

Is It Possible to Construct a Thermally Correct BGK Model of Lattice Boltzmann Method?

○渡利 實 (航技研), 萬原道久 (神大自然科学研究科)

Minoru WATARI* and Michihisa TSUTAHARA**

*Wind Tunnel Technology Center, NAL, Tokyo 182-8522, Japan

**Graduate School of Science and Technology, Kobe University, Kobe 657-8501, Japan

Multi-speed thermal models of the lattice Boltzmann method (LBM) that have a single relaxation (BGK) scheme have been proposed by several authors. While these models are intended to correctly represent heat characteristics and compressibility, existing models do not provide satisfactory accuracy. This paper discusses the possibility of a correct model and how to construct it. It is concluded that it is possible to construct a thermally correct two-dimensional multi-speed LBM BGK model. However, a correct three-dimensional multi-speed LBM BGK thermal model is theoretically impossible.

1. はじめに

流体の圧縮性と熱を正確に扱うことのできる multi-speed BGK 型格子ボルツマン法 (LBM) モデルとしていくつか¹⁻³⁾ 提案されている。しかし、数値シミュレーションに実際に適用してみるとその多くが十分な精度の解を与えない。正しい BGK 型熱流体 LBM モデルを導く条件と、そのような条件を満足するモデルは構築可能なのか、を研究した。

2. 正しい熱流体 LBM モデルを導く条件

正しい BGK 型熱流体 LBM モデルを導くための局所平衡分布関数 $f_{ki}^{(0)}$ の条件は以下に示すとおりである。

$$\sum_k \sum_i f_{ki}^{(0)} = \rho \quad (1)$$

$$\sum_k \sum_i f_{ki}^{(0)} c_{k\alpha} = \rho u_\alpha \quad (2)$$

$$\sum_k \sum_i f_{ki}^{(0)} c_{k\alpha} c_{k\beta} = \rho \left(\frac{2}{D} e \delta_{\alpha\beta} + u_\alpha u_\beta \right) \quad (3)$$

$$\sum_k \sum_i f_{ki}^{(0)} c_{k\alpha} c_{k\beta} c_{k\gamma} = \rho \left[\frac{2}{D} e (u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma \delta_{\alpha\beta}) + u_\alpha u_\beta u_\gamma \right] \quad (4)$$

$$\sum_k \sum_i f_{ki}^{(0)} \frac{c_k^2}{2} = \rho \left(e + \frac{u^2}{2} \right) \quad (5)$$

$$\sum_k \sum_i f_{ki}^{(0)} \frac{c_k^2}{2} c_{k\alpha} = \rho u_\alpha \left(\frac{D+2}{D} e + \frac{u^2}{2} \right) \quad (6)$$

$$\sum_k \sum_i f_{ki}^{(0)} \frac{c_k^2}{2} c_{k\alpha} c_{k\beta} = \rho \left[\frac{2}{D} e \left(\frac{D+2}{D} e + \frac{u^2}{2} \right) \delta_{\alpha\beta} + u_\alpha u_\beta \left(\frac{D+4}{D} e + \frac{u^2}{2} \right) \right] \quad (7)$$

ここで ρ : 密度、 u : 速度、 e : 内部エネルギー、 c_{ki} : 粒子速度であり、添字 k は粒子速度の大きさ、 i は方向を示す。 D は空間次元、添字 α, β, γ は各軸成分を示す。

(7) 式が示すように局所平衡分布関数は速度 u に関し 4 次項まで必要であり、したがって局所平衡分布関数は 4 階テンソルまで含むようになる。(4) 式左辺は 3 階テンソル + $f_{ki}^{(0)}$ の 4 階テンソル = 計 7 階テンソルを含み、粒子速度の選択に当っては 7 階テンソルまで等方的であることが必要である。

