Title	格子ボルツマン法に基づく概念を利用した熱流動解析アルゴリズムの研究開発
Author(s)	中村, 和彦
Citation	
Issue Date	1998-03
Type	Thesis or Dissertation
Text version	author
URL	http://hdl.handle.net/10119/1132
Rights	
Description	Supervisor:松澤 照男, 情報科学研究科, 修士

修 士 論 文

格子ボルツマン法に基づく概念を利用した熱流動解析アルゴリズムの研究開発

指導教官　松澤照男 教授

北陸先端科学技術大学院大学
情報科学研究科情報システム学専攻

中村和彦

1998 年 2 月 13 日

要 旨

本研究では、数値流体解析法のひとつである格子ボルツマン法で、熱流動現象を扱う。格子ボルツマン法における粒子の状態数、平衡分布関数、外力の扱い、境界条件について述べる。

目 次

第 1 章

はじめに

現在、数値流体解析では、差分法、有限要素法等、流れを表すナビエ・ストークス方程式から導出し、離散化する方法が主流である。

一方、流れを微視的立場から観る方法として粒子法がある。従来の差分法等では実現が難しい現象（水と油のような非混在二相流、多孔質内流れ等）が表現できる可能性があるとして、注目されている。

仮想の粒子を用いて、粒子の移動、衝突で流れを表現するのだが、どの粒子どうしが衝突したか等の判定に時間がかかる。

そのような点を克服している方法が、格子ガスオートマトン法（LGA）である。粒子の運動の制限し、粒子は、格子上を動き、1 ステップごとに必ず衝突する。各粒子の衝突判定が不用となる。

計算は単純（ブール演算）であるが、流れの物理量の算出に空間平均をとるため、精度を高めようとすると、計算格子が他の方法以上に必要になる。

この計算格子の増大を抑え、計算規則を実数演算とした方法が、格子ボルツマン法(LBM)である。

これは、格子を構成し、ノード上でそれぞれの速度ベクトルを持つ粒子の分布確率から流れを解析する方法である。

微視的立場で粒子の運動を表すボルツマン方程式に基づき、この方程式の離散式から、流体の基礎方程式を近似することができる。

これまでの研究で、LBM は、従来のナビエ・ストークス方程式の数値解法に劣らない精度で計算できることや、計算効率の高い方法であることが確認されている。

また、LBM でも、ある程度微視的に粒子の振舞いをとらえることができるため、従来の差分法等では実現が難しい現象が表現できる可能性という粒子法の特徴があり、そのような試みもいくつか報告されている。

LBM は近年考案された手法であり、理論が整備されてきたのも、最近のことである。熱流動現象の具体的な数値計算を扱った論文もまだ少ない。特に、外力（重力）が存在する体系での数値計算は、扱っていない。

そこで、熱を伴う流れを扱えるような格子ボルツマン法について検討し、さらに、外力の効果を入れ、熱と流動が強く連成する自然対流現象をシミュレートすることを本研究の目的とする。

第 2 章

格子ボルツマン法

ここでは、格子ボルツマン法の概略を説明する。

2.1　離散式

ボルツマン方程式（外力 $\mathbf{F}=0$）

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\mathbf{v}\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} \tag{2.1}$$

ここで、$(\frac{\partial f}{\partial t})_{coll}$は、粒子どうしの衝突による単位時間当りの変化率を表す項である。

各項を、次のように離散化する。$f_{\sigma i}(\mathbf{x},t)$ は、時間 t、ノード $\mathbf{x}$ において、速度 $\mathbf{e}_{\sigma i}$ をもつ粒子分布関数である。

$$\begin{aligned}
f &= f_{\sigma i}(\mathbf{x},t)\\
\frac{\partial f}{\partial t} &= \frac{f_{\sigma i}(\mathbf{x},t+\Delta t)-f_{\sigma i}(\mathbf{x},t)}{\Delta t}\\
\mathbf{v} &= \mathbf{e}_{\sigma i}\\
\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} &= \frac{f_{\sigma i}(\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x},t+\Delta t)-f_{\sigma i}(\mathbf{x},t+\Delta t)}{\Delta\mathbf{x}}
\end{aligned}$$

$$\Delta\mathbf{x} = \mathbf{e}_{\sigma i}\Delta t \tag{2.2}$$

$$\Delta t = 1 \tag{2.3}$$

とおくと、(2.1) 式の左辺は、

$$
\begin{aligned}
& \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \\
= \; & \frac{f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t+\Delta t) - f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t)}{\Delta t} + \mathbf{e}_{\sigma i} \frac{f_{\sigma i}(\mathbf{x}+\Delta \mathbf{x}, t+\Delta t) - f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t+\Delta t)}{\Delta \mathbf{x}} \\
= \; & \frac{f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t+\Delta t) - f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t)}{\Delta t} + \mathbf{e}_{\sigma i} \frac{f_{\sigma i}(\mathbf{x}+\Delta \mathbf{x}, t+\Delta t) - f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t+\Delta t)}{\mathbf{e}_{\sigma i} \Delta t} \\
= \; & \frac{1}{\Delta t} \left\{ f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t+\Delta t) - f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t) + f_{\sigma i}(\mathbf{x}+\Delta \mathbf{x}, t+\Delta t) - f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t+\Delta t) \right\} \\
= \; & f_{\sigma i}(\mathbf{x}+\Delta \mathbf{x}, t+\Delta t) - f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t)
\end{aligned}
$$

(2.1) 式右辺の衝突項を単一緩和係数τを用いて簡略化すると、(2.1) 式の (2.2)、(2.3) の条件下での離散式は、次のように表される [1]。

$$
f_{\sigma i}(\mathbf{x}+\mathbf{e}_{\sigma i}, t+1) - f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau}[f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t) - f_{\sigma i}^{(0)}(\mathbf{x}, t)] \tag{2.4}
$$

ここで、$f_{\sigma i}^{(0)}(\mathbf{x}, t)$ は、平衡分布関数と呼ばれるものである。単一緩和係数τは、流体の粘性度νと関係づけられる。これについては、次章で示す。

また、(2.4) 式は、ある時点の流出先ノードの粒子分布のズレと、粒子の平衡分布状態からのズレが釣合っていると考えることもできる。

2.2 平衡分布関数

先に、質量、運動量保存則が考慮された平衡分布関数の例を紹介する。

正方形格子で、粒子の種類としては、停止、水平垂直、対角線上を動く粒子で、エネルギーレベル３種類、全部で９種類である。エネルギー保存則を考慮に入れてないので、これだけのエネルギーレベルで十分である。

ここで、エネルギーレベルとは、運動エネルギーの同じ粒子の種類の全体を指す。添字σが、これを示している。

このような格子での速度ベクトル $\mathbf{e}_{1i}, \mathbf{e}_{2i}$及び平衡分布関数 $f_{\sigma i}^{(0)}(\mathbf{x}, t)$ は、以下のようにとることができる。

$$
\begin{aligned}
\mathbf{e}_{1i} &= \left(cos\frac{i-1}{2}\pi, sin\frac{i-1}{2}\pi\right), \qquad i=1,\ldots,4 \\
\mathbf{e}_{2i} &= \sqrt{2}\left(cos\left(\frac{i-1}{2}\pi+\frac{\pi}{4}\right), sin\left(\frac{i-1}{2}\pi+\frac{\pi}{4}\right)\right), \qquad i=1,\ldots,4 \\
f_0^{(0)}(\mathbf{x},t) &= \frac{4}{9}[1-\frac{3}{2}u^2] \\
f_{1i}^{(0)}(\mathbf{x},t) &= \frac{1}{9}[1+3(\mathbf{e}_{1i}\cdot\mathbf{u})+\frac{9}{2}(\mathbf{e}_{1i}\cdot\mathbf{u})^2-\frac{3}{2}u^2] \\
f_{2i}^{(0)}(\mathbf{x},t) &= \frac{1}{36}[1+3(\mathbf{e}_{2i}\cdot\mathbf{u})+\frac{9}{2}(\mathbf{e}_{2i}\cdot\mathbf{u})^2-\frac{3}{2}u^2]
\end{aligned}
$$

次に、本研究で導出した平衡分布関数の決定アルゴリズムを、格子の構成、粒子の取り得る速度ベクトルとともに示す。

１つのノードにおける粒子の状態は、エネルギーレベルについて、停止粒子を含め６種類、加えて方向を考えるので、合計２５種類である。これは、質量、運動量、エネルギー保存則をある程度満たすためには、エネルギーレベルが、停止粒子を含めずに、５種類必要であることがわかったためである。

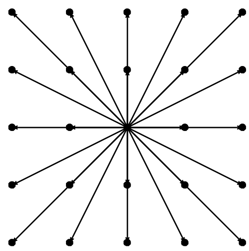


図 2.1: 粒子の種類

$$
\begin{aligned}
\mathbf{e}_0 &= \quad (0, 0) \\
\mathbf{e}_{1i} &= \quad (cos\tfrac{\pi}{2}i, sin\tfrac{\pi}{2}i) \quad i=0,\ldots,3 \\
\mathbf{e}_{2i} &= \sqrt{2}\,(cos(\tfrac{\pi}{2}i+\tfrac{\pi}{4}), sin(\tfrac{\pi}{2}i+\tfrac{\pi}{4})) \quad i=0,\ldots,3 \\
\mathbf{e}_{3i} &= 2\,(cos\tfrac{\pi}{2}i, sin\tfrac{\pi}{2}i) \quad i=0,\ldots,3 \\
\mathbf{e}_{5i} &= 2\sqrt{2}\,(cos(\tfrac{\pi}{2}i+\tfrac{\pi}{4}), sin(\tfrac{\pi}{2}i+\tfrac{\pi}{4})) \quad i=0,\ldots,3
\end{aligned}
$$

$$
\begin{array}{llllllllllllll}
\mathbf{e}_{40} & = & (& 2 & , & 1 &) & \mathbf{e}_{41} & = & (& 1 & , & 2 &) \\
\mathbf{e}_{42} & = & (& -1 & , & 2 &) & \mathbf{e}_{43} & = & (& -2 & , & 1 &) \\
\mathbf{e}_{44} & = & (& -2 & , & -1 &) & \mathbf{e}_{45} & = & (& -1 & , & -2 &) \\
\mathbf{e}_{46} & = & (& 1 & , & -2 &) & \mathbf{e}_{47} & = & (& 2 & , & -1 &)
\end{array}
$$

平衡分布関数の形を、

$$
f_{\sigma i}^{(0)}(\mathbf{x},t) = \rho\{A_\sigma + B_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u}) + C_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u})^2 + D_\sigma u^2 + E_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u})u^2 + F_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u})^3\} \quad (2.5)
$$

とし、各係数の決定は、以下の通りに行なう。

- A_σ　　以下の計画問題を解く

$$
min\sum_{\sigma=0}^{5}(d_\sigma A_\sigma - Bolt.E_\sigma)^2
$$

(d_σはエネルギーレベルσのベクトルの本数)

$$
\begin{pmatrix} 1 & 4 & 4 & 4 & 8 & 4 \\ 0 & 2 & 4 & 8 & 20 & 16 \\ 0 & 1 & 4 & 16 & 50 & 64 \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} 1.0 \\ T \\ 2T^2 \end{pmatrix}
$$

- B_σ　　以下の計画問題を解く

$$
min(\sqrt{\varepsilon_1}B_1 - \sqrt{\varepsilon_2}B_2)^2 + (\sqrt{\varepsilon_4}B_4 - \sqrt{\varepsilon_5}B_5)^2
$$

$$
\begin{pmatrix} 2 & 4 & 8 & 20 & 16 \\ 2 & -8 & 32 & -28 & -128 \\ 0 & 4 & 0 & 32 & 64 \\ 1 & 4 & 16 & 50 & 64 \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \\ B_4 \\ B_5 \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} 1.0 \\ 0.0 \\ T \\ 2T \end{pmatrix}
$$

- C_σ, D_σ　　同係数内でなるべく同符号になるよう選ぶ

$$
\begin{pmatrix}
2 & 4 & 8 & 20 & 16 & 1 & 4 & 4 & 4 & 8 & 4 \\
2 & -8 & 32 & -28 & -128 & 0 & 2 & 4 & 8 & 20 & 16 \\
0 & 4 & 0 & 32 & 64 & 0 & 2 & 4 & 8 & 20 & 16 \\
2 & -8 & 32 & -28 & -128 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 8 & 0 & -28 & -128 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 4 & 64 & 170 & 256 & 0 & 1 & 4 & 16 & 50 & 64 \\
0 & 4 & 64 & 80 & 256 & 0 & 1 & 4 & 16 & 50 & 64 \\
0 & 4 & 64 & 80 & 256 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ C_5 \\ D_0 \\ D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ D_4 \\ D_5
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
0 \\ \frac{1}{2} \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ \frac{7T}{2} \\ \frac{T}{2} \\ \frac{3T}{2}
\end{pmatrix}
$$

