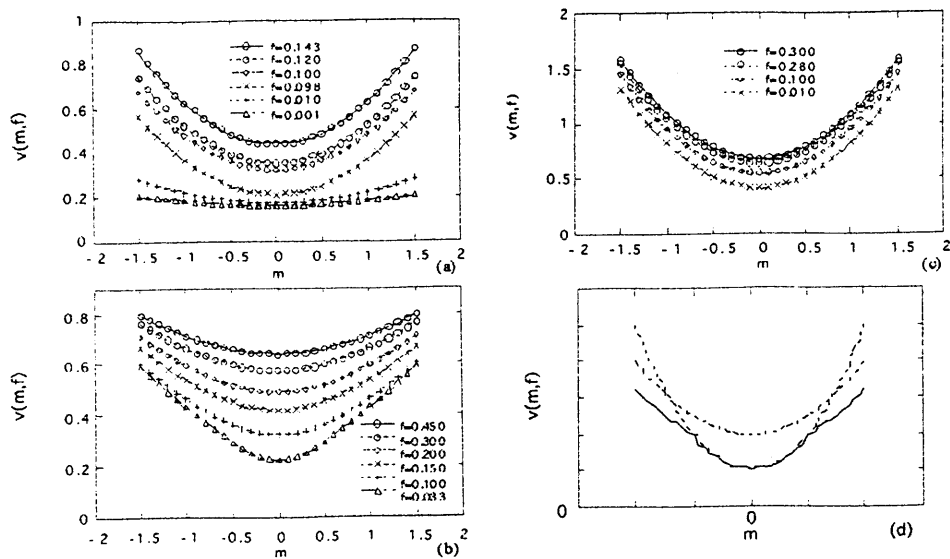


図3 ユニバーサリティクラスの検証

表1 α と β に関するスケーリング特性の比較

	Model	d	α	β
Numerical solution	QKPZ	1	0.75	-
	QKPZ	1	1.25	0.88
	QKPZ	1	0.72	0.61
	LBGKQKPZ (a)	1	1.13	0.76
	LBGK QKPZ (c)	1	0.75	0.63
Analytical solution	RG	1	1	0.75
	DA	1	0.75	0.6
Discrete model	DPD	1	0.633	0.644
	RFIM=SS	1	1	-
Experiment	Fluid flow in porous media	1	0.73	-
		1	0.81	0.65
		1	0.65-0.91	-

L は系の大きさ、 i は位置、 \bar{h} は平均の界面の高さを表し、(4)式の添え字 sat は界面の深さの変化の飽和した状態を意味する。表1より、第3のユニバーサリティクラスは次元解析によるものと同じスケーリング特性を示していることがわかる。また流体実験の結果を見ると、粗さ指数 α に関して実験誤差とは言い切れない明

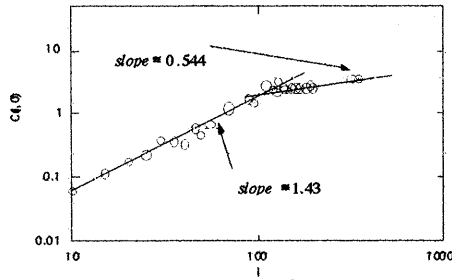


図4 粗さ指数 α の変化

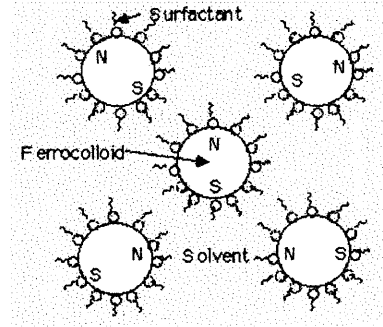


図5 磁性流体

らかなばらつきがあることがわかる。この原因の1つとして、系の大きさによって時間に依存する thermal noise の影響が無視できなくなるためではないかと考えられている。そこでこの問題について、次の相関関数を用いて検討を行った結果を図4に示す。

$$C(l,0) = \left[\left\langle \left(\tilde{h}(\mathbf{x}, t') - \tilde{h}(\mathbf{x}', t' + l) \right)^2 \right\rangle_{\mathbf{x}, t'} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad [|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = l] \quad (7)$$