3. LBM 粒子速度

LBM で用いられる粒子速度は 2 次元、3 次元それぞれ図 1、図 2 に示すもの、及びそれらの整数倍速度の粒子である (2 次元 6 角格子では 5 階テンソル等方性までしか保証されないので検討から除いた)。図に示した粒子速度の奇数階テンソルはゼロであり、偶数階テンソルは以下の式で表される。

$$\sum_i 1 = \pi_k \quad (8)$$

$$\sum_i c_{k\alpha} c_{k\beta} = \chi_k \delta_{\alpha\beta} \quad (9)$$

$$\sum_i c_{k\alpha} c_{k\beta} c_{k\gamma} c_{k\delta} = \varphi_k \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} + \psi_k \delta_{\alpha\beta\gamma\delta} \quad (10)$$

$$\sum_i c_{k\alpha} c_{k\beta} c_{k\gamma} c_{k\delta} c_{k\epsilon} c_{k\zeta} = \theta_k \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta}^{(6)} + \omega_k \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta}^{(4,2)} + \lambda_k \delta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta} \quad (11)$$

$$\sum_i \frac{c_k^2}{2} = \Pi_k \quad (12)$$

$$\sum_i \frac{c_k^2}{2} c_{k\alpha} c_{k\beta} = X_k \delta_{\alpha\beta} \quad (13)$$

$$\sum_i \frac{c_k^2}{2} c_{k\alpha} c_{k\beta} c_{k\gamma} c_{k\delta} = \Phi_k \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} + \Psi_k \delta_{\alpha\beta\gamma\delta} \quad (14)$$

$$\sum_i \frac{c_k^2}{2} c_{k\alpha} c_{k\beta} c_{k\gamma} c_{k\delta} c_{k\epsilon} c_{k\zeta} = \Theta_k \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta}^{(6)} + \Omega_k \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta}^{(4,2)} + \Lambda_k \delta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta} \quad (15)$$

ここで $\delta_{\alpha\beta}, \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)}, \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta}^{(6)}$ は等方テンソル、 $\delta_{\alpha\beta\gamma\delta}, \delta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta}, \Delta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta}^{(4,2)}$ は非等方テンソルであり、次式で定義される。

$$\delta_{\alpha\beta} = 1 \text{ (if } \alpha = \beta \text{), } = 0 \text{ (otherwise)}$$

$$\delta_{\alpha\beta\gamma\delta} = 1 \text{ (if } \alpha = \beta = \gamma = \delta \text{), } = 0 \text{ (otherwise)}$$

$$\delta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta} = 1 \text{ (if } \alpha = \beta = \gamma = \delta = \epsilon = \zeta \text{), } = 0 \text{ (otherwise)} \quad (16)$$

$$\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}$$

$$\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta}^{(6)} = \delta_{\alpha\beta} \Delta_{\gamma\delta\epsilon\zeta}^{(4)} + \delta_{\alpha\gamma} \Delta_{\beta\delta\epsilon\zeta}^{(4)} + \delta_{\alpha\delta} \Delta_{\beta\gamma\epsilon\zeta}^{(4)} + \delta_{\alpha\epsilon} \Delta_{\beta\gamma\delta\zeta}^{(4)} + \delta_{\alpha\zeta} \Delta_{\beta\gamma\delta\epsilon}^{(4)}$$

$$\Delta_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta}^{(4,2)} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta\epsilon\zeta} + \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta\epsilon\zeta} + \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma\epsilon\zeta} + \delta_{\alpha\epsilon} \delta_{\beta\gamma\delta\zeta} + \delta_{\alpha\zeta} \delta_{\beta\gamma\delta\epsilon} + \dots$$

係数 $\pi_k, \chi_k, \varphi_k, \dots$ の値を表 1、2 に示す。表では粒子のスピード c_k に対する依存度により 5 グループに分けた。基本粒子の 3 倍速を用いると c_k^n グループの係数は 3ⁿ 倍になる。