- E_σ, F_σ　　同係数内でなるべく同符号になるよう選ぶ

$$
\begin{pmatrix}
2 & 4 & 8 & 20 & 16 & 2 & 4 & 32 & 68 & 64 \\
2 & 4 & 8 & 20 & 16 & 0 & 12 & 0 & 96 & 192 \\
2 & 4 & 32 & 68 & 64 & 2 & 4 & 128 & 260 & 256 \\
2 & 4 & 32 & 68 & 64 & 0 & 12 & 0 & 240 & 768 \\
0 & 4 & 0 & 32 & 64 & 0 & 4 & 0 & 80 & 256 \\
0 & 4 & 0 & 32 & 64 & 0 & 12 & 0 & 240 & 768 \\
1 & 4 & 16 & 50 & 64 & 0 & 4 & 0 & 170 & 256 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 64 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 70 & 512
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
E_1 \\ E_2 \\ E_3 \\ E_4 \\ E_5 \\ F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ F_4 \\ F_5
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ \frac{1}{2} \\ 0 \\ 0
\end{pmatrix}
$$

$$
Bolt.E_\sigma = \frac{\exp(-\beta\varepsilon_\sigma)}{\sum_j \exp(-\beta\varepsilon_j)}
$$

$$
\frac{E}{N} = \frac{\sum_j \varepsilon_j \exp(-\beta\varepsilon_j)}{\sum_j \exp(-\beta\varepsilon_j)}
$$

詳細は、次章で述べる。

このような平衡分布関数であれば、ナビヤ・ストークス方程式を近似することができる。これも、次章で示す。

2.3 計算過程

１ステップにおける計算過程は、次の２つのみである。

- 流れ
  - それぞれの粒子は、その速度方向で決められたパス上を動く。
- 衝突
  - ノードに到着した粒子が相互作用する。
  - ノード間のパス上では、粒子は衝突しない。１ステップごとのノード上のみである。

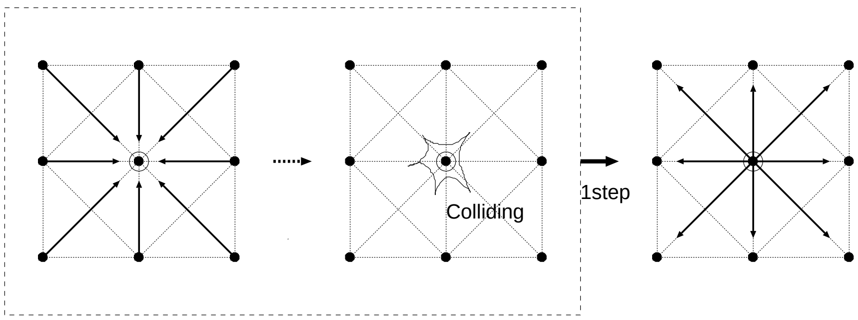


図 2.2: 格子ボルツマン法の概念

2.4 流体の物理量と粒子分布の対応

流体における時間 t、ノード $\mathbf{x}$ での密度ρ、速度 $\mathbf{u}$、内部エネルギー（温度）Tは、次のように対応する。

$$
\begin{aligned}
\rho &= \sum_\sigma \sum_i f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t) \\
\rho\mathbf{u} &= \sum_\sigma \sum_i f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t)\mathbf{e}_{\sigma i} \\
\rho(T + \frac{1}{2}\mathbf{u}^2) &= \sum_\sigma \sum_i \varepsilon_\sigma f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t)
\end{aligned}
$$

ここで、$\varepsilon_\sigma = \frac{1}{2}\mathbf{e}_{\sigma i}^2$ は、粒子の運動エネルギーである。
また、圧力は、理想気体を仮定しているので、次のように示される。

$$P = \rho T$$

第 3 章

格子ボルツマン法から NS 方程式へ

格子ボルツマン方程式から、チャプマン-エンスコグ展開を使うことにより、NS 方程式を導き出すことができる。

さらに、等方性、ガリレイ不変量、速度非依存圧力の条件から、平衡分布関数を、決定することができる。

本研究で用いた格子形状に基づき、以上の２点の導出方法を詳しく説明する。

3.1 格子ボルツマン方程式からナビエ・ストークス方程式へ

正方形格子上のそれぞれのノード上に、６種類の粒子がある。

速度ベクトル $\mathbf{e}_{\sigma i}$を、次のように定義する。

$$
\begin{array}{lclccccccl}
\mathbf{e}_0 & = & & (& 0 & , & 0 &) & \\
\mathbf{e}_{1i} & = & & (& cos\frac{\pi}{2}i & , & sin\frac{\pi}{2}i &) & i=0,\ldots,3 \\
\mathbf{e}_{2i} & = & \sqrt{2} & (& cos(\frac{\pi}{2}i+\frac{\pi}{4}) & , & sin(\frac{\pi}{2}i+\frac{\pi}{4}) &) & i=0,\ldots,3 \\
\mathbf{e}_{3i} & = & 2 & (& cos\frac{\pi}{2}i & , & sin\frac{\pi}{2}i &) & i=0,\ldots,3 \\
\mathbf{e}_{5i} & = & 2\sqrt{2} & (& cos(\frac{\pi}{2}i+\frac{\pi}{4}) & , & sin(\frac{\pi}{2}i+\frac{\pi}{4}) &) & i=0,\ldots,3
\end{array}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{e}_{40} &= (\; 2 \; , \; 1 \;) & \mathbf{e}_{41} &= (\; 1 \; , \; 2 \;) \\
\mathbf{e}_{42} &= (\; -1 \; , \; 2 \;) & \mathbf{e}_{43} &= (\; -2 \; , \; 1 \;) \\
\mathbf{e}_{44} &= (\; -2 \; , \; -1 \;) & \mathbf{e}_{45} &= (\; -1 \; , \; -2 \;) \\
\mathbf{e}_{46} &= (\; 1 \; , \; -2 \;) & \mathbf{e}_{47} &= (\; 2 \; , \; -1 \;)
\end{aligned}
$$

ここで、テンソル$\sum_i(e_{\sigma i\alpha}e_{\sigma i\beta}\cdots)$（ここでの$\alpha,\beta = 1or2$ は、$\mathbf{e}_{\sigma i}$の成分を指す）を考える。

このテンソルの奇数次の値は、0となる。また、偶数次のテンソルは、次のようになる。

各エネルギーレベルのベクトルの本数、運動エネルギー値、偶数テンソルの式を加えて示す。

level	本数	enargy	$\Sigma e_\alpha e_\alpha$	$\Sigma e_\alpha e_\alpha e_\alpha e_\alpha$	$\Sigma e_\alpha e_\alpha e_\beta e_\beta$	$\Sigma e_\alpha e_\alpha e_\alpha e_\alpha e_\alpha e_\alpha$	$\Sigma e_\alpha e_\alpha e_\alpha e_\alpha e_\beta e_\beta$
σ	d_σ	ε_σ	$\chi^2_{\sigma x}$	$\chi^4_{\sigma xx}$	$\chi^4_{\sigma xy}$	$\chi^6_{\sigma xxx}$	$\chi^6_{\sigma xxy}$
0	1	0	0	0	0	0	0
1	4	$\frac{1}{2}$	2	2	0	2	0
2	4	1	4	4	4	4	4
3	4	2	8	32	0	128	0
4	8	$\frac{5}{2}$	20	68	32	260	80
5	4	4	16	64	64	256	256

level	２次テンソル	４次テンソル
1	$2\delta_{\alpha\beta}$	$2\delta_{\alpha\beta\gamma\theta}$
2	$4\delta_{\alpha\beta}$	$4\Delta_{\alpha\beta\gamma\theta} - 8\delta_{\alpha\beta\gamma\theta}$
3	$8\delta_{\alpha\beta}$	$32\delta_{\alpha\beta\gamma\theta}$
4	$20\delta_{\alpha\beta}$	$32\Delta_{\alpha\beta\gamma\theta} - 28\delta_{\alpha\beta\gamma\theta}$
5	$16\delta_{\alpha\beta}$	$64\Delta_{\alpha\beta\gamma\theta} - 128\delta_{\alpha\beta\gamma\theta}$

$\alpha = \beta = \gamma = \theta$の時、$\delta_{\alpha\beta\gamma\theta} = 1$で、それ以外では0である。

また、$\Delta_{\alpha\beta\gamma\theta} = (\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\theta}) + (\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\theta}) + (\delta_{\alpha\theta}\delta_{\beta\gamma})$ である。

項目名の下に示した記号は、本研究で扱っている省略記号で、例えば、$\chi^4_{2xx} = 4$ を示している。

チャプマン-エンスコグ手順は、動的理論で、ボルツマン方程式を解くための漸近展開方法である。

漸近展開式で、微小クヌーセン数（流れの代表的長さへの平均自由パスの比率）を使う。格子単位は、巨視的代表スケールと比較して、十分小さいとする。

微小格子時間単位としてδを使い、物理単位で格子ボルツマン BGK 方程式は、

$$f_{\sigma i}(\mathbf{x}+\delta\mathbf{e}_{\sigma i}, t+\delta) - f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau}[f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t) - f_{\sigma i}^{(0)}(\mathbf{x}, t)] \tag{3.1}$$

$f_{\sigma i}^{(0)}(\mathbf{x}, t)$ の一般形を、ボルツマン方程式の平衡解である Maxwell-Boltzmann 分布を考え、$\mathbf{u}$ について３次オーダーまでテイラー展開した式を仮定する。

$$f_{\sigma i}^{(0)}(\mathbf{x}, t) = \rho\{A_\sigma + B_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u}) + C_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u})^2 + D_\sigma u^2 + E_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u})u^2 + F_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u})^3\} \tag{3.2}$$

f_0（停止している粒子）は $\mathbf{e}$ をもたないので、$B_0 = C_0 = E_0 = F_0 = 0$ である。

$O(\delta^2)$ まで、(3.1) 式をテイラー展開すると、

$$\begin{aligned} & \delta\left[\frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)\right] f_{\sigma i} + \frac{\delta^2}{2}\left[\frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)\right]^2 f_{\sigma i} + O(\delta^3) \\ = \;& -\frac{1}{\tau}[f_{\sigma i}(\mathbf{x}, t) - f_{\sigma i}^{(0)}(\mathbf{x}, t)] \end{aligned} \tag{3.3}$$

$f_{\sigma i}^{(0)}$について、$f_{\sigma i}$を展開すると、

$$f_{\sigma i} = f_{\sigma i}^{(0)} + +\delta f_{\sigma i}^{(1)} + \delta^2 f_{\sigma i}^{(2)} + O(\delta^3) \tag{3.4}$$

保存則　$\sum_\sigma\sum_i f_{\sigma i}^{(0)} = \rho,\quad \sum_\sigma\sum_i f_{\sigma i}^{(0)}\mathbf{e}_{\sigma i} = \rho\mathbf{u},\quad \sum_\sigma\sum_i f_{\sigma i}^{(0)}\varepsilon_\sigma = \rho T + \frac{1}{2}\rho u^2$

強制則　$\sum_\sigma\sum_i f_{\sigma i}^{(n)} = 0,\quad \sum_\sigma\sum_i f_{\sigma i}^{(n)}\mathbf{e}_{\sigma i} = 0,\quad \sum_\sigma\sum_i f_{\sigma i}^{(n)}\varepsilon_\sigma = 0 \quad (n \geq 1)$

