熱流体格子ボルツマンモデルに関する一考察 A Study of Thermal Lattice Boltzmann Model

姜鎬根,神戸大学 自然科学,657-8501 神戸市灘区六甲台町1-1, E-mail: 961d838n@kobe-u.ac.jp 蔦原道久,神戸大学 自然科学,657-8501 神戸市灘区六甲台町1-1, E-mail: tutahara@mech.kobe-u.ac.jp

Ho-Keun Kang, Kobe University, 1-1 Rokkodai-cho Nada Kobe 657-8501 Japan Michihisa Tsutahara, Kobe University, 1-1 Rokkodai-cho Nada Kobe 657-8501 Japan

In this article, we show that there exist rarefied gas effects in the Lattice Boltzmann method using the thermal Lattice BGK two-speed model. Those effects are due to non-equilibrium state in the particle distribution function, and the non-equilibrium occurs near walls. In this study, LBM counterpart of the thermal creep flow, which appears due to temperature gradient of the boundary in rarefied gases, is clarified analytically and is studied numerically for some cases.

1. 緒言

近年,流れの解析に熱流体モデルの格子ボルツマン法 (LBM)が用いられるようになってきた⁽¹⁻⁴⁾.LBM とは,流体を 有限個の速度を持つ多数の粒子の集合体で近似し,それら粒 子の衝突と並進とを繰り返すことにより,流れを模擬する手 法である⁽⁵⁻⁷⁾.

LBMは,複雑な流れ場に対してもアルゴリズムがシンプルであり,並列計算に適しているなどの利点をもっている.これまで非圧縮性流体,2相流⁽⁸⁻¹⁰⁾および圧縮性流体まで流れ場に適用され成功をおさめている.

圧縮性流体の計算は Qian⁽¹¹⁾らによって行われているが、 従来の非圧縮,非熱伝導性モデルと同様に熱の効果は除外さ れている.圧縮性流体に対して真に適用可能な熱流体モデル は,1993年になって McNamara ら⁽¹¹⁾と Alexander ら⁽¹⁾によっ て初めて明確に提案された.McNamaraらは,3次元立方格子 においてその支配方程式が通常見られる Navier-Stokes 方程 式と一致するように平衡分布関数の形を決定するという熱 流体モデルの構築方法を述べている .一方の Alexander らも 同様の方法を示し 2次元正三角形格子における 13 種類の粒 子を持つモデルにおいて具体的な平衡分布関数の形を求め ている.その中で,輸送係数,音速および熱伝導を考慮した Couette 流れに関する数値解と理論値との比較において両者 の良い一致が見られる.そして, Chen ら⁽²⁾は Qain らによっ て指摘された Navier-Stokes 方程式からの非線形な逸脱項 (12)が流れ場に与える影響を検討し、数値計算を通して逸脱項 を排除する改良されたモデルと従来のモデルとを比較した. これらの逸脱項は高次の流速の項から構成されることから, 逸脱項を排除するためには平衡分布関数が4次オーダーの速 度まで展開されると同時に4階の速度モーメントテンソルま でしか等方性を有しない正三角形格子ではなく6階のテンソ ルまで等方性が保証されるように十分な対称性を持つ正方 格子を用いることを主張している.

本研究では、熱流体格子 BGK2 速度のモデルを利用して格 子ボルツマン法における希薄気体の効果についてそのメカ ニズムを明らかにし、数値計算例を示すことによっていわゆ る連続体としての流体からの流れのずれを明らかにした.

外力の働いていない系においては温度場が原因となって 流れが誘起されることはないが,希薄気体においては、境界壁 面に沿って温度勾配があるとき,壁面近傍において高温側に 向かって流れが誘起される.このような希薄気体特有の流れ は熱ほふく流(thermal creep flow)⁽¹³⁾として知られていたが, 格子ボルツマンの方法でも起こる.このような効果は粒子の 分布関数における非平衡状態によるもので,この非平衡は壁 から反射して来る粒子により生じる.

格子ボルツマンの法におけるこのような流れは非物理的

な現象である.したがって,格子ボルツマン法での希薄気体効 果については,何らかの対策が必要である.ここで温度勾配が ある時のいつかの数値計算の結果が検討された.

2.基礎理論

LBMでは、空間は一様に規則的な格子によって離散化され る.格子には幾つか種類があるが、本研究では図1に示すよう に、一辺が単位長さの正三角形格子を用いる.時間についても 時間刻みtずつ時間が進む.粒子は格子点で静止するか,1 タイムステップ間に60°間隔で延びている格子線に沿って 隣接する格子点へ決められた速度で移動することができ,そ の後全格子点上で同時に衝突が行われる.衝突は並進時間 (次の衝突がおこるまでの時間)に比べて瞬時に行われ,衝 突後,一部分の粒子は速度方向が変化する.また,粒子は全 ての時刻において格子点上にのみ存在する.