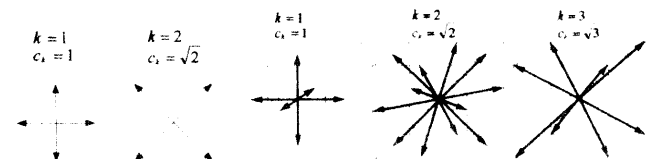


Fig. 1 Particle velocities in 2D Fig. 2 Particle velocities in 3D

Table 1 Specific values for π_k in 2D

Group	Parameter	$k=1$	$k=2$
c_k^0	π_k	4	4
	χ_k	2	4
	Π_k	2	4
c_k^2	φ_k	0	4
	ψ_k	2	-8
	X_k	1	4
c_k^4	θ_k	0	$\frac{4}{3}$
	ω_k	0	0
	λ_k	2	-16
	Φ_k	0	4
	Ψ_k	1	-8
	Θ_k	0	$\frac{4}{3}$
c_k^6	Ω_k	0	0
	Λ_k	1	-16

Table 2 Specific values for π_k in 3D

Group	Parameter	$k=1$	$k=2$	$k=3$
c_k^0	π_k	6	12	8
	χ_k	2	8	8
	Π_k	3	12	12
c_k^2	φ_k	0	4	8
	ψ_k	2	-4	-16
	X_k	1	8	12
c_k^4	θ_k	0	8	0
	ω_k	0	4	-16
	λ_k	2	-52	128
	Φ_k	0	4	12
	Ψ_k	1	-4	-24
	Θ_k	0	8	0
c_k^6	Ω_k	0	4	-24
	Λ_k	1	-52	192

4. Global に係数を与える局所平衡分布関数の場合

文献³⁾のモデルの局所平衡分布関数は Maxwell 分布を速度に関し展開した多項式全体に対し重み係数 F_k を置く。

速度 4 次項までとると以下の通り。

$$f_{\alpha}^{(0)} = \rho F_k \left[\left(1 - \frac{D}{4e} u^2 + \frac{D^2}{32e^2} u^4\right) + \frac{D}{2e} \left(1 - \frac{D}{4e} u^2\right) c_{\alpha i} u_i \right. \\ \left. + \frac{D^2}{8e^2} \left(1 - \frac{D}{4e} u^2\right) c_{\alpha i} c_{\alpha j} u_i u_j + \frac{D^3}{48e^3} c_{\alpha i} c_{\alpha j} c_{\alpha k} u_i u_j u_k \right. \\ \left. + \frac{D^4}{384e^4} c_{\alpha i} c_{\alpha j} c_{\alpha k} c_{\alpha l} u_i u_j u_k u_l \right] \quad (17)$$

この(17)式を条件(1)~(7)に代入し、奇数階テンソルはゼロ、偶数階テンソルは式(8)~(15)で表されることを使えば係数 F_k を決める条件: 表 3 が得られる。これは線形代数方程式である。2次元モデルを作る場合を考えよう。図 1 の $k=1$ 粒子の 1、2、3 倍速および $k=2$ 粒子の 1、2 倍速、計 5 種類の粒子速度で構成することを仮定して、条件式の一部、例えば c_k^4 グループの条件式を書き下すと以下のようになる。

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 \times 2^4 & 0 \times 3^4 & 4 & 4 \times 2^4 \\ 2 & 2 \times 2^4 & 2 \times 3^4 & -8 & -8 \times 2^4 \\ 1 & 1 \times 2^4 & 1 \times 3^4 & 4 & 4 \times 2^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{11} \\ F_{12} \\ F_{13} \\ F_{21} \\ F_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^2 \\ 0 \\ 2e^2 \end{bmatrix} \quad (18)$$