これは、非平衡分布が、密度と運動量、エネルギーの局所値に寄与しないという意味を含んでいる。

これより、質量について

$$\begin{aligned} & \sum_\sigma\sum_i \rho\{A_\sigma + B_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u}) + C_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u})^2 + D_\sigma u^2 + E_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u})u^2 + F_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u})^3\} \\ = \;& \sum_\sigma\sum_i \rho\{A_\sigma + C_\sigma(\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\mathbf{u})^2 + D_\sigma u^2\} \qquad \text{（奇数次の}\textstyle\sum_i(e_{\sigma i\alpha}e_{\sigma i\beta}\cdots)\text{ は 0 のため）} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
= \quad & \rho\{\sum_\sigma A_\sigma \sum_i 1 \qquad \text{（ここでの } \textstyle\sum_i 1 \text{ は、エネルギーレベル}\sigma\text{のベクトルの本数を示す）} \\
& + \sum_\sigma C_\sigma \sum_i (e_{\sigma ix} u_x + e_{\sigma iy} u_y)^2 \\
& + \sum_\sigma D_\sigma \sum_i (u_x u_x + u_y u_y)\} \\
= \quad & \rho\{\sum_\sigma A_\sigma \sum_i 1 \\
& + \sum_\sigma (u_x u_x)[C_\sigma \sum_i (e_{\sigma ix} e_{\sigma ix}) + D_\sigma \sum_i 1] \\
& + \sum_\sigma (u_y u_y)[C_\sigma \sum_i (e_{\sigma iy} e_{\sigma iy}) + D_\sigma \sum_i 1] \\
& + \sum_\sigma (u_x u_y)[C_\sigma \sum_i (e_{\sigma ix} e_{\sigma iy})]\} \qquad \text{（ここで、} \textstyle\sum_i (e_{\sigma ix} e_{\sigma iy}) = 0 \text{ になる）} \\
= \quad & \rho
\end{aligned}
$$

$$\sum_\sigma (d_\sigma A_\sigma) = 1 \tag{3.5}$$

$$\sum_\sigma (\chi_{\sigma x}^2 C_\sigma + d_\sigma D_\sigma) = 0 \tag{3.6}$$

同様に、運動量について

$$\sum_\sigma (\chi_{\sigma x}^2 B_\sigma) = 1.0 \tag{3.7}$$

$$\sum_\sigma (\chi_{\sigma x}^2 E_\sigma + \chi_{\sigma xx}^4 F_\sigma) = 0 \tag{3.8}$$

$$\sum_\sigma (\chi_{\sigma x}^2 E_\sigma + 3\chi_{\sigma xy}^4 F_\sigma) = 0 \tag{3.9}$$

エネルギーについて

$$\sum_\sigma d_\sigma \varepsilon_\sigma A_\sigma = T \tag{3.10}$$

$$\sum_\sigma (\chi_{\sigma x}^2 \varepsilon_\sigma C_\sigma + d_\sigma \varepsilon_\sigma D_\sigma) = \frac{1}{2} \tag{3.11}$$

異なる時間スケールでの変化を考える。そのため、t_0, t_1を、$t_0 = t, t_1 = \delta t, \ldots,$ と置くと、

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t_0} + \delta \frac{\partial}{\partial t_1} + \ldots \tag{3.12}$$

(3.12) 式の右辺第１項は対流の伝播、第２項は粘性拡散のようなより緩やかな変化が見られる時間スケールと考えられる。

(3.3) 式に、(3.4),(3.12) 式を代入する。

$$
\begin{aligned}
& \delta[\partial_{t_0} + \delta\partial_{t_1} + (\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)](f_{\sigma i}^{(0)} + \delta f_{\sigma i}^{(1)} + \delta^2 f_{\sigma i}^{(2)}) \\
+ \quad & \frac{\delta^2}{2}[\partial_{t_0} + \delta\partial_{t_1} + (\mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)]^2(f_{\sigma i}^{(0)} + \delta f_{\sigma i}^{(1)} + \delta^2 f_{\sigma i}^{(2)}) \\
= \quad & -\frac{1}{\tau}[(f_{\sigma i}^{(0)} + \delta f_{\sigma i}^{(1)} + \delta^2 f_{\sigma i}^{(2)}) - f_{\sigma i}^{(0)}(\mathbf{x}, t)]
\end{aligned}
$$

δについて整理（δ^2オーダーまで）

$$
\begin{aligned}
\delta \quad & [(\partial_{t_0} + \mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)f_{\sigma i}^{(0)}] \\
+\delta^2 \quad & [\partial_{t_1} f_{\sigma i}^{(0)} + (\partial_{t_0} + \mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)f_{\sigma i}^{(1)} + \frac{1}{2}(\partial_{t_0} + \mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)^2 f_{\sigma i}^{(0)}] \\
= \quad & -\frac{1}{\tau}(\delta f_{\sigma i}^{(1)} + \delta^2 f_{\sigma i}^{(2)})
\end{aligned}
$$

δオーダーの方程式は、

$$
(\partial_{t_0} + \mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)f_{\sigma i}^{(0)} = -\frac{1}{\tau}f_{\sigma i}^{(1)} \tag{3.13}
$$

(3.13) 式を使い、δ^2オーダーの方程式を、簡単にすると、

$$
\partial_{t_1} f_{\sigma i}^{(0)} + (\partial_{t_0} + \mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)\left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) f_{\sigma i}^{(1)} = -\frac{1}{\tau}f_{\sigma i}^{(2)} \tag{3.14}
$$

σと i に関して (3.13) 式の和をとる。

$$
\begin{gathered}
\sum_\sigma \sum_i [(\partial_{t_0} + \mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla)f_{\sigma i}^{(0)}] = \sum_\sigma \sum_i -\frac{1}{\tau}f_{\sigma i}^{(1)} \\
\partial_{t_0} \sum_\sigma \sum_i f_{\sigma i}^{(0)} + \nabla\cdot\sum_\sigma \sum_i f_{\sigma i}^{(0)}\mathbf{e} = -\frac{1}{\tau}\sum_\sigma \sum_i f_{\sigma i}^{(1)}
\end{gathered}
$$

保存則を用いる。すると、

$$
\partial_{t_0}\rho + \nabla\cdot(\rho\mathbf{u}) = 0 \tag{3.15}
$$

同様に、(3.13) 式に $\mathbf{e}_{\sigma i}$を乗じて、和をとると、(3.16) を得る。

$$\partial_{t_0}\rho\mathbf{u} + \nabla\cdot\Pi^{(0)} = 0 \tag{3.16}$$

$\Pi = \sum_\sigma\sum_i(\mathbf{e}_{\sigma i}\mathbf{e}_{\sigma i})f_{\sigma i}$ は、運動量流束テンソルである。同様に、(3.14) 式から、ρ, u についてのδ^2のオーダーの方程式を得る。

$$\partial_{t_1}\rho = 0 \tag{3.17}$$

$$\partial_{t_1}(\rho\mathbf{u}) + \nabla\cdot\left(1-\frac{1}{2\tau}\right)\Pi^{(1)} = 0 \tag{3.18}$$

(3.2) 式を代入すると、$\Pi^{(0)}$はこのように書ける。

$$\begin{aligned}\Pi^{(0)}_{\alpha\beta} \quad = \quad & \rho\{\sum_\sigma(\chi^2_{\sigma x}A_\sigma) + [\sum_\sigma(\chi^4_{\sigma xy}C_\sigma) + \sum_\sigma(\chi^2_{\sigma x}D_\sigma)]u^2\}\delta_{\alpha\beta} \\ & +\rho(8C_2 + 28C_4 + 128C_5)u_\alpha u_\beta \\ & +\rho(2C_1 - 8C_2 + 32C3 - 28C_4 - 128C_5)u_\alpha u_\beta\delta_{\alpha\beta}\end{aligned} \tag{3.19}$$

最初の項は圧力項で、他の２つは非線形項である。速度非依存圧力を得るため、u^2 の係数 は、次を満たすよう選ばれる。

$$\sum_\sigma(\chi^4_{\sigma xy}C_\sigma) + \sum_\sigma(\chi^2_{\sigma x}D_\sigma) = 0 \tag{3.20}$$

ガリレイ不変量を持つため、非等方性項は、０とする。

$$2C_1 - 8C_2 + 32C3 - 28C_4 - 128C_5 = 0 \tag{3.21}$$

以上より、(3.19) 式は、

$$\Pi^{(0)}_{\alpha\beta} = \rho(\sum_\sigma(\chi^2_{\sigma x}A_\sigma))\delta_{\alpha\beta} + \rho(8C_2 + 28C_4 + 128C_5)u_\alpha u_\beta \tag{3.22}$$

以下を仮定する

$$8C_2 + 28C_4 + 128C_5 \quad = \quad 1 \tag{3.23}$$

$$\sum_\sigma(\chi^2_{\sigma x}A_\sigma) \quad = \quad T \qquad \text{（この式は、(3.10) 式と同一）} \tag{3.24}$$

$\Pi^{(0)}$の最終的な表現は、

$$\Pi^{(0)}_{\alpha\beta} = \rho T \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta \tag{3.25}$$

(3.16) 式に,(3.25) 式を代入すると、

$$\partial_{t_0}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla(\rho T) \tag{3.26}$$

(3.15),(3.26) 式は、格子ボルツマン方程式のδ オーダーの展開から導かれたオイラー方程式である。圧力は、$p = \rho T$で与えられる。

粘性の影響を考えるため、δ^2までの精度の方程式を導くと、量 $\nabla \cdot \Pi^{(1)}$を評価する必要がある。(3.13) 式に表現された非平衡分布を$\Pi^{(1)}_{\alpha\beta}$に代入し、(3.15),(3.25) 式を使って導くと、(E_σ, F_σの項は、後で考えるため、ここでは省く)

$$\begin{aligned}
\Pi^{(1)}_{\alpha\beta} &= -\tau \{ \partial_{t_0}[(\rho T)\delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta] + \partial_\gamma (B_1 \rho) u_\theta 2\delta_{\alpha\beta\gamma\theta} \\
&\quad + \partial_\gamma B_2 \rho u_\theta (4\Delta_{\alpha\beta\gamma\theta} - 8\delta_{\alpha\beta\gamma\theta}) \\
&\quad + \partial_\gamma (B_3 \rho) u_\theta 32\delta_{\alpha\beta\gamma\theta} \\
&\quad + \partial_\gamma B_4 \rho u_\theta (32\Delta_{\alpha\beta\gamma\theta} - 28\delta_{\alpha\beta\gamma\theta}) \\
&\quad + \partial_\gamma B_5 \rho u_\theta (64\Delta_{\alpha\beta\gamma\theta} - 128\delta_{\alpha\beta\gamma\theta}) \} \qquad (3.27) \\
&= -\tau \{ -\delta_{\alpha\beta}\partial_\gamma(\rho T u_\gamma) + \partial_{t_0}(\rho u_\alpha u_\beta) + \partial_\alpha (2B_1 - 8B_2 + 32B_3 - 28B_4 - 128B_5)\rho u_\beta \delta_{\alpha\beta} \\
&\quad + \partial_\gamma ((4B_2 + 32B_4 + 64B_5)\rho u_\gamma)\delta_{\alpha\beta} \\
&\quad + \partial_\alpha ((4B_2 + 32B_4 + 64B_5)\rho u_\beta) \\
&\quad + \partial_\beta ((4B_2 + 32B_4 + 64B_5)\rho u_\alpha) \}
\end{aligned}$$

ここで、アインシュタイン和の規約を使った。

等方性を維持するため、

$$2B_1 - 8B_2 + 32B_3 - 28B_4 - 128B_5 = 0 \tag{3.28}$$

これゆえ、(3.27) 式は、

$$
\begin{aligned}
\Pi^{(1)}_{\alpha\beta} &= -\tau\,\{\partial_\gamma((4B_2+32B_4+64B_5)\rho u_\gamma)\delta_{\alpha\beta} \\
&\quad +\partial_\alpha((4B_2+32B_4+64B_5)\rho u_\beta)+\partial_\beta((4B_2+32B_4+64B_5)\rho u_\alpha) \\
&\quad -\partial_\gamma(\rho T u_\gamma)\delta_{\alpha\beta}+\partial_{t_0}(\rho u_\alpha u_\beta)\}
\end{aligned}
\tag{3.29}
$$

最後の項は、(3.26) 式を使い簡単にでき、

$$
\begin{aligned}
&\partial_{t_0}(\rho u_\alpha u_\beta) \\
= \;& u_\beta\partial_{t_0}(\rho u_\alpha)+(\rho u_\alpha)\partial_{t_0}(u_\beta) \\
= \;& -u_\beta\partial_\alpha(\rho T)-u_\beta\partial_\gamma(\rho u_\alpha u_\gamma)-u_\alpha u_\beta\partial_{t_0}(\rho)+u_\alpha\partial_{t_0}(\rho u_\beta) \\
= \;& -u_\beta\partial_\alpha(\rho T)-u_\beta\partial_\gamma(\rho u_\alpha u_\gamma)+u_\alpha u_\beta\partial_\gamma(\rho u_\gamma)-u_\alpha\partial_\beta(\rho T)-u_\alpha\partial_\gamma(\rho u_\beta u_\gamma) \\
= \;& -u_\alpha\partial_\beta(\rho T)-u_\beta\partial_\alpha(\rho T)-u_\alpha u_\beta u_\gamma\partial_\gamma(\rho)-\rho u_\beta u_\gamma\partial_\gamma(u_\alpha)-\rho u_\alpha u_\gamma\partial_\gamma(u_\beta)-\rho u_\alpha u_\beta\partial_\gamma(u_\gamma) \\
= \;& -u_\alpha\partial_\beta(\rho T)-u_\beta\partial_\alpha(\rho T)-\partial_\gamma(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma)
\end{aligned}
\tag{3.30}
$$