次に,図2のように粒子の種類は正三角形格子上で速度の 大きさが *c*, 2*c*の2種類,速度方向が1~6までとそれらに 静止粒子を加えて計13種類となる.

LBMにおける時間発展方程式は分布関数 $f_i(t,\mathbf{r})$ を用いて,

と表せる. は緩和時間係数, c_iは粒子速度である.

流体の密度 \mathbf{r} ,運動量 $\mathbf{r}u_a$ および流体エネルギー $\frac{1}{2}\mathbf{r}u^2 + \mathbf{r}e$ は, f_i または $f_i^{(0)}$ を用いて各格子点上で次のよう

に定義される,		
$\boldsymbol{r} = \sum_{i} f_{i} = \sum_{i} f_{i}^{(0)}$,	(2)





Fig.1 Discretization of two-dimensional space with hexagonal lattice



Fig. 2 Particles travelling directions and 2D13V model.

局所平衡分布関数 $f_i^{(0)}(t,\mathbf{r})$ は,

 $f_{si}^{(0)} = F_s \mathbf{r} [1 - 2Bc_{sia}u_a + 2B^2c_{sia}c_{sib}u_au_b + Bu^2]$,(5) と与えられる.

係数 *F*₀, *F*₁, *F*₂ および *B* は,密度および運動量の定義式 (2),(3)および(4)から次のように決定される,

$$F_{1} = -\frac{1}{9B^{2}c^{4}} \left(1 + 2Bc^{2} \right),$$
(7)

式(1)の左辺を時刻 *t* ,空間座標 *r* を中心に 2 次まで Taylor 展開を行うと,

が得られる.

分布関数 f_a は Knudsen 数に相当する微小量 eを用いて平衡状態を中心にして展開し,時間および空間の変数は微視的,離散的なスケールにおけるものである,

式(10)を用いて Chapman-Enskog 展開を行う.そして,式 (10)に式(11),(12),(13)を代入すると,

になる.

式(14)は巨視的な時間および空間スケールで見られるi方 向粒子の運動を表す.この式をもとに式(2),(3),(4)を考慮して, 連続体としての流体に関する質量,運動量およびエネルギー 保存を導くと、

質量保存の方程式,

$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r_{\mathrm{la}}} (\mathbf{r} u_{\mathrm{a}}) = 0 , \bullet$	
運動量保存の方程式,	

が得られる.ここで圧力 P,粘性係数 mおよび第2粘性係数 l は.

$$P = \frac{2}{D} \mathbf{r} \mathbf{e} , \mathbf{m} = \frac{2}{D} \mathbf{r} \mathbf{e} t \left(\mathbf{f} - \frac{1}{2} \right), \mathbf{l} = -\frac{4}{D^2} \mathbf{r} \mathbf{e} t \left(\mathbf{f} - \frac{1}{2} \right), \cdots (18)$$

$$\mathbf{C} \mathbf{a} \mathbf{a}.$$

3.格子ボルツマン法における熱ほふく流

衝突の時,粒子の運動エネルギーが保存されると考え2次 元熱流体(2D13V)モデルを考える.

今,流速 0,圧力が一様な場を考え,温度が x 方向に一定の勾 配を持つとする.2 次元では圧力 P と密度 r,内部エネルギー e との間に P = re なる関係があるが,圧力が一定値 P である と密度は r = P/e(x) なる分布を持つことになる.すなわち,

$$f_{1,i}^{(0)} = -\frac{4P}{9}(e-1),$$
(19)
$$f_{2,i}^{(0)} = \frac{P}{9}(e-\frac{1}{4}),$$
(20)

である.

ここで, $f_{s,i}$ の添え字s = 1,2は速度の大きさの種類 で, i = 1,2は速度の方向を表している.これ以降マクロなx方 向の流速について考えるので,速度0の粒子およびy方向に 速度を持つ粒子について考えない事ととし,分布関数は上下 対称としてiを1と2のみ考慮する.

図3のように格子点でx方向に5点離れた列を考えると、

 $f_{2,i}^{(0)}(\pm 2) = \frac{P}{9}(e \pm 2\Delta e - \frac{1}{4}),$ (22)



Fig. 3 Schematic distribution of internal energy gradients



Fig.4 Lattice scale of internal energy gradient

となる.すなわち,初期値から熱的な非平衡により,分布関数 は変わるが,流れは生じない.

