

格子ボルツマン法による熱対流の数値解析

神戸大院自然科学 薦原 道久 (TSUTAHARA Michihisa)

馮士徳 (FENG Shi-De), 片岡武 (KATAOKA Takeshi)

高田尚樹 (TAKADA Naoki)

1. まえがき

近年の計算機の発達に伴い、流体力学の研究手段として流れを数値的に求める数値流体力学が長足の進歩を遂げている。これまでの手法は、流体力学の基礎方程式である、Euler 方程式系、あるいは Navier-Stokes 方程式系を流れの領域で離散化する差分法、有限体積法、有限要素法、あるいは境界上で離散化する境界要素法などが一般的である。

ここで紹介する格子ボルツマン法は、これらの手法とはいくぶん趣を異にしている。まず、微分方程式を基礎としてその方程式を離散化し解くというのではない。あとで詳しく述べるように、仮想的な粒子の運動を追跡する事により流体の運動を再現する。つまり偏微分方程式を基礎としないという点で、他の数値流体力学の手法と大きく異なっている。

この小論では、格子ボルツマン法による自然熱対流の計算に関して、重力効果の導入および非圧縮流体に対する 2 粒子モデル、また熱流体モデルについて簡単に紹介する。

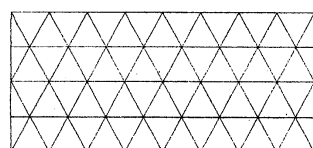
2. 計算手法

2.1 計算で用いる格子

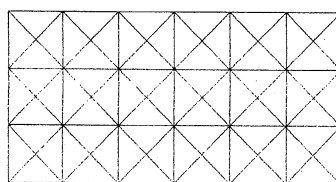
格子ボルツマン法[1-3]においては、流れの領域を一般には図 1 に示すような規則的な格子で分割する。粒子は格子線に沿って並進移動し、考える時間ステップにおいては格子点にのみ存在し格子線の途中にはないものとする。粒子のいくらかは格子点において衝突を行い、その後並進する。この過程を繰り返すのである。

2次元の場合は六角形格子 (FHP 格子[4]) および正方形格子に対角線方向を結ぶ格子の組み合わせを用いるのが一般的である。正方形格子のみでは、後述するように流体として必要なテンソルの等方性が成り立たず、対角線をむすぶ格子線が必要である。

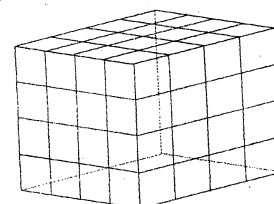
3次元の場合は立方体格子が基本となるが、立方体の頂点 (近接の格子点) を斜めに結ぶ格子線も必要となることは2次元の場合と同じである。



(a) Hexagonal lattice



(b) Square lattice



(c) Cubic lattice

図1 格子ボルツマン法で用いられる格子

2.2 格子ボルツマン方程式

格子ボルツマン法において、解くべき時間発展方程式は格子ボルツマン方程式

$$f_i(t+\tau, \mathbf{r}+\mathbf{c}_a\tau) = f_i(t, \mathbf{r}) - \frac{1}{\phi} [f_i(t, \mathbf{r}) - f_i^{(0)}(t, \mathbf{r})] \quad (1)$$

である。式(1)は特に格子BGK方程式[5]と呼ばれる。ここで式(1)中の記号は f : 粒子分布関数、 t : 時間、 τ : 時間刻み、 $\mathbf{r}$: 格子点の位置ベクトル、 $\mathbf{c}$: 粒子速度、 i : 粒子速度の方向、 $f^{(0)}$: 平衡分布関数、 ϕ : 緩和時間係数である。方程式は i 個あるが、これらは独立であり、計算はこの発展方程式を解くだけである。

連続体としてのマクロな変数は、粒子の分布関数 f_i から、粒子の速度ベクトル $\mathbf{c}_a$ とのモーメントから次のように求められる。

$$\text{密度: } \rho = \sum_a f_a \quad (2)$$

$$\text{運動量: } \rho \mathbf{u} = \sum_a f_a \mathbf{c}_a \quad (3)$$

$$\text{エネルギー: } \frac{1}{2} \rho u^2 + \rho e = \sum_a \frac{1}{2} f_a c_a^2 \quad (4)$$