ここで $\tilde{h}(\mathbf{x}, t)$ は、全体の傾斜を差し引いた界面の高さを表す。このとき界面の粗さ指数に関して次のスケーリング関係が成り立っている。

$$C(l,0) \sim l^\alpha, \quad [l \ll \xi_{||}] \quad (8)$$

ここで $\xi_{||}$ は界面に平行な方向の相関長さを表す。図4は図1の実験による分析結果と同様の結果を示しており、ある種の相関長さ ξ の存在によって粗さ指数 α に変化が起こることがわかる。その原因の1つとして、thermal noise の影響が考えられている。以上のことから本解法が偏微分方程式の数値解法の一つとして、実験結果の解析に有効であることが示された。

次に本手法のマイクロモデルとしての特性を生かして複雑流体（磁性流体：図5）の新しいモデルを提案する。ここでは簡単のため2次元六角格子を考え、磁気力を正しく表現するために、電磁流体モデルに倣って格子ボルツマン方程式を次の形で与える。

$$n_a^\sigma(\mathbf{x}, t) = (1-p) \left[n_a^\sigma(\mathbf{x} - \mathbf{e}_a, t-1) + \Omega_a^\sigma(\mathbf{x} - \mathbf{e}_a, t-1) \right]$$

$$+p\left[n_a^\sigma(x-e_\sigma, t-1)+\Omega_a^\sigma(x-e_\sigma, t-1)\right], \quad \Omega_a^\sigma = -\frac{1}{\tau}\left(n_a^\sigma - n_a^{\sigma(0)}\right) \quad (9)$$

ここで、 n_a^σ は状態 (a, σ) における粒子分布関数で、 p は σ 方向に進む粒子分布の割合を表す。格子点には休止粒子を置く。 e_a 、 e_σ は隣接格子に向かう単位速度で $e_a = (\cos[2\pi(a-1)/6], \sin[2\pi(a-1)/6])$ で表され、 $\sigma=1$ は $a+1$ 方向、 $\sigma=2$ は $a-1$ 方向を示し、局所的な速度 v_a^σ と磁場 H_a^σ と磁気モーメント m_a^σ はこれらを用いて次のように表されるものとする。

$$v_a^\sigma = (1-p)e_a + pe_\sigma, \quad m_a^\sigma = re_a + qe_\sigma \quad (10)$$

r 、 q は巨視的な条件式を満たすように定められる定数である。内部角運動量を考慮して、局所平衡分布関数 $n_a^{(0)}$ を新たな自由変数 α を用いて以下のように定める。

$$\begin{aligned} n_a^{\sigma(0)} = & \frac{\rho}{12} \left\{ \frac{12}{\alpha+12} + \frac{2}{1-p+p^2} \left[(v_a^\sigma \cdot v) + \frac{(2-p)^2}{3q^2} (m \cdot m_a^\sigma) - \frac{(2-p)^2}{3q^2} (m \cdot H) \right. \right. \\ & + \frac{(2-p)^2(\alpha+12)}{18q^2(1-p+p^2)} \left[(m \cdot m_a^\sigma)(v \cdot v_a^\sigma) - (m \cdot H)(v \cdot v_a^\sigma) \right] + \frac{(\alpha+6)}{12} v^2 \\ & \left. \left. + \frac{\alpha(2-p)^2}{36q^2} m^2 + \frac{(2-p)^4(\alpha+12)}{108q^4(1-p+p^2)} m^2 H^2 \right] \right\} \quad (11) \end{aligned}$$