この方程式が解を持つか否かは次の $rank$ で判定できる。

$$rankA = rank \begin{bmatrix} 0 & 0 \times 2^4 & 0 \times 3^4 & 4 & 4 \times 2^4 \\ 2 & 2 \times 2^4 & 2 \times 3^4 & -8 & -8 \times 2^4 \\ 1 & 1 \times 2^4 & 1 \times 3^4 & 4 & 4 \times 2^4 \end{bmatrix} = rank \begin{bmatrix} 0 & 4 \\ 2 & -8 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} \quad (19)$$

$$rankB = rank \begin{bmatrix} 0 & 0 \times 2^4 & 0 \times 3^4 & 4 & 4 \times 2^4 & e^2 \\ 2 & 2 \times 2^4 & 2 \times 3^4 & -8 & -8 \times 2^4 & 0 \\ 1 & 1 \times 2^4 & 1 \times 3^4 & 4 & 4 \times 2^4 & 2e^2 \end{bmatrix} = rank \begin{bmatrix} 0 & 4 & e^2 \\ 2 & -8 & 0 \\ 1 & 4 & 2e^2 \end{bmatrix} \quad (20)$$

したがって、採用する粒子いかに関わらず基本粒子に対する $rank$ 判定で可解か非可解かの判定ができる。結果は表 4 に示す通り $rankA = rankB$ 、即ち 2次元モデルは構築可能である。 $rank$ の合計は 8。8 種類の粒子速度が必要である。静止粒子、図 1 の $k=1$ 粒子の 1、2、3、4 倍速、および $k=2$ 粒子の 1、2、3 倍速で構成したモデルを使ってシミュレーションを実施した。Couette 流の内部エネルギー分布結果を図 3 に、垂直衝撃波シミュレーションの圧力、マッハ数等の分布結果を図 4 に示す。いずれも理論解と完全に一致した。

同様な $rank$ 判定を 3次元: 図 2 の粒子速度について行えば表 5 が得られる。 c_k^6 グループで $rankA < rankB$ 、したがって 3次元モデルは構築不可能である。

Table 3 Equations for F_k

Group	Equations
c_k^0	$\sum_i \pi_i F_i = 1$
c_k^2	$\sum_i \chi_i F_i = \frac{2}{D} e$ $\sum_i \Pi_i F_i = e$
c_k^4	$\sum_i \phi_i F_i = \frac{4}{D^2} e^2$ $\sum_i \psi_i F_i = 0$ $\sum_i X_i F_i = \frac{2(D+2)}{D^2} e^2$
c_k^6	$\sum_i \theta_i F_i = \frac{8}{D^3} e^3$ $\sum_i \omega_i F_i = 0$ $\sum_i \lambda_i F_i = 0$ $\sum_i \Phi_i F_i = \frac{4(D+4)}{D^3} e^3$ $\sum_i \Psi_i F_i = 0$
c_k^8	$\sum_i \Theta_i F_i = \frac{8(D+6)}{D^4} e^4$ $\sum_i \Omega_i F_i = 0$ $\sum_i \Lambda_i F_i = 0$

Table 4 Rank evaluations for 2D model

Group	rankA	rankB
c_k^0	1	1
c_k^2	1	1
c_k^4	2	2
c_k^6	2	2
c_k^8	2	2

Table 5 Rank evaluations for 3D model

Group	rankA	rankB
c_k^0	1	1
c_k^2	1	1
c_k^4	3	3
c_k^6	3	4
c_k^8	3	3

5. 係数が分布した局所平衡分布関数の場合

文献^{1,2)}のモデルは係数を展開項それぞれに置く形をとる。

$$f_{\alpha}^{(0)} = \rho [A_k + M_k c_{\alpha i} u_i + G_k u^2 + J_k c_{\alpha i} c_{\alpha j} u_i u_j \\ + Q_k c_{\alpha i} c_{\alpha j} u_i u_j + H_k c_{\alpha i} c_{\alpha j} c_{\alpha k} u_i u_j u_k \\ + S_k u^4 + R_k c_{\alpha i} c_{\alpha j} c_{\alpha k} u_i u_j u_k + T_k c_{\alpha i} c_{\alpha j} c_{\alpha k} c_{\alpha l} u_i u_j u_k u_l] \quad (21)$$

係数 $A_k, M_k, G_k, \dots$ を決める条件を表 6 に示す。2次元: 図 1 の粒子速度について $rank$ 判定を行えば 2次元モデルは構築可能であることがわかり文献²⁾の 2次元モデルと全く一致する結果を得る。しかし、3次元モデルについては H_k の c_k^6 グループで $rankA < rankB$ になり構築不可能ということが判る。

引用文献

- 1) F. J. Alexander et al, *Phys. Rev. E* **47**:R2249-52 (1993).
- 2) Y. Chen, et al, *Phys. Rev. E* **50**:2776-83 (1994).
- 3) N. Takada, et al, *JSME B* **64**, 628:4-11 (1998).