2.3 粒子の種類

粒子は格子線に沿って移動するので、各格子点では格子の種類に応じた速度を持つことになる。例えば2次元の六角格子においては、図2に示すように6方向に速度の大きさが1の6種類の粒子、および速度0の粒子を加えた計7個の粒子を持つモデル (2D7V モデル) が最も簡単なモデルである。これに速度の大きさが2および3を加えた(2D13V モデル)および 2D19V モデル)も用いられる。正方形格子および3次元立方体格子についても同様に粒子の速度が定義される (図3, 図4参照)。

2.4 マクロな方程式の導出

式 (1) を時刻 t , 空間座標 $\mathbf{r}$ を中心に2次までTaylor展開すると

$$\frac{\partial f_a}{\partial t} + c_{aa} \frac{\partial f_a}{\partial r_a} + \frac{1}{2} \tau c_{aa} c_{a\beta} \frac{\partial^2 f_a}{\partial r_a \partial r_\beta} + \tau c_{aa} \frac{\partial^2 f_a}{\partial t \partial r_a} + \frac{1}{2} \tau \frac{\partial^2 f_a}{\partial t^2} \cong -\frac{1}{\tau \phi} (f_a - f_a^{(0)}) \quad (5)$$

ここでKnudsen 数に相当する微小量 ε で

$$f_a = f_a^{(0)} + f_a^{neq} = f_a^{(0)} + \varepsilon f_a^{(1)} + \varepsilon^2 f_a^{(2)} + \dots, \quad f_a^{(l)} (l=1,2,\dots) : \text{非平衡成分} \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2}, \quad \frac{\partial}{\partial r_a} \rightarrow \varepsilon \frac{\partial}{\partial r_{1a}} \quad (7a,b)$$

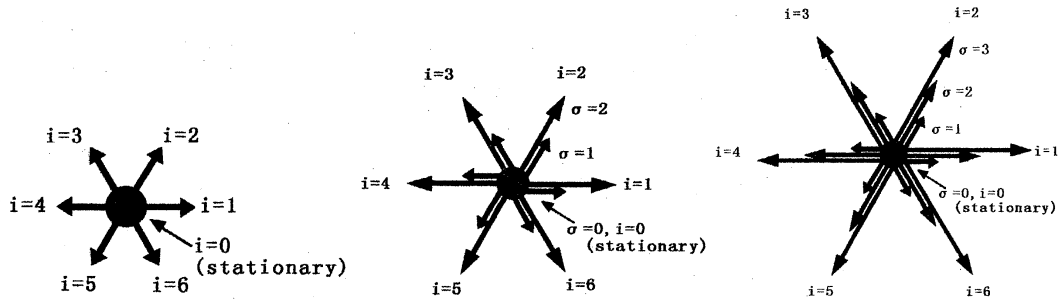
と展開できるとする。詳細は省略するが Chapman-Enskog 展開を適用し、また次節で説明するテンソルの等方性を考慮すると、圧縮性流体に対する連続の式、Navier-Stokes 方程式、エネルギー方程式を得る。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r_{1a}} (\rho u_a) = 0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_a) + \frac{\partial}{\partial r_{1\beta}} (\rho u_a u_\beta) = -\frac{\partial P}{\partial r_{1a}} + \frac{\partial}{\partial r_{1\beta}} \mu \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial r_{1a}} + \frac{\partial u_a}{\partial r_{1\beta}} \right) + \frac{\partial}{\partial r_{1a}} \left(\lambda \frac{\partial u_\gamma}{\partial r_{1\gamma}} \right) + G \quad (9)$$

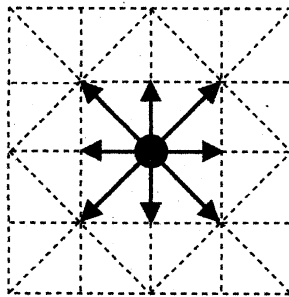
$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho e + \frac{1}{2} \rho u^2 \right) + \frac{\partial}{\partial r_{1a}} \left(\rho e + P + \frac{1}{2} \rho u^2 \right) u_a \\ &= \frac{\partial}{\partial r_{1a}} \left(\kappa' \frac{\partial e}{\partial r_{1a}} \right) + \frac{\partial}{\partial r_{1a}} \left\{ \mu u_\beta \left(\frac{\partial u_\beta}{\partial r_{1a}} + \frac{\partial u_a}{\partial r_{1\beta}} \right) \right\} + \frac{\partial}{\partial r_{1a}} \left(\lambda \frac{\partial u_\beta}{\partial r_{1\beta}} u_a \right) + H \end{aligned} \quad (10)$$