ゆえに、(3.29) 式は、

$$
\begin{aligned}
\Pi^{(1)}_{\alpha\beta} &= -\tau\,\{(\partial_\gamma((4B_2+32B_4+64B_5)-T)\rho u_\gamma)\delta_{\alpha\beta} \\
&\quad +\partial_\alpha((4B_2+32B_4+64B_5)\rho u_\beta)+\partial_\beta((4B_2+32B_4+64B_5)\rho u_\alpha) \\
&\quad -u_\alpha\partial_\beta(\rho T)-u_\beta\partial_\alpha(\rho T)-\partial_\gamma(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma)\}
\end{aligned}
\tag{3.31}
$$

また、$\Pi^{(1)}_{\alpha\beta}$での E_σ, F_σの項は、

$\Pi^{(1)}_{xx}$内の E_σ, F_σ

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial x}\{\rho\sum_\sigma E_\sigma(u_x u^2)\sum_i(e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}) \\
&+\rho\sum_\sigma F_\sigma(u_x u_x u_x)\sum_i(e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix})+\rho\sum_\sigma F_\sigma 3(u_x u_y u_y)\sum_i(e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy})\} \\
&+\frac{\partial}{\partial y}\{\rho\sum_\sigma E_\sigma(u_y u^2)\sum_i(e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy}) \\
&+\rho\sum_\sigma F_\sigma 3(u_x u_x u_y)\sum_i(e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy})+\rho\sum_\sigma F_\sigma(u_y u_y u_y)\sum_i(e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy})\} \\
= \;& \frac{\partial}{\partial x}\{\rho(u_x u_x u_x)[\sum_\sigma E_\sigma\sum_i(e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix})+\sum_\sigma F_\sigma\sum_i(e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix})]
\end{aligned}
$$

$$+\rho(u_x u_y u_y)[\sum_\sigma E_\sigma \sum_i (e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}) + \sum_\sigma F_\sigma 3 \sum_i (e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy})]\}$$

$$+\frac{\partial}{\partial y}\{\rho(u_x u_x u_y)[\sum_\sigma E_\sigma \sum_i (e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy}) + \sum_\sigma F_\sigma 3 \sum_i (e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy})]$$

$$+\rho(u_y u_y u_y)[\sum_\sigma E_\sigma \sum_i (e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy}) + \sum_\sigma F_\sigma \sum_i (e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy})]\}$$

この項は、$\partial_\gamma(\rho u_\alpha u_\beta u_\gamma)$（$\Pi^{(1)}_{xx}$では、$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u_x u_x u_x)+\frac{\partial}{\partial y}(\rho u_x u_x u_y)$）を消すために用いり、以下の関係式が出てくる。

$$\sum_\sigma(\chi^4_{\sigma xx}E_\sigma + \chi^6_{\sigma xxx}F_\sigma) = 1 \tag{3.32}$$

$$\sum_\sigma(\chi^4_{\sigma xx}E_\sigma + 3\chi^6_{\sigma xxy}F_\sigma) = 0 \tag{3.33}$$

$$\sum_\sigma(\chi^4_{\sigma xy}E_\sigma + \chi^6_{\sigma xxy}F_\sigma) = 0 \tag{3.34}$$

$$\sum_\sigma(\chi^4_{\sigma xy}E_\sigma + 3\chi^6_{\sigma xxy}F_\sigma) = 1 \tag{3.35}$$

$\Pi^{(1)}_{yx}\cdots$についても、同様の関係式が導出される。

$\rho, \mathbf{u}$ についての $O(\delta), O(\delta^2)$ の方程式と、(3.15),(3.26),(3.18) 式（(3.31) を伴った）を結合することにより、連続式と一致する式が得られる（$O(\delta^2)$ 誤差項は省略)。

$$\partial_t\rho + \nabla\cdot(\rho\mathbf{u}) = 0 \tag{3.36}$$

運動量の式は、

$$\begin{aligned}
\partial_t(\rho u_\alpha) \quad + \quad & \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = \\
& -\partial_\alpha(\rho T) \\
& +\delta\left\{[(\tau-\frac{1}{2})\partial_\gamma(\rho((4B_2+32B_4+64B_5)-T)u_\gamma)]\right. \\
& +\partial_\beta(\tau-\frac{1}{2})[(4B_2+32B_4+64B_5)\rho(\partial_\alpha u_\beta+\partial_\beta u_\alpha) \\
& \left.+\ (u_\alpha\partial_\beta\rho((4B_2+32B_4+64B_5)-T)+u_\beta\partial_\alpha\rho((4B_2+32B_4+64B_5)-T))]\right\} \\
& +O(\delta^2)
\end{aligned} \tag{3.37}$$

以下を仮定すると、

$$4B_2+32B_4+64B_5-T=0 \tag{3.38}$$

(3.37) 式は、

$$\partial_t(\rho u_\alpha) + \partial_\beta(\rho u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha(p) + \partial_\beta N_{\alpha\beta} + O(\delta^2) \tag{3.39}$$

ここで、$N_{\alpha\beta} = -\mu(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha)$ は、ニュートン流体に対する応力テンソルであり、$p = \rho T$は、圧力である。

また、静粘性係数μは、緩和係数τと以下のように関係づけられる。

$$\mu(= \nu\rho) = (\tau - \frac{1}{2})\rho T\delta \tag{3.40}$$

以上、運動量保存則を表現する関係式について、文献 [1] の付節に沿って説明した。

エネルギー保存則についても、同様に考えられる。

$$\partial_t(\rho T + \frac{1}{2}\rho u^2) + \nabla\cdot Q^{(0)} + \nabla\cdot Q^{(1)} = 0$$

$Q^{(0)} = \sum_\sigma \sum_i(\mathbf{e}_{\sigma i}\varepsilon_\sigma)f^{(0)}_{\sigma i}$について

（以下、x 成分のみ展開する。対称性のため、y 成分は特に考慮しなくてもいい）

$$\begin{aligned}
Q^{(0)}_x &= \sum_\sigma\sum_i(e_{\sigma ix}\varepsilon_\sigma)f^{(0)}_{\sigma i}\\
&= \sum_\sigma \varepsilon_\sigma\rho B_\sigma \sum_i e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}u_x\\
&+ \sum_\sigma \varepsilon_\sigma\rho E_\sigma \sum_i e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}u_x u^2\\
&+ \sum_\sigma \varepsilon_\sigma\rho F_\sigma[(\sum_i e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma ix})u_x u_x u_x + 3(\sum_i e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy})u_x u_y u_y]
\end{aligned}$$

対流によって運ばれるエネルギー量 $Q^{(0)} = (P + \rho T + \frac{1}{2}\rho u^2)\mathbf{u}$ と仮定すると、

$Q^{(0)}_x = (P + \rho T + \frac{1}{2}\rho u^2)u_x = (P + \rho T)u_x + (\frac{1}{2}\rho u_x^2)u_x + (\frac{1}{2}\rho u_y^2)u_x$

$$\begin{aligned}
\sum_\sigma(\chi^2_{\sigma x}\varepsilon_\sigma\rho B_\sigma) &= P + \rho T \qquad (P = \rho T\text{より})\\
&= 2\rho T && (3.41)\\
\sum_\sigma(\chi^2_{\sigma x}\varepsilon_\sigma E_\sigma) + 4\varepsilon_2F_2 + 68\varepsilon_4F_4 + 64\varepsilon_5F_5 &= \frac{1}{2} && (3.42)\\
2\varepsilon_1F_1 - 8\varepsilon_2F_2 + 32\varepsilon_3F_3 - 28\varepsilon_4F_4 - 128\varepsilon_5F_5 &= 0 && (3.43)
\end{aligned}$$

$Q^{(1)} = \sum_\sigma \sum_i (\mathbf{e}_{\sigma i}\varepsilon_\sigma) f_{\sigma i}^{(1)}$について

$$
\begin{aligned}
Q_x^{(1)} &= \sum_\sigma \sum_i (e_{\sigma ix}\varepsilon_\sigma) f_{\sigma i}^{(1)} \\
&= \sum_\sigma \sum_i (e_{\sigma ix}\varepsilon_\sigma) \left\{ -\tau(\partial_{t0} + \mathbf{e}_{\sigma i}\cdot\nabla) f_{\sigma i}^{(0)} \right\} \\
&= -\tau\{\underbrace{\partial_{t0}\sum_{\sigma,i}\varepsilon_\sigma e_{\sigma ix} f_{\sigma i}^{(0)}}_{Q_x^{(1)}.1} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}\sum_{\sigma,i}\varepsilon_\sigma e_{\sigma ix} f_{\sigma i}^{(0)} e_{\sigma ix}}_{Q_x^{(1)}.2} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y}\sum_{\sigma,i}\varepsilon_\sigma e_{\sigma ix} f_{\sigma i}^{(0)} e_{\sigma iy}\}}_{Q_x^{(1)}.3}
\end{aligned}
$$

以下、$-\tau\{\}$ 内の $Q_x^{(1)}.1$、$Q_x^{(1)}.2$、$Q_x^{(1)}.3$ を分けて考える。

$Q_x^{(1)}.1$

$$
\begin{aligned}
&= \partial_{t0}\sum_\sigma\sum_i \varepsilon_\sigma e_{\sigma ix} f_{\sigma i}^{(0)} \\
&= \partial_{t0} Q_x^{(0)} \\
&= \partial_{t0}\{(P + \rho T + \frac{1}{2}\rho u^2)u_x\} \\
&= u_x\partial_{t0}(P + \rho T + \frac{1}{2}\rho u^2) + (P + \rho T + \frac{1}{2}\rho u^2)\partial_{t0}u_x \\
&= u_x\partial_{t0}(\rho T + \frac{1}{2}\rho u^2) + u_x\partial_{t0}(\rho T) + (2\rho T + \frac{1}{2}u^2)\frac{1}{\rho}\{\partial_{t0}(\rho u_x) - u_x\partial_{t0}\rho\} \qquad (P = \rho T) \\
&= u_x\{-\mathbf{u}\cdot\nabla(P + \rho T + \frac{1}{2}\rho u^2)\} + u_x\{-\mathbf{u}\cdot\nabla(\rho T)\} \\
&\quad +(2\rho T + \frac{1}{2}\rho u^2)\frac{1}{\rho}\{-\frac{\partial}{\partial x}(\rho T) - \mathbf{u}\cdot\nabla(\rho u_x) + u_x\mathbf{u}\cdot\nabla\rho\} \\
&= -2T\frac{\partial}{\partial x}(\rho T) \\
&\quad -\frac{7}{2}u_x u_x\frac{\partial}{\partial x}(\rho T) - \frac{1}{2}u_y u_y\frac{\partial}{\partial x}(\rho T) - 3u_x u_y\frac{\partial}{\partial x}(\rho T) \\
&\quad -2Tu_x\frac{\partial}{\partial x}(\rho u_x) - 2Tu_y\frac{\partial}{\partial y}(\rho u_x) \\
&\quad +2Tu_x u_x\frac{\partial}{\partial x}(\rho) + 2Tu_x u_y\frac{\partial}{\partial y}(\rho) \\
&\quad +O(u^4) \\
&= -2T\frac{\partial}{\partial_x}(\rho T) \\
&\quad -\frac{7}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u_x u_x\rho T) + 7u_x\rho T\frac{\partial}{\partial x}(u_x) \qquad (\tfrac{\partial}{\partial x}(u_x u_x\rho T) = 2\rho T u_x\tfrac{\partial}{\partial x}(u_x) + u_x u_x\tfrac{\partial}{\partial x}(\rho T) \text{ より})
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u_y u_y \rho T) + u_y \rho T \frac{\partial}{\partial x}(u_y) \\
&-3\frac{\partial}{\partial y}(u_x u_y \rho T) + 3u_x \rho T \frac{\partial}{\partial y}(u_y) + 3u_y \rho T \frac{\partial}{\partial y}(u_x) \\
&-2Tu_x u_x \frac{\partial}{\partial x}(\rho) - 2Tu_y u_x \frac{\partial}{\partial y}(\rho) - 2T\rho u_x \frac{\partial}{\partial x}(u_x) - 2T\rho u_y \frac{\partial}{\partial y}(u_x) \\
&+2Tu_x u_x \frac{\partial}{\partial x}(\rho) + 2Tu_x u_y \frac{\partial}{\partial y}(\rho) \\
&+O(u^4) \\
= \;& -2\rho T \frac{\partial}{\partial x}(T) - 2T^2 \frac{\partial}{\partial x}(\rho) \\
&-\frac{7}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u_x u_x \rho T) - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u_y u_y \rho T) - 3\frac{\partial}{\partial y}(u_x u_y \rho T) \\
&+5\rho T u_x \frac{\partial}{\partial x}(u_x) + \rho T u_y \frac{\partial}{\partial y}(u_x) + \rho T u_y \frac{\partial}{\partial x}(u_y) + 3\rho T u_x \frac{\partial}{\partial y}(u_y) \\
&+O(u^4) \\
= \;& -2\rho T \frac{\partial}{\partial x}(T) - 2T^2 \frac{\partial}{\partial x}(\rho) \\
&-\frac{7}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u_x u_x \rho T) - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}(u_y u_y \rho T) - 3\frac{\partial}{\partial y}(u_x u_y \rho T) \\
&+\rho T u_x \frac{\partial}{\partial x}(u_x) + \rho T u_y \frac{\partial}{\partial y}(u_x) + \rho T u_y \frac{\partial}{\partial x}(u_y) - \rho T u_x \frac{\partial}{\partial y}(u_y) \qquad (\nabla\cdot\mathbf{u} = 0 \text{ より}) \\
&+O(u^4)
\end{aligned}
$$