Table 6 Equations for $A_k, M_k, G_k, \dots$

Group	Equations	Group	Equations
A_k	$\sum_i \pi_i A_i = 1$	Q_k	$\sum_i \chi_i Q_i = -3 \sum_i \phi_i H_i$ $\sum_i \psi_i Q_i = -\frac{1}{2}$ $\sum_i \Psi_i Q_i = 0$
M_k	$\sum_i \chi_i M_i = 1$ $\sum_i \phi_i M_i = \frac{2}{D} e$ $\sum_i \psi_i M_i = 0$ $\sum_i X_i M_i = \frac{D+2}{D} e$	H_k	$\sum_i \psi_i H_i = 0$ $\sum_i \Phi_i H_i = \frac{D+4}{12}$ $\sum_i \theta_i H_i = \frac{1}{6}$ $\sum_i \omega_i H_i = 0$ $\sum_i \lambda_i H_i = 0$ $\sum_i \Psi_i H_i = 0$
G_k	$\sum_i \pi_i G_i = -\sum_i \chi_i J_i$ $\sum_i \chi_i G_i = -\frac{1}{2}$ $\sum_i X_i G_i = -\frac{D+2}{2D} e$	S_k	$\sum_i \pi_i S_i = -\sum_i \chi_i R_i - 3 \sum_i \phi_i T_i$ $\sum_i \chi_i S_i = -\sum_i \phi_i R_i - 3 \sum_i \theta_i T_i$ $\sum_i X_i S_i = -\sum_i \Phi_i R_i - 3 \sum_i \Psi_i T_i$
J_k	$\sum_i \phi_i J_i = \frac{1}{2}$ $\sum_i \psi_i J_i = 0$ $\sum_i X_i J_i = \frac{D+2}{4}$ $\sum_i \Phi_i J_i = \frac{D+4}{2D} e$ $\sum_i \Psi_i J_i = 0$	R_k	$\sum_i \chi_i R_i = -\sum_i (3\Phi_i + \frac{3D}{2}\theta_i) T_i$ $\sum_i \phi_i R_i = -6 \sum_i \theta_i T_i$ $\sum_i \psi_i R_i = 0$ $\sum_i \Phi_i R_i = -6 \sum_i \Theta_i T_i + \frac{1}{4}$ $\sum_i \Psi_i R_i = 0$
		T_k	$\sum_i \psi_i T_i = 0$ $\sum_i \omega_i T_i = 0$ $\sum_i \lambda_i T_i = 0$ $\sum_i \Psi_i T_i = 0$ $\sum_i \Omega_i T_i = 0$ $\sum_i \Lambda_i T_i = 0$

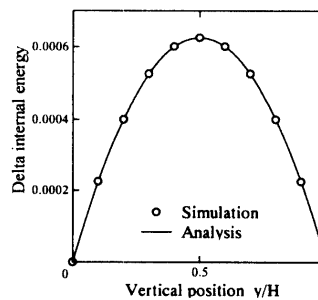


Fig.3 Internal energy distribution in Couette flow

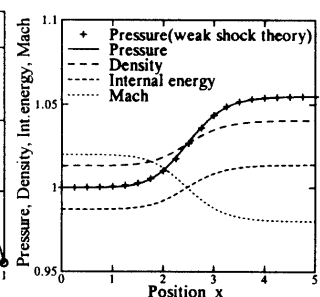


Fig.4 Fluid parameter variation in normal shock