ここでGおよびHは微小な項であり、Mach 数が小さいとき無視することができる。粘性係数および熱伝導係数などの具体的な表式は、たとえば[1]を参照願いたい。

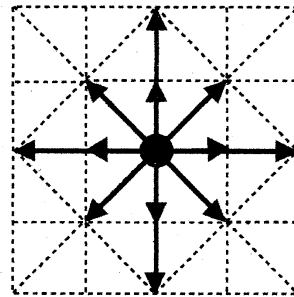


(a) 2D7V(1-speed) model (c) 2D13V(2-speed)model (d) 2D19V(3-speed)model

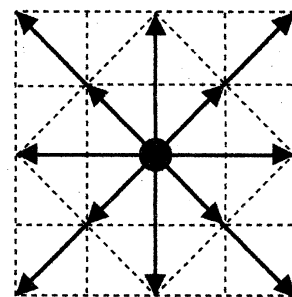
図2 2次元FHP (正六角形) 格子での粒子の速度



(a) 2D9V model

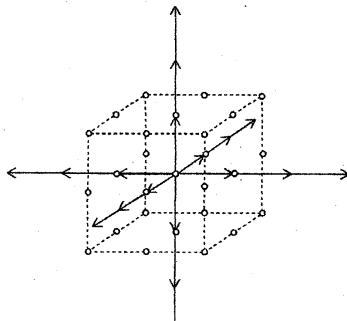


(b) 2D13VQ model

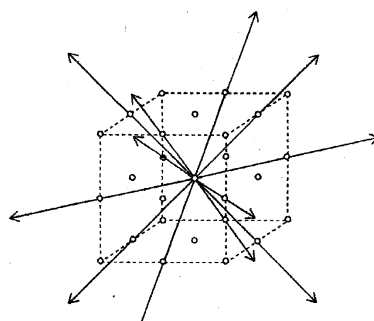


(c) 2D13VC model

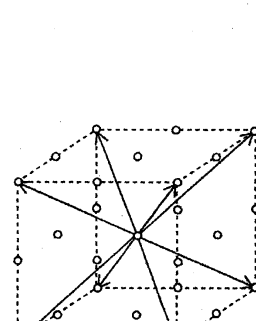
図3 2次元正方形格子での粒子の速度



(a) $(p,k)=(1,1), (1,2), (1,3)$
 $i=1 \cdots 6$



(b) $(p,k)=(2,2) \quad i=1 \cdots 12$



(c) $(p,k)=(3,1) \quad i=1 \cdots 8$

図4 3次元立方体格子での粒子の速度 ($p=1$: 辺に沿う方向、 $=2$: 辺の midpoint に向かう方向、 $=3$: 頂点に向かう方向、 k : 基本の速度に対する整数倍の速度の大きさ)

2.5 テンソルの等方性

粒子の速度の積からでてくる、テンソルは3次元の格子では

$$1 \text{ 階: } \sum_i c_{pk\alpha} = 0, \quad 3 \text{ 階: } \sum_i c_{pk\alpha} c_{pk\beta} c_{pk\gamma} = 0 \quad (11), (12)$$

$$2 \text{ 階: } \sum_i c_{pk\alpha} c_{pk\beta} = \frac{bc_{pk}^2}{D} \delta_{\alpha\beta} \quad (13)$$

(D :次元数, b :運動方向数、 $p=1,2,3$ 、 $k=1,2,3$)

$$4\text{階} : \sum_i c_{pki\alpha} c_{pki\beta} c_{pki\gamma} c_{pki\delta} = \begin{cases} 2(kc)^4 \delta_{\alpha\beta\gamma\delta}, & (p=1, k=1,2,3) \\ 4(kc)^4 (\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta} - \delta_{\alpha\beta\gamma\delta}), & (p=2, k=2) \\ 8(kc)^4 (\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta} - 2\delta_{\alpha\beta\gamma\delta}), & (p=3, k=1) \end{cases} \quad (14)$$