$Q_x^{(1)}.2$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{\partial}{\partial x}\sum_\sigma \sum_i \varepsilon_\sigma e_{\sigma ix} f_{\sigma i}^{(0)} e_{\sigma ix} \\
&= \frac{\partial}{\partial x}(\sum_\sigma \varepsilon_\sigma \rho A_\sigma \sum_i e_{\sigma ix} e_{\sigma ix} \\
&\quad + \sum_\sigma \varepsilon_\sigma \rho C_\sigma (u_x u_x) \sum_i e_{\sigma ix} e_{\sigma ix} e_{\sigma ix} e_{\sigma ix} \\
&\quad + \sum_\sigma \varepsilon_\sigma \rho D_\sigma (u^2) \sum_i e_{\sigma ix} e_{\sigma ix} \\
&\quad + \sum_\sigma \varepsilon_\sigma \rho C_\sigma (u_y u_y) \sum_i e_{\sigma ix} e_{\sigma ix} e_{\sigma iy} e_{\sigma iy})
\end{aligned}
$$

$Q_x^{(1)}.3$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{\partial}{\partial y}\sum_\sigma\sum_i \varepsilon_\sigma e_{\sigma ix} f^{(0)}_{\sigma i} e_{\sigma ix} \\
&= \frac{\partial}{\partial y}(\sum_\sigma \varepsilon_\sigma \rho C_\sigma (2u_x u_y)\sum_i e_{\sigma ix}e_{\sigma ix}e_{\sigma iy}e_{\sigma iy})
\end{aligned}
$$

$Q^{(1)}_x = \kappa\frac{\partial}{\partial x}(T)+\mu\left\{u_x\frac{\partial}{\partial x}(u_x)+u_y\frac{\partial}{\partial y}(u_x)+u_y\frac{\partial}{\partial x}(u_y)-u_x\frac{\partial}{\partial y}(u_y)\right\}$と仮定すると、（ニュートン流体、非圧縮性、フーリエの式）

$$\sum_\sigma(\chi^4_{\sigma xx}\varepsilon_\sigma\rho C_\sigma+\chi^2_{\sigma x}\varepsilon_\sigma\rho D_\sigma)=\rho\frac{7T}{2} \tag{3.44}$$

$$\sum_\sigma(\chi^4_{\sigma xy}\varepsilon_\sigma\rho C_\sigma+\chi^2_{\sigma x}\varepsilon_\sigma\rho D_\sigma)=\rho\frac{T}{2} \tag{3.45}$$

$$\sum_\sigma(\chi^4_{\sigma xy}\varepsilon_\sigma\rho C_\sigma)=\rho\frac{3T}{2} \tag{3.46}$$

$$\sum_\sigma(\chi^2_{\sigma x}\varepsilon_\sigma\rho A_\sigma)=2\rho T^2 \tag{3.47}$$

$$\kappa=2\mu=(\tau-\frac{1}{2})\rho T \tag{3.48}$$

ここで、以下の関係式を用いた。

$$\frac{\partial}{\partial x}(2\rho T^2) \;=\; 2T^2\frac{\partial}{\partial x}(\rho)+4\rho T\frac{\partial}{\partial x}(T)$$

以上、近似できる方程式は、

質量保存則

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

運動量保存則

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t}+\nabla\cdot((\rho\mathbf{u})\mathbf{u}) \;=\; -\nabla P-[\nabla\cdot\mathbf{N}]$$

エネルギー保存則

$$\frac{\partial(\rho(T+\frac{1}{2}u^2))}{\partial t}+\nabla\cdot((\rho(T+\frac{1}{2}u^2))\mathbf{u}) \;=\; -\nabla\cdot(P\mathbf{u})+\kappa\nabla^2T-(\nabla\cdot[\mathbf{N}\cdot\mathbf{u}])$$

ニュートン流体、非圧縮性、理想気体の仮定

$$
\begin{aligned}
N_{\alpha\beta} &= -\mu(\frac{\partial u_\alpha}{\partial\beta}+\frac{\partial u_\beta}{\partial\alpha}) \\
\nabla\cdot\mathbf{u} &= 0 \\
P &= \rho T
\end{aligned}
$$

また、単一緩和係数の制限から、

$$\kappa = 2\mu = (\tau - \frac{1}{2})\rho T$$

このため、扱える流体のプラントル数 Pr は、

$$\begin{aligned} Pr &= \frac{c_p \nu}{\kappa} \\ &= \frac{\rho\nu}{\kappa} \qquad \text{（理想気体より、} c_p = \rho\text{）} \\ &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

で固定されている。

3.2 平衡分布関数の決定

以下、平衡分布関数の決定方法について述べる。

- A_σ エネルギーのボルツマン分布（次節で説明する）との差が最小になるよう決定

$$min \sum_{\sigma=0}^{5} (d_\sigma A_\sigma - Bolt.E_\sigma)^2$$

$$(d_\sigma \text{はエネルギーレベル} \sigma \text{のベクトルの本数})$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 & 4 & 4 & 8 & 4 \\ 0 & 2 & 4 & 8 & 20 & 16 \\ 0 & 1 & 4 & 16 & 50 & 64 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.0 \\ T \\ 2T^2 \end{pmatrix}$$

- B_σ 各係数の比が、速度比に近くなるよう、また、高エネルギーレベルの値は、低く抑えるよう試行錯誤の末、以下の目的関数に決定

$$min(\sqrt{\varepsilon_1}B_1 - \sqrt{\varepsilon_2}B_2)^2 + (\sqrt{\varepsilon_4}B_4 - \sqrt{\varepsilon_5}B_5)^2$$

$$
\begin{pmatrix}
2 & 4 & 8 & 20 & 16 \\
2 & -8 & 32 & -28 & -128 \\
0 & 4 & 0 & 32 & 64 \\
1 & 4 & 16 & 50 & 64
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
B_1 \\ B_2 \\ B_3 \\ B_4 \\ B_5
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
1.0 \\ 0.0 \\ T \\ 2T
\end{pmatrix}
$$

- C_σ, D_σ　　C_σは、一意に決定できる。D_σは、任意性があり、符号が同じになるようにして、値を求めている。

$$
\begin{pmatrix}
2 & 4 & 8 & 20 & 16 & 1 & 4 & 4 & 4 & 8 & 4 \\
2 & -8 & 32 & -28 & -128 & 0 & 2 & 4 & 8 & 20 & 16 \\
0 & 4 & 0 & 32 & 64 & 0 & 2 & 4 & 8 & 20 & 16 \\
2 & -8 & 32 & -28 & -128 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 8 & 0 & -28 & -128 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
1 & 4 & 64 & 170 & 256 & 0 & 1 & 4 & 16 & 50 & 64 \\
0 & 4 & 64 & 80 & 256 & 0 & 1 & 4 & 16 & 50 & 64 \\
0 & 4 & 64 & 80 & 256 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ C_5 \\ D_0 \\ D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ D_4 \\ D_5
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
0 \\ \frac{1}{2} \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ \frac{7T}{2} \\ \frac{T}{2} \\ \frac{3T}{2}
\end{pmatrix}
$$

- E_σ, F_σ　　F_σは、一意に決定できる。E_σは、任意性があり、

$$
E_4 = -\varepsilon_4 F_4
$$

$$
E_5 = -\varepsilon_5 F_5
$$

として、E_σを求めている。これは、量 $\mathbf{u}^3$にたいして、平衡分布関数の値が、大きく変化しないよう抑えるためである。

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & 8 & 20 & 16 & 2 & 4 & 32 & 68 & 64 \\ 2 & 4 & 8 & 20 & 16 & 0 & 12 & 0 & 96 & 192 \\ 2 & 4 & 32 & 68 & 64 & 2 & 4 & 128 & 260 & 256 \\ 2 & 4 & 32 & 68 & 64 & 0 & 12 & 0 & 240 & 768 \\ 0 & 4 & 0 & 32 & 64 & 0 & 4 & 0 & 80 & 256 \\ 0 & 4 & 0 & 32 & 64 & 0 & 12 & 0 & 240 & 768 \\ 1 & 4 & 16 & 50 & 64 & 0 & 4 & 0 & 170 & 256 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 64 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 70 & 512 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \\ E_4 \\ E_5 \\ F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ F_4 \\ F_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ \frac{1}{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

3.3　エネルギーの Boltzmann 分布

エネルギーの Boltzmann 分布とは、粒子のとり得るエネルギーが、$\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2 \cdots$ であるとき、ε_σをとる（最も起こりやすい）確率、あるいはε_σをとる粒子数割合の分布のことをいう。

以下のように、表される。

$$Bolt.E_\sigma \quad (\ \varepsilon_\sigma\text{を持つ粒子の分布確率}) \quad = \frac{\exp(-\beta\varepsilon_\sigma)}{\sum_j \exp(-\beta\varepsilon_j)}$$

ここで、βは、粒子数 Nと全エネルギー Eで関係づけられる。

$$\frac{E}{N} = \frac{\sum_j \varepsilon_j \exp(-\beta\varepsilon_j)}{\sum_j \exp(-\beta\varepsilon_j)}$$

本研究で用いているエネルギーレベルを代入すると、

$$\frac{E}{N} = \frac{\frac{1}{2}\exp(-\frac{1}{2}\beta) + 1\exp(-\beta) + 2\exp(-2\beta) + \frac{5}{2}\exp(-\frac{5}{2}\beta) + 4\exp(-4\beta)}{1 + \exp(-\frac{1}{2}\beta) + \exp(-\beta) + \exp(-2\beta) + \exp(-\frac{5}{2}\beta) + \exp(-4\beta)}$$

$a = \exp(-\frac{1}{2}\beta)$ とおくと、

$$\frac{E}{N} = \frac{\frac{1}{2}a + a^2 + 2a^4 + \frac{5}{2}a^5 + 4a^8}{1 + a + a^2 + a^4 + a^5 + a^8}$$
$$\frac{E}{N}(1 + a + a^2 + a^4 + a^5 + a^8) = \frac{1}{2}a + a^2 + 2a^4 + \frac{5}{2}a^5 + 4a^8$$
$$(4 - \frac{E}{N})a^8 + (\frac{5}{2} - \frac{E}{N})a^5 + (2 - \frac{E}{N})a^4 + (1 - \frac{E}{N})a^2 + (\frac{1}{2} - \frac{E}{N})a - \frac{E}{N} = 0$$

と、正整数次の方程式になり、扱いが簡単になる。

これを解けば、$Bolt.E_\sigma$を求めることができる。

3.4 係数 $A_\sigma, B_\sigma, C_\sigma, D_\sigma, E_\sigma, F_\sigma$の例

- $T = 1.0$ の時

level	A	B	C	D	E	F
0	0.279797	0.000000	0.000000	-0.472222	0.000000	0.000000
1	0.059240	0.060729	-0.333333	0.346561	-1.155556	1.022222
2	0.050178	0.042942	0.041667	-0.125000	-0.236111	0.236111
3	0.035027	0.047424	0.052083	-0.120370	0.072222	-0.015972
4	0.014092	0.010027	0.000000	0.000000	-0.027778	0.011111
5	0.007422	0.007927	0.005208	0.016865	0.020833	-0.005208

第 4 章

外力の扱い

格子ボルツマン法において、外力 $(\mathbf{F})$（重力）を考慮すると、離散化式は次のように、外力項が加わる [2]。

$$f_{\sigma i}(\mathbf{x}+\mathbf{e}_{\sigma i},t+1)-f_{\sigma i}(\mathbf{x},t)=-\frac{1}{\tau}[f_{\sigma i}(\mathbf{x},t)-f_{\sigma i}^{(0)}(\mathbf{x},t)]+A(\mathbf{F}\cdot\mathbf{e}_{\sigma i})$$