次に,衝突後の分布関数を計算する.分布関数の発展方程 式,

 a^{n+1}

$$f^{n+1} = f^n - \frac{1}{f} (f^n - f^{(0)}), \dots (29)$$

IC代入すると,
 $f_{1,1}^n - f_{1,1}^{(0)} = -\frac{4P}{9} (-\Delta e),$
 J
 J
 $f_{1,1}^{n+1} = f_{1,1}^n - \frac{1}{f} (f_{1,1}^n - f_{1,1}^{(0)})$
 $= -\frac{4P}{9} \left\{ e - (1 - \frac{1}{f})\Delta e - 1 \right\}, \dots (30)$
 δc
 a .
 a
 b
 $f_{1,2}^{n+1} = -\frac{4P}{9} \left\{ e + (1 - \frac{1}{f})\Delta e - 1 \right\}, \dots (31)$
 $f_{2,1}^{n+1} = \frac{P}{9} \left\{ e - 2(1 - \frac{1}{f})\Delta e - \frac{1}{4} \right\}, \dots (32)$
 $f_{2,2}^{n+1} = \frac{P}{9} \left\{ e + 2(1 - \frac{1}{f})\Delta e - \frac{1}{4} \right\}, \dots (32)$
 b
 c
 b
 c
 b
 c
 a
 b
 $f_{s1,1}(0) = -\frac{4P}{9} (e + (1 - f)\Delta e - 1), \dots (33)$
 $f_{s1,2}(0) = -\frac{4P}{9} (e - (1 - f)\Delta e - 1), \dots (35)$

$$f_{0} \times (0) + f_{1,1} \times \frac{1}{2} + f_{1,2} \times (-\frac{1}{2}) + f_{2,1} \times \sqrt{3} + f_{2,2} \times (-\sqrt{3}) = 0,$$
(37)

となる.

図 4 のように壁がある場合,粒子は壁から内部エネルギー e, 圧力 P, 速度 0 の平衡分布関数で表される平衡状態で跳ね 返るとすると.

$$f_{w1,1}(-1) = -\frac{4P}{9}(e - \Delta e - 1),$$
 (38)

$$f_{w1,2}(1) = -\frac{4P}{9}(e + \Delta e - 1)$$
, (39)

になる.

粒子が壁面から,1 格子内側の(0)の格子点に移動した時の 流速は.

である.

流れは高温側に向かっており,流速は P と温度勾配に比例 する.内部の領域との違いは、 ƒ,,の粒子が,内部では格子点で 2 離れた所から来るのに対して、壁付近では 1 離れた所から 1/2Δt ごと壁面で更新された粒子が来る.

流れに x 方向に一定の温度勾配があり,領域の下部に同じ 温度勾配を持つ壁面がある.y方向半無限に広がる領域を考 えると、定常流は次のような考察から求められる.

壁から $\frac{2\sqrt{3}P}{9}\Delta e$ の運動量が,流れがあるか無いかにかかわ

らず流入する.従って流れがこれと同じ運動量を壁に与える ならば流れは定常となる.流速の y 方向成分 v が 0 であると すると分布関数は y 方向に対称となるので,定常流は分布関 数の上下合計して速度の x 成分は,

と表される.ここで △x は格子の間隔で,格子間隔が小さくな るに従い、この流れは0に近づく.

4. 数值計算例

4.1 両面に温度勾配がある Cavity 内の流れ

図 5 のように個体壁で囲まれた四角形の Cavity 内の流れ を考える.計算メッシュの数は*M×N*=60×60,周囲の壁には 局所平衡を仮定した粘着の境界条件を適用する.

上面は $e_0 = 0.5$,下面は $e_T = 0.7$,そして両面は温度が0.5か ら 0.7 まで線形に変化し,外力はないものとする.図 6(a)は流 面で温度勾配があるとき2次元の Cavity 流れの速度ベクト ルを示している.温度勾配のため両面で下向くの流れが生じ ている.また,温度が高い下面から上向きの流れと衝突し,中 央では上向きの流れが生じる.

図 6(b)は壁の付近での温度勾配と速度の大きさの関係を 示している.壁付近での速度は温度勾配の増加に比例して増 加していることがわかる.

3



Fig. 5 Schematic plot of the cavity flow with thermal gradients on the both sides









Fig. 6 (a) Velocity vectors with temperature gradient on the both sides, and (b) the relationship between the velocity and the temperature gradient.

4.2 チャンネルでの一方向流れ





図 7(a),(b)のように上面に温度勾配を持っているチャンネ ルでの希薄効果のような流れを考える.Sone⁽¹⁴⁾ らは希薄気 体においては境界壁面に沿って温度勾配があるとき,壁面近 傍において高温側に向かって流れが誘起されるのを報告し ている.