ここで

$$\delta_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1 & (\alpha = \beta \text{ のとき}) \\ 0 & (\text{それ以外の場合}) \end{cases}, \quad (15)$$

$$\delta_{\alpha\beta\gamma\delta} = \begin{cases} 1 & (\alpha = \beta = \gamma = \delta \text{ のとき}) \\ 0 & (\text{それ以外の場合}) \end{cases} \quad (16)$$

$$\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} \quad (17)$$

である。上の結果から、第1節で紹介した格子を用いると、(1)奇数階のテンソルおよび2階のテンソルは等方的である。(2)4階テンソルの成分のうち、 $\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ は等方的であり、 $\delta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ は非等方的であることから、 $p=1$ のみの格子だけでは $\delta_{\alpha\beta\gamma\delta}$ は消すことができず、 $p=2$ あるいは $p=3$ の速度を持つ粒子を導入する必要があることがわかる[6]。4階のテンソルまで等方性が保証されれば、高次の微小項を除いて Naier-Stokes 方程式が導かれる。

3. 重力場における成層流体

3.1 非圧縮性流体モデル

重力場における非圧縮性成層流体に対する、2粒子モデル[2,7]を簡単に説明する。2次元の場合を考え格子は FHP 格子を用いる。格子ボルツマン方程式は

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i, t+1) = f_i(\mathbf{r}, t) + G_{ij} f_j - \frac{1}{\phi} [f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{(0)}(\mathbf{r}, t)] \quad (18)$$

であり、平衡分布関数は

$$f_a^{(0)} = F_\sigma \rho_a (1 - 2Bc_{ia}u_a + 2B^2(c_{ia}u_a)^2 + Bu^2 - 2B^2c_{ia}u_a u^2 - \frac{4}{3}B^3(c_{ia}u_a)^3) \quad (19)$$

と表す。ここで添え字 a は $a=r$: 赤粒子、 $a=b$: 青粒子であり、また σ については $\sigma = 0$: 静止粒子、 $\sigma = 1$: 運動粒子 に対応している。流体の密度および運動量、応力テンソルはそれぞれ

$$\rho = \sum_a \sum_i f_{ai}^{(0)} = \rho_r + \rho_b = \sum_i f_{ri}^{(0)} + \sum_i f_{bi}^{(0)} \quad (20)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_a \sum_i f_{ai}^{(0)} \mathbf{c}_{ia} \quad (21)$$

$$P + \rho u_\alpha u_\beta = \sum_a \sum_i f_{ai}^{(0)} c_{ia} c_{i\beta} \quad (22)$$

と定義され、式(16)中の係数および圧力 P は

$$B = -\frac{D+2}{2c^2}, \quad F_1 = \frac{D}{b(D+2)}, \quad F_0 = \frac{2}{D+2}, \quad P = \frac{\rho c^2}{D+2} \quad (23a,b,c,d)$$

と求められる。ここで $c=|c_{i\alpha}|$ (粒子の速度の絶対値), $b=6$ (速度の方向の数), $D=2$ (次元数) である。

式(18)における G_{ij} は重力の効果を表す 7×7 のマトリックスで、 $i=j=2$ および $i=j=3$ のとき $-\gamma$ 、 $i=5, j=3$ および $i=6, j=2$ のとき γ 、それ以外の要素はすべて 0 であり、 γ は分布関数を変化させる割合である。このマトリックスは青の粒子のみに作用して、粒子の分布関数を図 5 に示すように変化させ、鉛直下方に衝撃力を加えることになる。

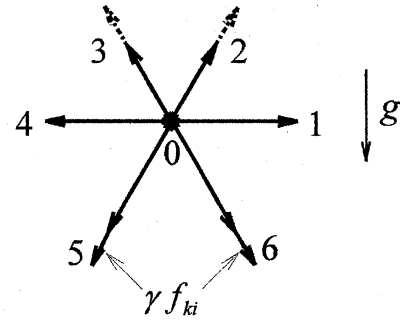


図5 重力の効果

3.2 マクロな基礎方程式

第2節でマクロな支配方程式を求めたのと同様にして、連続の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (24)$$

および Navier-Stokes 方程式

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla(\rho \mathbf{u}) = -\nabla P + \mathbf{G} + \nu \nabla^2(\rho \mathbf{u}) + O(\varepsilon^3) \quad (25)$$

を得る。ここで動粘性係数は

$$\nu = \frac{c^2}{D+2} \left(\phi - \frac{1}{2} \right) \quad (26)$$

となる。

3.3 温度の定義

流体の温度を赤の粒子と青の粒子の密度を用いて

$$T = \frac{\rho_r}{\rho_r + \rho_b} = \frac{\rho_r}{\rho} = \frac{\sum_{i=0}^d f_{ri}}{\rho} \quad (0 \leq T \leq 1) \quad (27)$$