ここで、A は、$\mathbf{e}_{\sigma i}$の定義により決定される定数である。

本研究では、この定数 A を、各エネルギーレベルσで異なる値を持つ変数として、扱った。

ここで、NS 方程式を近似するため、変数 Fa_σの関係式が、次のような手順で導出される。

$$f_{\sigma i}(\mathbf{x}+\mathbf{e}_{\sigma i},t+1)-f_{\sigma i}(\mathbf{x},t)=-\frac{1}{\tau}[f_{\sigma i}(\mathbf{x},t)-f_{\sigma i}^{(0)}(\mathbf{x},t)]+Fa_\sigma(\mathbf{F}\cdot\mathbf{e}_{\sigma i}) \tag{4.1}$$

外力項のみをとりだして考える。

$$G_{\sigma i}=Fa_\sigma\mathbf{F}\cdot\mathbf{e}_{\sigma i}$$

(4.1) 式の両辺に、$1,\mathbf{e}_{\sigma i},\varepsilon_\sigma$ をかけ、総和をとることで、質量、運動量、エネルギーの各保存則を満たされるよう、平衡分布関数を決定するわけだが、これを、外力項のみに対して行なうと、

$$\sum_\sigma\sum_i G_{\sigma i} = 0$$

$$
\begin{aligned}
\sum_\sigma \sum_i G_{\sigma i} \mathbf{e}_{\sigma i} &= \sum_\sigma Fa_\sigma \sum_i (\mathbf{F} \cdot \mathbf{e}_{\sigma i}) \mathbf{e}_{\sigma i} \\
\sum_\sigma \sum_i G_\sigma \varepsilon_\sigma &= 0
\end{aligned}
$$

テンソル $\sum_i (\mathbf{e}_{\sigma i \alpha} \mathbf{e}_{\sigma i \beta} \cdots)$ の「奇数次テンソルは０」という性質のため、外力項は、運動量保存則のみに影響する。

$\mathbf{F}$ の x 成分を考えてみると、

$$
\begin{aligned}
F_x &= \sum_\sigma Fa_\sigma \sum_i (F_x e_{\sigma ix} + F_y e_{\sigma iy}) e_{\sigma ix} \\
F_x &= \sum_\sigma Fa_\sigma \sum_i F_x e_{\sigma ix} e_{\sigma ix} \qquad (\textstyle\sum_i e_{\sigma iy} e_{\sigma ix} = 0 \text{ より}) \\
1 &= \sum_\sigma Fa_\sigma \sum_i e_{\sigma ix} e_{\sigma ix}
\end{aligned}
$$

結局、

$$
\begin{pmatrix} 2 & 4 & 8 & 20 & 16 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Fa_1 \\ Fa_2 \\ Fa_3 \\ Fa_4 \\ Fa_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.0 \end{pmatrix} \tag{4.2}
$$

この関係式を保ちながら、各エネルギーレベルの確率密度分布の値 $f_{\sigma i}$ に応じて係数 Fa_σを調整する。

エネルギーレベルσにある確率密度は、$h_\sigma = \sum_i f_{\sigma i}$ で表すことができる。この値を用いて、係数 Fa_σの各係数間の比率を求める。

$$Fa_1 : Fa_2 = h_1 : h_2 \tag{4.3}$$

$$Fa_1 : Fa_3 = h_1 : h_3 \tag{4.4}$$

$$Fa_1 : Fa_4 = h_1 : h_4 \tag{4.5}$$

$$Fa_1 : Fa_5 = h_1 : h_5 \tag{4.6}$$

つまり、確率密度分布の大きいレベルは係数 Fa を大きくして、小さいレベルは係数 Fa を小さくして、外力の計算過程で確率密度分布が負の値をとることのないようにしている。以上の (4.2)〜(4.6) 式より、係数 Fa_σは一意に求めることができる。

第 5 章

境界条件

具体的な数値計算を行なう場合、境界の扱い方に注意する必要がある。

ここでは、格子ボルツマン法における境界条件について説明する。

なお、特に言及しない限り、粒子の運動は、上下左右斜め、停止の９種類のみで考えていく。図中のノードで、丸で囲まれているものは、注目ノードである。

5.1 ノード上境界

断熱固定壁（すべりなし）

断熱すべりなし固定壁の扱いは、ノード上の速度が常に０及び衝突前後のエネルギーの変化がないということから、粒子は、来た方向に戻るという Bounce-back 条件を用いることができる。

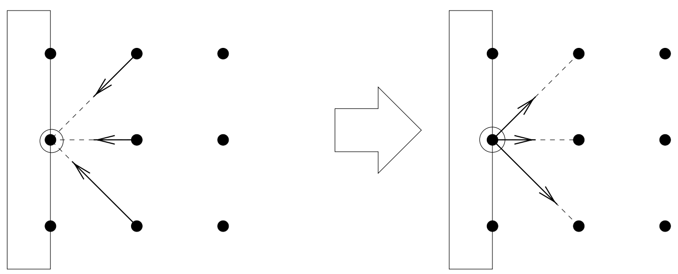


図 5.1: 断熱固定壁（すべりなし）

断熱固定壁（すべりあり）

すべりありの壁の扱いは、ノード上の速度が0でなくてもいいことから、粒子は壁に反射するように流出する。また、断熱は、衝突前後のエネルギーの変化がないということから、各エネルギーレベルの粒子数が変化しなければいい。

もちろん、壁反射条件はエネルギーの変化はない。

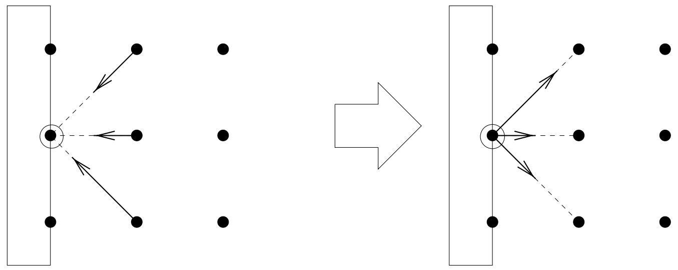


図 5.2: 断熱固定壁（すべりあり）

発熱壁

一定の物理量をもつ壁（壁が熱を持っている等）の扱いは、粒子衝突後、その物理量に対応した平衡分布関数 $f_{\sigma i}^{eq}$ の粒子確率密度の割合になるよう補正することで表現する

$$n = a+b+c \qquad \text{（壁ノードに衝突する粒子確率密度の総量）}$$

$$m = f_{23}^{eq}+f_{10}^{eq}+f_{20}^{eq}$$

$$d = \frac{f_{20}^{eq}}{m}n, \qquad e = \frac{f_{10}^{eq}}{m}n, \qquad f = \frac{f_{23}^{eq}}{m}n$$

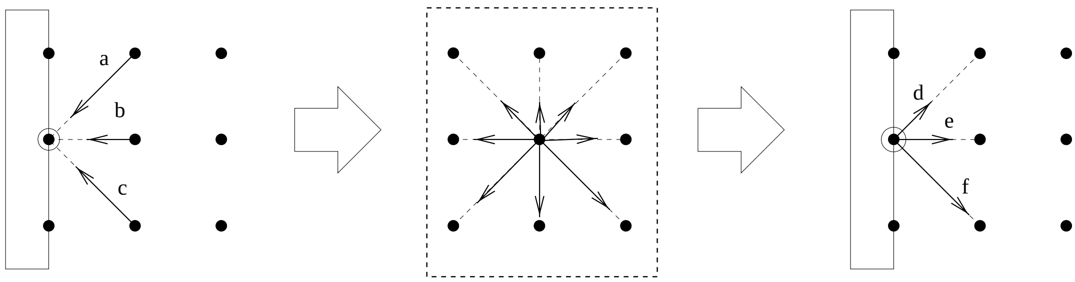


図 5.3: 発熱壁

5.2 問題点

境界ノードのエネルギーレベル３、４、５の粒子は、最隣接のノードを越えて、次のノードへ粒子が移動する。

つまり、エネルギーの低い粒子が、最隣接のノードに流入し、エネルギーの高い粒子は、２つ目のノードに流入するため、粒子分布の違いはあるとしても、最隣接のノードよりも早く壁のエネルギーが伝達されることになってしまう（問題点１）。

また、境界最隣接のノードの境界側のエネルギーレベル３、４、５の粒子は、境界を跳ね返るだけで、計算上、境界の粒子と衝突していないため、粒子分布の変化がない。つまり、壁の温度に干渉され、エネルギーが変化することができないことになってしまう（問題点２）。

このような物理的に不適当な現象が起きてしまうことが、クエット流れのような、運動エネルギーから熱エネルギーへの不可逆な変換である散逸現象（微小量）がある体系での数値計算で実際にわかった。

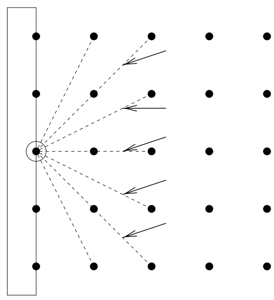


図 5.4: 問題点１

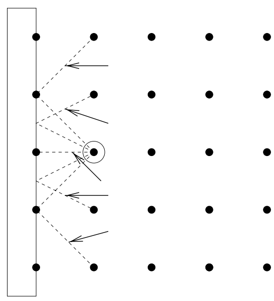


図 5.5: 問題点２

5.3　ノード間境界

境界は、ノード間の中心に位置していると考える。

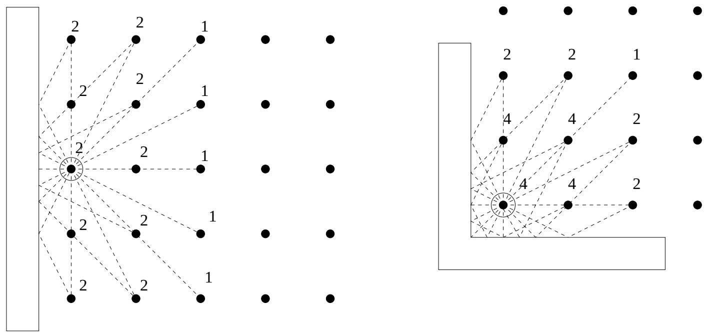


図 5.6: 概念

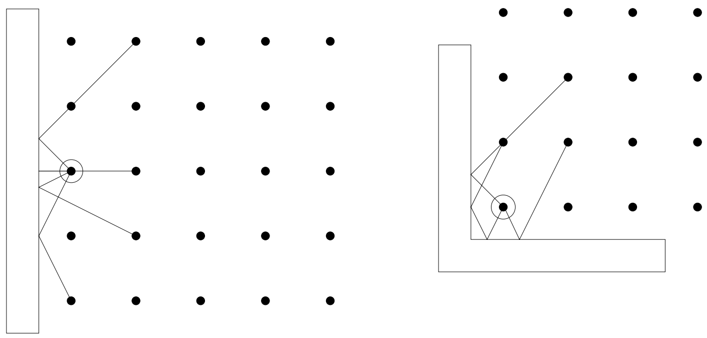


図 5.7: 粒子パスの一例

ノード間の粒子情報の伝達という観点からみると、境界に近いノードは、より多くの粒子情報（図のノードの上に書かれた数字だけパスがある）を、境界ノードから伝達されるという妥当な状況になる。

また、境界ノードにおける粒子分布値は、ノードから粒子が流出する際に、平衡分布関数値をとることで、表現する。

これにより、平衡分布関数値の取り方だけで、壁の状態条件を表現することが可能である。

壁の種類	温度 (T^{eq})	速度 ($\mathbf{U}^{eq}$)
断熱固定（すべりなし）	T_{old}	0
断熱固定（すべりあり）	T_{old}	$\mathbf{U}_{old}$
発熱移動	T_{set}	$\mathbf{U}_{set}$
断熱移動	T_{old}	$\mathbf{U}_{set}$