同様にして休止粒子の平衡分布を定め磁性流体の諸特性を計算した結果を図6～8に示す。磁性流体に特有の現象である外部磁場の作用下で内部角運動量の励起により見かけの粘性率に異方性が生じる様子(図6)や、交流磁場下でフラクタルが生じ得ること(図7)、回転磁場による流体駆動効果(図8)が定性的に示されている。さらにレオロジー特性に関する理論値やフラクタル理論を用いた定量評価によって、モデルの有効性を確認した。本モデルは内部角運動量が無視できない現象や、変動磁場の存在下での特殊な現象を解析するための新しいモデルであり、磁気モーメントの回転による効果を効率良く取り扱うことが可能である。

本研究は複雑な流動現象の解析手法として、格子ボルツマン法による新しい解析モデルを提案するものである。ここでは格子ボルツマン法の2つの側面、すなわち偏微分方程式の数値解法としての側面と微視的な粒子を扱う物理モデルとしての側面に着目して、流体の引き起こすフラクタル現象や特殊なレオロジー特性

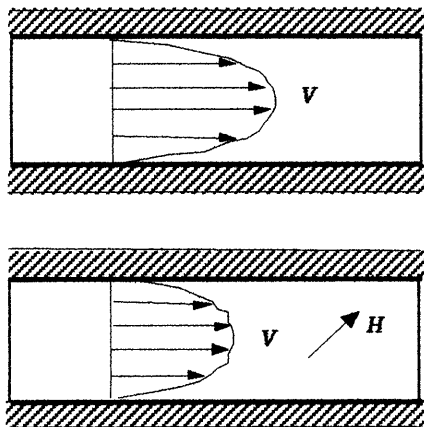


図6 粘性率の異方性

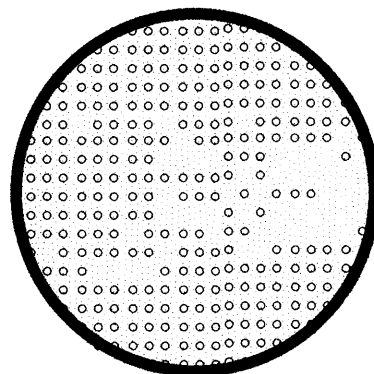


図7 交流磁場下のフラクタル

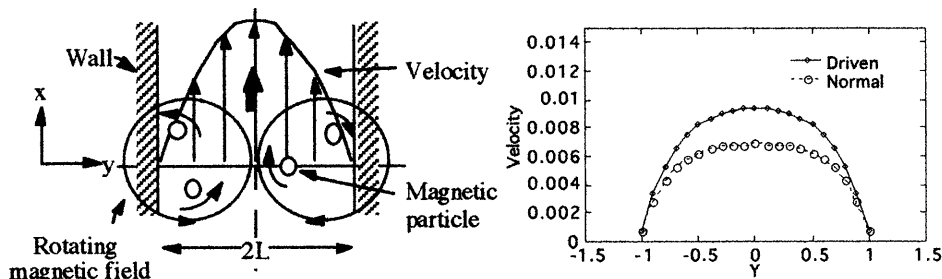


図8 回転磁場による駆動

の解析にそれぞれの立場からアプローチを試みた。両者の立場から、QKPZ 方程式を用いてのランダムメディアの界面成長現象の解析と、磁場に反応する特殊な複雑流体である磁性流体における内部角運動量の効果を考慮した微視的モデルの提案を行った。複雑流体の解析に適していると考えられているマイクロモデルの中でも、格子ボルツマン法は効率のよいモデルであると言われており、本研究で取り上げたような流体の複雑な力学的挙動の解析に有効な手法のひとつであることが示された。

参考文献

- [1] M. Hirabayashi, Y. Chen, and H. Ohashi, The lattice BGK Solution of the QKPZ Equation: Universality and Scaling in Fluid Invasion of Porous Media, JSCES Trans. Vol. 2, 2000, p41-46.