と定義する。同様に密度を

$$\bar{\rho} = \frac{\rho_b}{\rho_r + \rho_b} = \frac{\rho_b}{\rho} \quad (0 \leq \bar{\rho} \leq 1) \quad (28)$$

と定義する。このモデルでは粒子の衝突において、エネルギーの保存を考慮せず、熱力学的な温度を定義することはできないことに注意する。

この2粒子モデルにおいて、密度と温度の関係は $T + \bar{\rho} = 1$ となり、体積膨張率を β とすると $\beta = -1$ となる。一方あとの計算で示すように、全体の密度 ρ は場の全域を通じてほとんど変化しない。温度を支配する方程式は、

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u_a \frac{\partial T}{\partial x_a} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x_a^2} + \frac{\partial}{\partial x_a} [2\gamma(1-T)]\delta_{2a} + O(\varepsilon^3) \quad (29)$$

となり、熱伝導係数 κ は

$$\kappa = \left(\phi - \frac{1}{2}\right) \frac{c^2}{D+2} \quad (30)$$

と表され、Prandtl 数は式(23)を考慮すると

$$\text{Pr} = \frac{\nu}{\kappa} = 1 \quad (31)$$

となることがわかる。

3.4 重力の効果と Boussinesq 近似方程式

いま流速が十分小さいとすると、 $f_{ib} \approx f_b$ ($i=1, \dots, 6$) および $f_{0b} \approx 6f_{ib}$ ($i=1, 2, \dots, 6$) であると仮定する事ができる。このとき重力の項は

$$\mathbf{G} = -\frac{\rho_b}{3} \gamma \cos\left(\frac{\pi}{6}\right) \mathbf{z} = \rho_b \mathbf{g} \quad (32)$$

となり、重力加速度は γ と次のように関係づけられる。

$$\mathbf{g} = -\frac{1}{3} \gamma \cos\left(\frac{\pi}{6}\right) \mathbf{z} \quad (\text{定数}) \quad (33)$$

式(25)の両辺を全密度 ρ (一定) で割ると、Boussinesq 近似を附した Navier-Stokes 方程式

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \rho \mathbf{g} + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + O(\varepsilon^3) \quad (34)$$

が得られる。

一方、重力の効果(衝突過程における粒子分布関数を変化させる)は、各時間ステップ衝突過程においてすべての格子点で同時に起こるので、衝突過程後は下向きの余分な流速を持つことになる。この下向きの流れは粒子の並進過程でうち消されるので、これら両過程の平衡分布関数の平均をとることが必要となる。すなわち

$$f_i^c(\mathbf{r}, t) = G_i - \frac{1}{\phi} [f_i(\mathbf{r}, t) - f_i^{(0)}(\mathbf{r}, t)] \quad (\text{衝突後の分布関数}) \quad (35)$$

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{c}_{ia}, t+1) = f_i(\mathbf{r}, t) + f_i^c(\mathbf{r}, t) \quad (\text{並進後の分布関数}) \quad (36)$$

の算術平均を取ることににより、正しい流れが得られるものと考えられる。例えばここで用

いている2粒子モデルでの流体が、上下に固体壁のある容器内に閉じこめられており、これに重力が作用して浮力と重力が釣り合っている場合を考える。

このときの鉛直方向速度の時間変化を図6に示す。 u^a 、 u^c 、 u^n はそれぞれ、平均して得られる分布関数、衝突後の分布関数、および並進後の分布関数から得られる鉛直方向速度であり、 u^a のみが0に収束しているのがわかる。

4. 計算例

4.1 キャビティー内熱源による自然対流

図7に示すような正方形容器の底面の中央に熱源があり、重力は鉛直下方に働く場合の流れを、2粒子格子BGKモデルを用いて解く。流れを支配するパラメータはグラスホフ数で