計算メッシュの数は $M \times N = 60 \times 40$ 、 $M_1 = 20$ 、 $N_1 = 20$ であり,上面での温度は次のように分布される,

 $e_{W1} = e_0 - (e_T - e_0)(M_1 - nL)/M_1$

 $e_{W2} = e_T - (e_0 - e_T)(M - M_1 - nL)/(M - M_1)$, (n = 0, 1, 2,)(44)

ここでL=1は代表長さである.

境界条件では,上面壁は粘着条件,下面は鏡面反射条件,そして左右が周期境界条件を適用する.初期条件とは, *r*₀ = 1.2250, *e*₀ = 0.5, *e*₇ = 0.7 を与えた.



Fig. 9 The mean flow velocity in the x-direction over the cross section at the origin.



Fig.10 The internal energy distribution in the x-direction (y=30) with temperature gradient on the both sides.

図 8 は一方向流れが生じる事を示している.チャンネルの 左側上端では温度勾配のため時計の逆回りの流れが生じる ことがわかる.図9はチャンネルの右側(x=M)での平均速度 を示している.始めには平均速度は増加するが,時間が進むと 流れが平衡状態になることがわかる.

5. 希薄気体効果を消す方法

格子ボルツマンの方法で希薄気体なような効果は、壁から 反射して来る粒子により生じるので、これを消すために仮想 的な壁をもう1つ考え、cの粒子は第1の壁から飛び出し、そ して2cの粒子は第2の壁から飛び出すようにする.

図 10 は図 5 と同様の設定であるか,y=30 の格子点での温 度分布を表している。計算メッシュの数は $M \times N = 60 \times 60$ を 与えだ.熱伝導方程式から出た理論値,壁を1つ考えるときお よび壁が2 つあるときの3つの等温線を示している.図で出 ているように1つの壁からc, 2cの粒子が反射する方法より も,cの粒子は第1の壁から,そして2cの粒子は第2の壁から 飛び出す方法が理論値と近づくことがわかる.

6. 結論

格子 BGK モデルにおいて希薄気体効果,特に熱ほふく流 に関して境界面での温度勾配によって誘起される流れを検 証した.

また,希薄気体効果を減らす新しい方法を提案し,その有効

性を確認した.

参考文献

- Alexander, F.J., Chen, S., and Sterling, J.D., "Lattice Boltzmann Thermo-hydrodynamics," Phys. Rev. E, 47(1993), pp.2249-2252.
- (2) Chen, Y., Ohashi, H., and Akiyama, M., "Thermal Lattice Bhatnagar-Gross-Krook Model without Nonlinear Deviations in Macrodynamic Equation," Phys. Rev. E, 50(1994), pp.2776-2783.
- (3) Huang, J., Xu, F., Vallieres, M., Feng, D.H., Qian, Y.H., Fryxell, B., and Strayer, M.R., "A Thermal LBGK Model for Large Density and Temperature Differences," Int. J. Mod. Phys. C, 8(4), (1997), pp.827-841.
- (4) 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,(1999).
- (5) McNamara, G., and Zanetti, G., "Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata," Phys. Rev. Lett., 61(1988), pp.2332-2335.
- (6) Qian, Y.H., Succi S. and Orszag, S.A., "Recent Advances in Lattice Boltzmann Computing," Ann. Rev. of Comp. Phy. III, D. Stauffer ed. World Scientific, (1995).
- (7) Rothman, D. and Zaleski, S., "Lattice-Gas Cellular Automata," Cambridge UP 1997.
- (8) Rothman, H. and Keller, J.M., "Immiscible Cellular -Automaton Fluids," J.Stat. Phys., **52**(1988), pp.1119-1127.
- (9) Grunau, D., Chen, S. and Eggert, K., "A Lattice Boltzmann Model for Multiphase Fluids Flows," Phys. Fluids A, 5(10), (1993), pp.2557-2562
- (10) Swift, M.R., Orlandini, E., Osborn, W.R. and Yeomans, J.M., "Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems," Phys.Rev.E, 54(1996), pp.5041-5052.
- (11) McNamara, G. and Alder, B., Physica, A, **194**(1993), pp.218-228.
- (12) Qian, Y.H. and Orszag, S.A., "Lattice BGK models for the navier-stokes equation," Europhys.Lett., 21(1993), pp.255-259.
- (13) 曽根 良夫, 青木 一生, "分子気体力学,"第3章, 朝倉 書店,(1994)
- (14) Sone, Y., Waniguchi, Y. and Aoki, K., "One-way Flow of a Rarefied Gas Induced in a Channel with a Periodic Temperature Distribution," Phys. Fluids, 8(8), (1996), pp.2227-2235.