$T^{eq}, \mathbf{U}^{eq}$は、平衡分布関数に与えるパラメータである。

$T_{old}, \mathbf{U}_{old}$は、流入してきた粒子全体の温度、速度である。

$T_{set}, \mathbf{U}_{set}$は、あらかじめ設定されたノードの温度、速度である。

なお、ノードにおける粒子保存のため、どのような境界条件をとっても、平衡分布関数に与えるρ^{eq}は、流入してきた粒子全体のρ_{old} と同値とする。

第 6 章

数値実験

6.1　正方キャビティ流れ

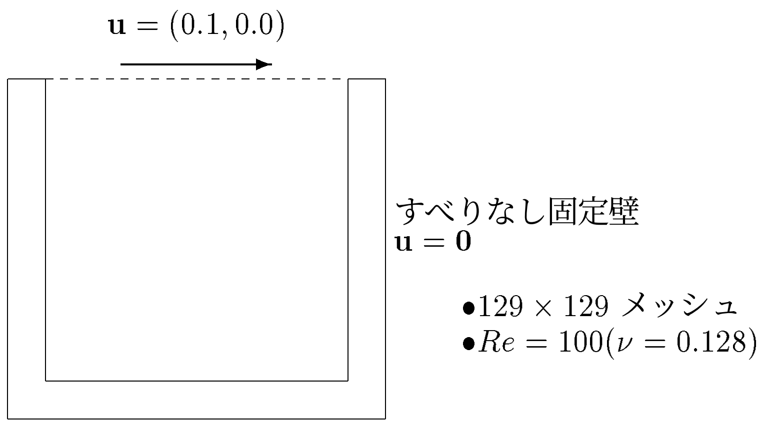


図 6.1: 正方キャビティ流れ

上壁が横方向に移動し、正方形のキャビティ内に発生する流れである。

この体系は、解析解は存在しないが、二次元流れの簡単なケースとして、有限差分法での精密な計算が行なわれており、計算スキームの精度等を調べる上で、よく用いられている。

ここで、レイノルズ数 Re という無次元量を次のように定義する。

$$Re = \frac{U_{ref}L}{\nu} \tag{6.1}$$

この量で、体系の流れの振舞いを説明できる。

差分法で精度の良い計算として知られている Ghia らの結果 [5] と合わせて以下に示す。

また、比較のため、メッシュ数を 129×129、$Re = 100$ と同数にした。

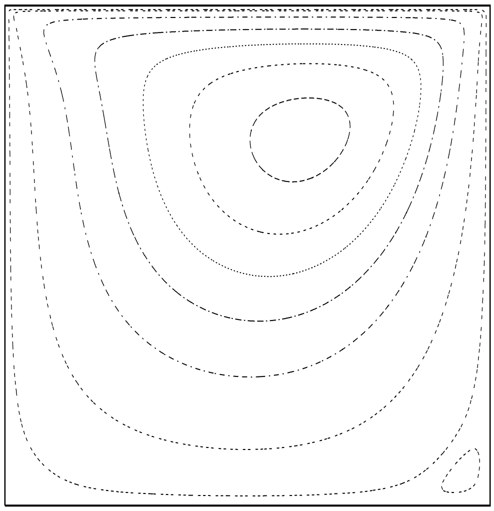


図 6.2: $Re = 100$ 流線

キャビティの横縦中心の速度分布の比較である。比較のため、上壁の速度 1.0 として正規化してある。

実数値も以下に示しておく。文献 [1] で示してある LBM でこの体系を計算した結果も合わせて記す。

流線について、上壁にひきずられて発生した大きな主渦があり、さらに、下方右の角には、その主渦にひきずられて発生した二次的な渦が確認できる。

定性的に、差分法との良い一致が見られる。

定量的にも、速度ベクトルの比較からもわかるように、ほぼ、一致しているといえる。

温度分布を調べると、ある程度偏りが見られる。これは、エネルギー保存則における散逸項の影響だと考え、むしろ、ない方が問題だと思われる。

この散逸項は、この体系では考えなくてもいいのだが、本研究の平衡分布関数の導出方法においては消去できないので、そのまま残している。

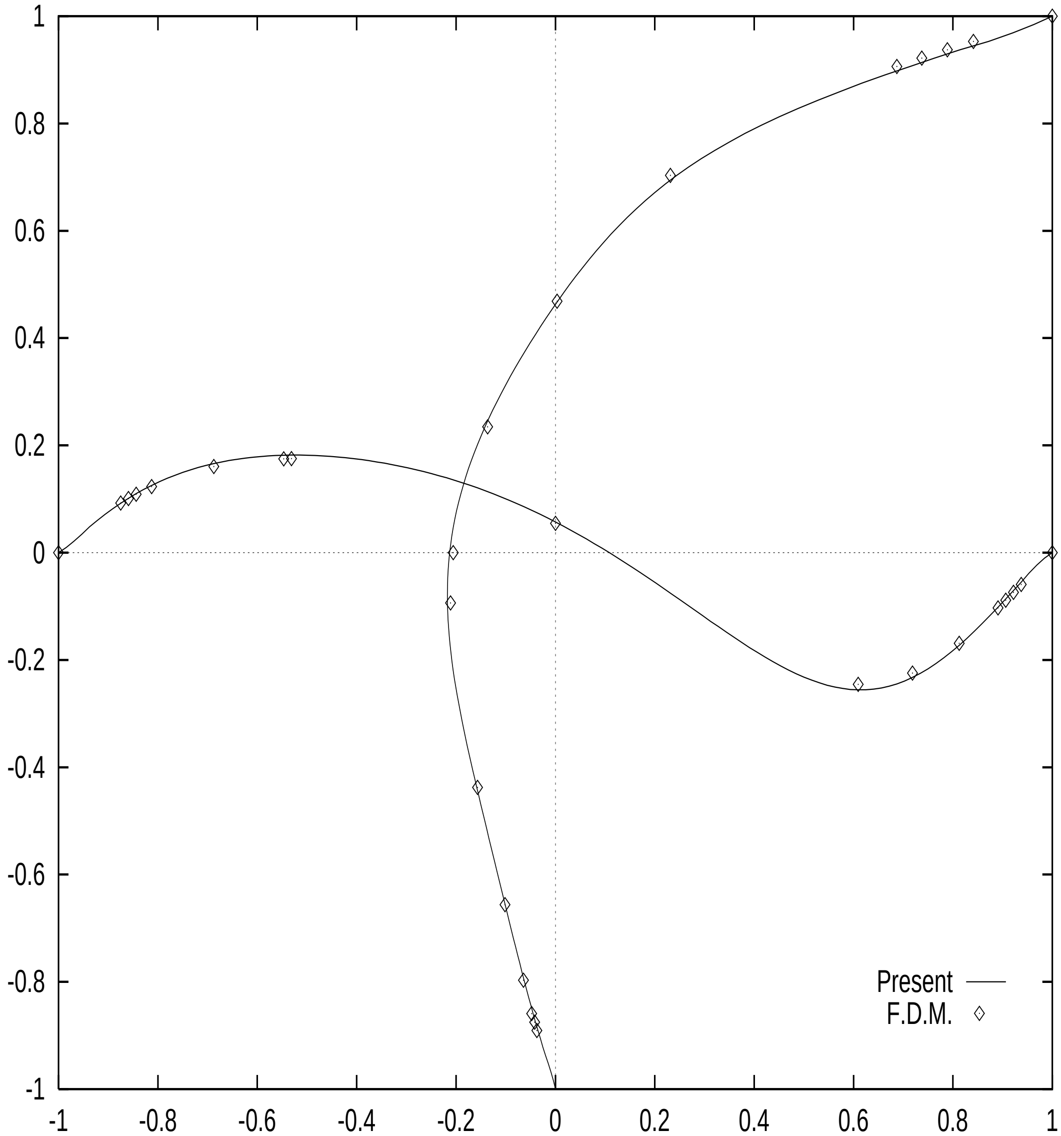


図 6.3: 差分法の結果との比較（キャビティ中心での速度成分）

表 6.1: 差分法の結果との比較、X 方向速度

ノード番号	差分法 [5]	LBM	本研究
9	-0.04775	-0.043102	-0.044827
13	-0.06434	-0.060541	-0.063045
22	-0.10150	-0.096980	-0.101145
36	-0.15662	-0.151603	-0.158331
58	-0.21090	-0.208868	-0.217283
64	-0.20581	-0.205324	-0.212888
79	-0.13641	-0.138877	-0.141832
94	0.00332	0.001943	0.004472
109	0.23151	0.235796	0.244056
123	0.73722	0.745417	0.762811
125	0.84123	0.848812	0.871657
128	1.00000	1.000000	1.000000

表 6.2: 差分法の結果との比較、Y 方向速度

ノード番号	差分法 [5]	LBM	本研究
0	0.00000	0.000000	0.000000
10	0.10890	0.104939	0.110003
12	0.12317	0.119735	0.125457
20	0.16077	0.158944	0.166087
30	0.17527	0.174533	0.181862
64	0.05454	0.055377	0.057179
103	-0.24533	-0.245365	-0.255774
116	-0.16914	-0.166136	-0.172697
122	-0.08864	-0.083414	-0.086132
124	-0.05906	-0.053080	-0.055114
128	0.00000	0.000000	0.000000

6.2 クエット流れ

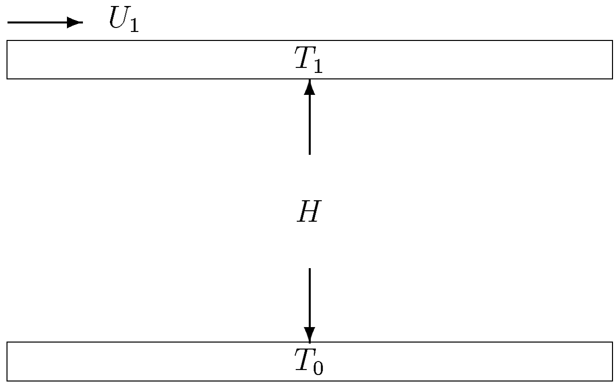


図 6.4: クエット流れ

上壁を速度 U_1で動かし、下壁を固定することで、発生する流れである。

横方向は、無限大であるとして、周期境界条件を適用した。

定常状態に達すると、縦方向には、流体の流れは生じず、横方向にズレとして、線形に速度ベクトルが生じる。

また、そのズレが、粘性により散逸されエネルギーに変換されることになる。

このエネルギー保存則内の散逸項は、高速気体の流れにおける膨張効果が重要となる場合や、大きな速度勾配が生ずる場合において考慮されるべきもので、通常は省略されることが多いが、本研究では、考慮している。

散逸エネルギーは、微小で、計算誤差等入ってくると思われるが、解析解が存在している計算体系であることから、比較に用いた。

解析解は、以下のとおりである。

$$
\begin{aligned}
T_1 \neq T_0 \quad : \quad T - T_0 &= \frac{y}{H}(T_1 - T_0) + \frac{\mu U_1^2}{2\kappa}\frac{y}{H}(1 - \frac{y}{H}) \\
T_1 = T_0 \quad : \quad T - T_0 &= \frac{\mu U_1^2}{2\kappa}\frac{y}{H}(1 - \frac{y}{H})
\end{aligned}
$$

結果をみると、壁近傍での熱分布が、解析解と合わない。

壁近傍で流体は、壁の物理量（温度、速度）に十分馴染んでいるという粘着の条件を仮定して、壁ノードの粒子分布は、平衡状態の分布をとっている。

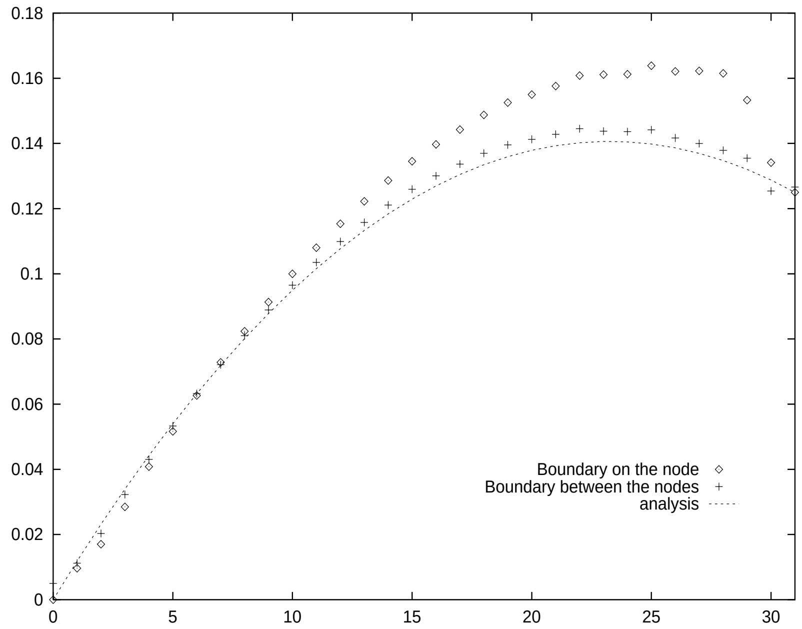


図 6.5: 温度分布

本来、壁近傍で流体は非平衡状態であるため、壁ノードの粒子分布を、平衡分布関数の値と同等とすることが、間違いなのかも知れない。非平衡状態の理論を考えなくてはならないと思われる。