$$Gr = \frac{1}{3} \frac{\gamma \rho_0 \cos(\pi/6) L^3}{\nu^2} \quad (37)$$

と表される。境界条件はすべて粘着条件と熱流束条件を用いた。熱流束は熱源では青粒子を一定の割合で赤粒子に変化させ、他の低温壁では逆に赤粒子を青粒子に変化させる。

図8は、格子ボルツマン法での計算結果を、差分法で求めた結果と比較したものである。両者はよく一致している。

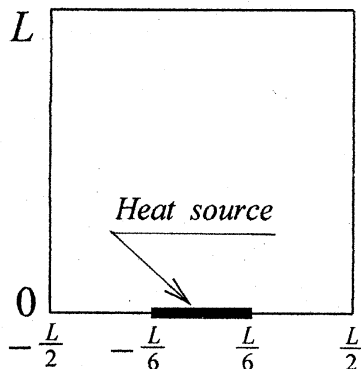


図7 正方形キャビティー内の熱源

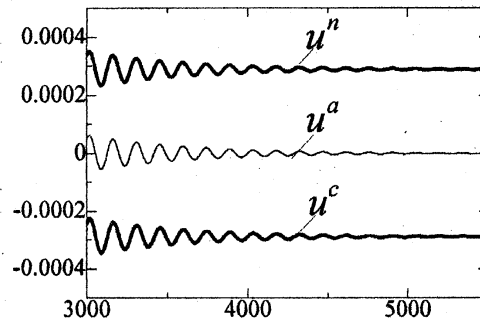
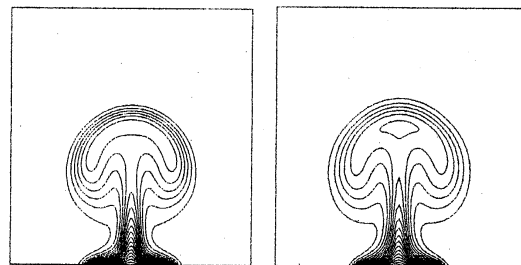
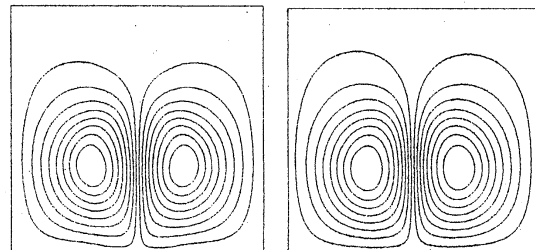


図6 重力場での静止流体

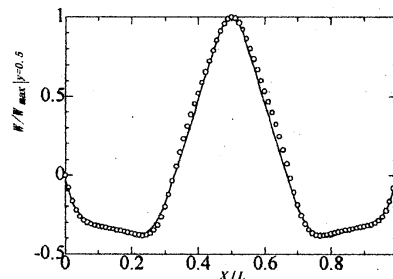


(a) Temperature



(b) Streamlines

LBM 460000 step FDM t=6.6



(c) Vertical velocity along the horizontal centerline

図8 正方形キャビティー内自然対流 計算結果と差分法での結果の比較 (a)温度分布 (b)流線 (c)中央線上の速度の鉛直成分分布 (実線: 差分法、○: LBM) ($Gr = 1 \times 10^6$)

図9には密度分布を示した。全粒子密度 ρ の変化の小さいことがわかる。

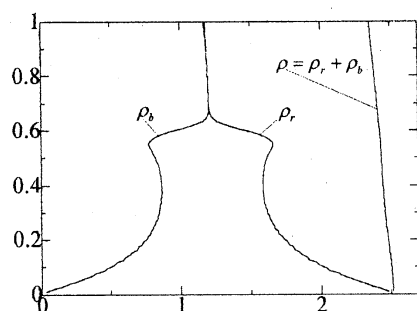
4.2 2次元ベナール対流

上側の低温壁および下側の高温壁による、2次元ベナール対流を計算した。壁面では粘着条件、および定温条件(上側の壁)と熱流速条件(下側の壁)を用いた。

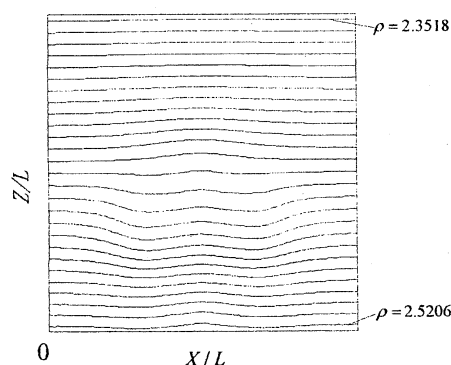
図10に温度分布と流線を示す。

4.3 立方体容器内の3次元自然対流

詳細は省くが、立方体格子を用いた3次元モデルでの計算結果を図11に示す。

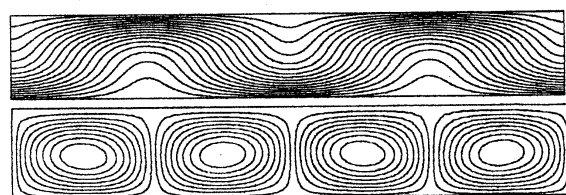


(a) 中央断面上での赤粒子、青粒子、および全粒子密度

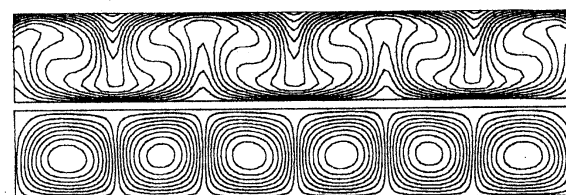


(b) 全粒子密度の空間分布

図9 密度分布 ($Gr = 1 \times 10^6$)



(a) $Gr = 5 \times 10^5$



(b) $Gr = 5 \times 10^6$

図10 ベナール対流 (上: 温度分布、下: 流線、Grashof 数は Rayleigh 数に等しい)

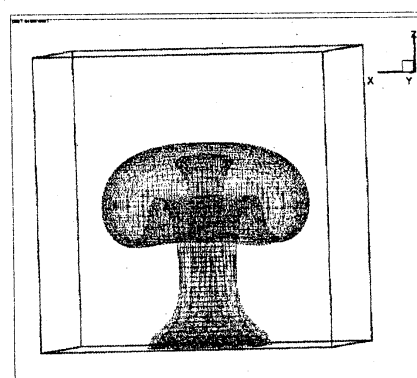


図11 3次元立方体内の自然対流

4.1 熱流体モデルを用いた計算

これも詳細は省くが、第2節で述べた熱流体モデル(粒子の衝突の際にエネルギー保存則が成り立つ)を用いて、正方容器内の自然対流を計算した。このモデルでは粒子の種類は1つだけであり、重力はこの粒子に対して第3節と同じ手法で導入する。温度は式(2c)で与えられる内部エネルギーと、定圧

比熱を用いて $e = c_v T$ なる関係があり、熱力学的にきちんと定義される。また、Prandtl 数は 1 である。計算結果を図 12 に示す。

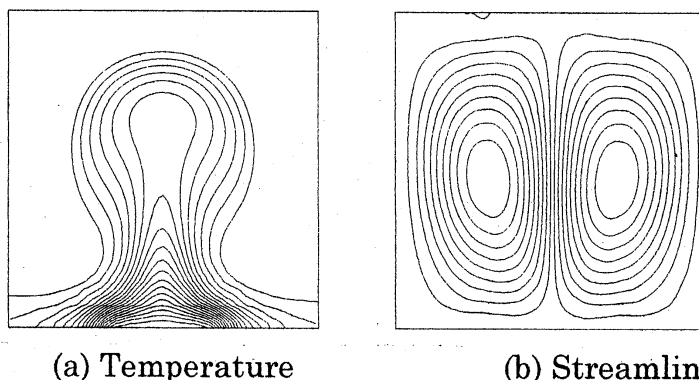


図 12 熱流体モデルによる正方形キャビティー内の自然対流

4. まとめ

格子ボルツマン法、特に格子 B G K モデルを簡単に解説し、このモデルを用いて自然対流の数値シミュレーションを行う手法について述べた。

参考文献

- [1] 蔦原、高田、片岡「格子気体法、格子ボルツマン法」コロナ社 (1999) .
- [2] D.Rothman and S.Zaleski, "Lattice-Gas Cellular Automata" Cambridge UP (1997).
- [3] Y.H.Qian, S.Succi and S.A.Orszag, "Recent Advances in Lattice Boltzmann Computing," in Ann. Rev. of Comp. Phy. III, D. Stauffer ed. World Scientific, (1995) 195-242.
- [4] U. Frisch, et.al., "Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions," Complex Systems 1, (1987) 649-707.
- [5] Flekkoy, E.G., "Lattice Bhatnagar-Gross-Krook models for miscible fluids," Phys. Rev. E, 47, 6 (1993) 4247-4257.
- [6] Wolfram, S., "Cellular automaton fluids 1: Basic theory," J. Stat. Phys., 38, 5/6 (1985) 471-526
- [7] 蔦原、馮、片岡、高田 「格子 Boltzmann 法による自然対流の数値計算」機械学会論文集 B 編 64 (1998) 1966-1972.