6.3 自然対流

左壁を加熱され、右壁は冷却し、上下の壁は断熱とし、どの壁も、すべりなしで固定されている体系である。

重力が下方向に存在しているため、左壁で加熱された流体は軽くなり上昇していき、右壁で冷却された流体は重くなり下降していく。このため、時計回りに対流が起きる。

ここで、流れの様子を表す量として、レイリー数 Ra という無次元量を次のように定義する [9]。

$$Ra = \frac{\lambda g L^3 \Delta T}{\nu \kappa}$$

本研究では、各パラメータを以下のように設定し、$Ra = 10000$ 程度までの計算をおこ

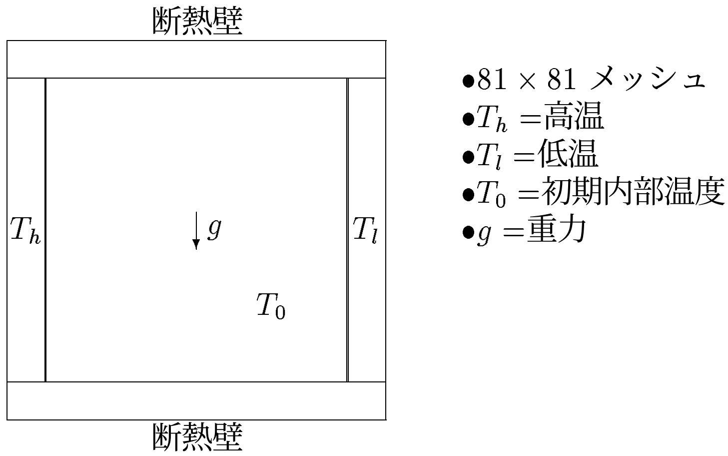


図 6.6: 自然対流

なった。

	熱膨張係数	重力加速度	メッシュ数 $(L+1)$	温度差	動粘性度	熱伝導率
Ra 数	λ	g	L	ΔT	ν	κ
1000	1.0	0.000195	80	$0.2(=1.1-0.9)$	0.1	0.2
10000	1.0	0.00195	80	$0.2(=1.1-0.9)$	0.1	0.2

次に結果を示していく。

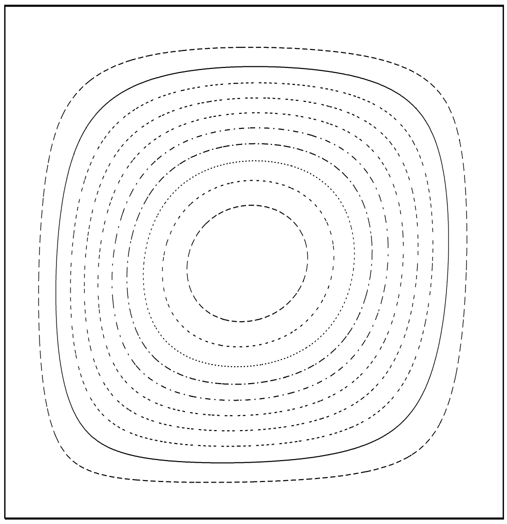


図 6.7: $Ra = 1000$ 流線

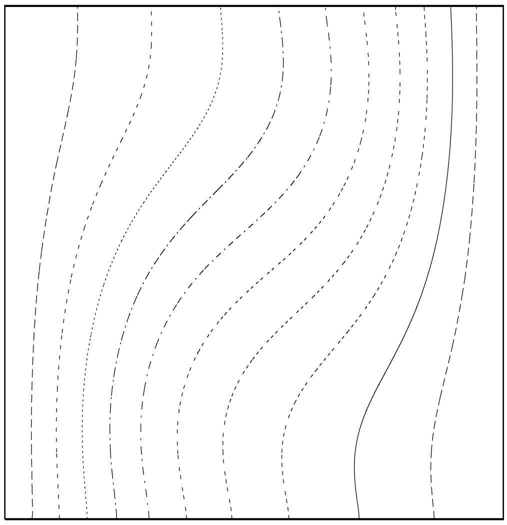


図 6.8: $Ra = 1000$ 温度分布

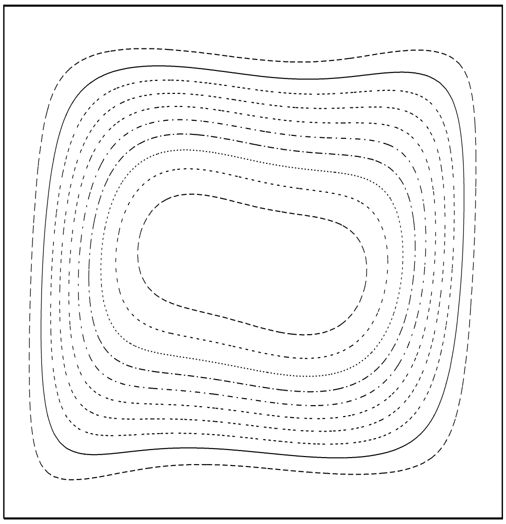


図 6.9: $Ra = 10000$ 流線

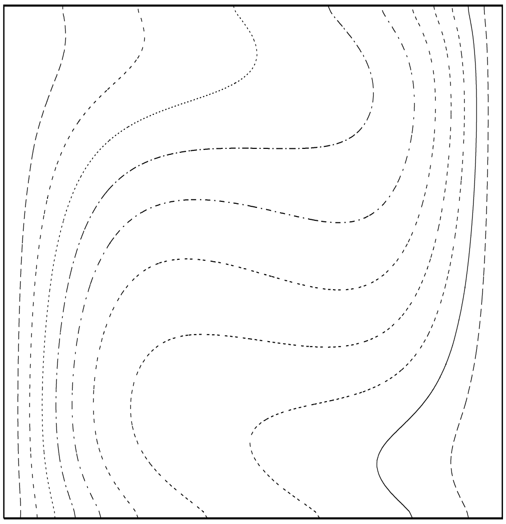


図 6.10: $Ra = 10000$ 温度分布

また、熱伝導特性を評価するために用いられる平均ヌッセルト数 Nu という量を次のように定義する。

$$Nu = \int_0^1 \left(-\frac{\partial T^*}{\partial x^*} \right)_{x^*=0} dy^*$$

熱伝導のみで熱が移動するさいは明らかに $Nu = 1$ となるため、Nu は対流による伝熱促進の程度を示している。

精度が高いとされている de Vahl Davis [6] の解と合わせて示す。メッシュ数はいずれも、81×81 である。

Ra 数	Nu 数（de Vahl Davis）	Nu 数（本研究）
1000	1.116	1.1811
10000	2.242	2.3406

プラントル数 Prが異なり、また、ナビヤ・ストークス方程式を、自然対流計算に特化して解いていないので、多少の差は存在するだろうと予想された。Nu 数の比較は、このことを良く示していると思われる。

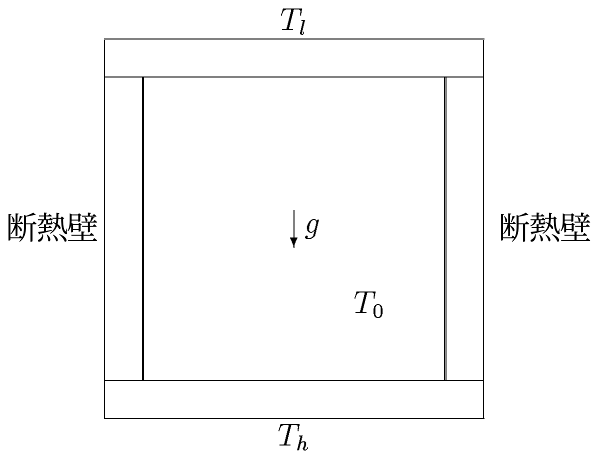
温度分布図の結果は、$Ra = 1000$ の方が良く一致しているが、上下の壁、つまり断熱条件である壁付近の分布を差分法等の結果と比較すると、等温度線が、壁に垂直になっておらず、あまり妥当ではないようだ。これは、前にも触れたが、格子ボルツマン法における境界条件の実装方法が、特に熱流動の場合確立されておらず、本研究も試行錯誤している段階である。

また、差分法での結果の流線は、中心を軸に点対称となる。$Ra = 10000$ の方が点対称に近くなっており、こちらの方が良い結果が出ている。

このことは、$Ra = 1000$ では、流体の運動がまだ熱伝導に支配されているため、温度分布の方で差分法と良い一致がみられ、$Ra = 10000$ では、流体の運動は熱伝導から対流に支配されはじめてきたため、流線の方が良い一致がみられたと考えられる。

ただ、ここに示した結果は、20000、30000 step での計算結果であり、その後 1000 step で、0.01% の割合で、数値が変動しているノードが少なからず存在している。定常状態とみなすにはまだ早いのでは、という可能性もある。

6.4　ベナール渦対流



•$N_x \times N_y$ メッシュ
•T_h =高温
•T_l =低温
•T_0 =初期内部温度
•g =重力

図 6.11: ベナール渦対流

上の壁を冷却し下の壁は加熱され、下方向に重力が存在するため、内部は、上方に冷やされた重い流体、下方に暖められた軽い流体が存在し、ついには密度不安定になり対流が起こるという現象である。左右の壁は断熱壁である。

また、内部流体の初期、0 ステップでは、物理量一様となっている。

対流がおこる臨界 Ra 数というのが存在しているが、これまでに紹介した体系の結果より、境界付近の振舞いが差分法等と異なっている。このため、臨界 Ra 数が、本研究のスキームでどのくらいになるのかは調べなかった。境界に対する解釈の方が重要であろう。

行なった体系は、次のとおりである。

	熱膨張係数	重力加速度	メッシュ数	温度差	動粘性度	熱伝導率
Ra 数	λ	g	$Nx \times Ny$	ΔT	ν	κ
5000	1.0	0.004	50×50	$0.2(= 1.1 - 0.9)$	0.1	0.2
7500	1.0	0.006	150×50	$0.2(= 1.1 - 0.9)$	0.1	0.2

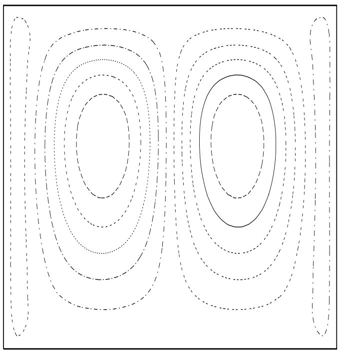


図 6.12: $Ra = 5000$ メッシュ50×50 流線

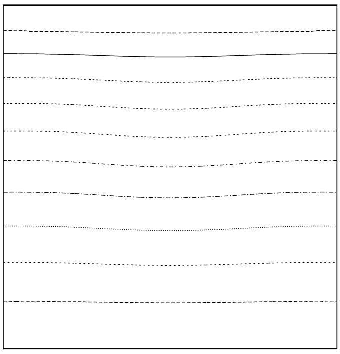


図 6.13: $Ra = 5000$ メッシュ50×50 温度分布

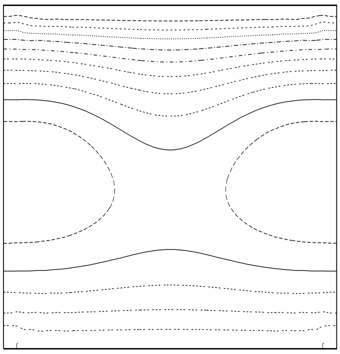


図 6.14: $Ra = 5000$ メッシュ50×50 密度分布

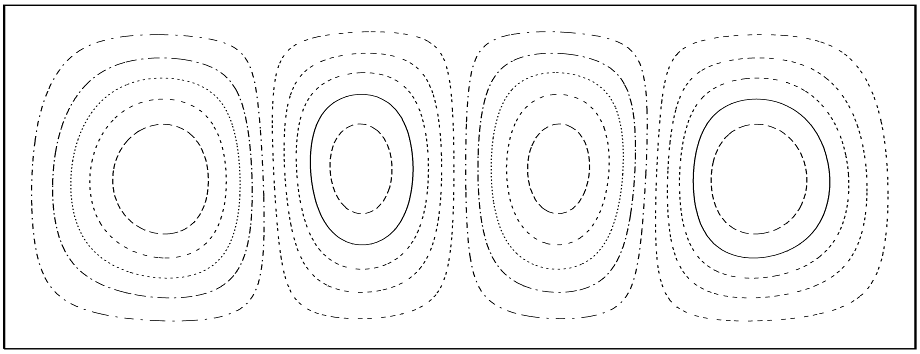


図 6.15: $Ra = 7500$ メッシュ150×50 流線

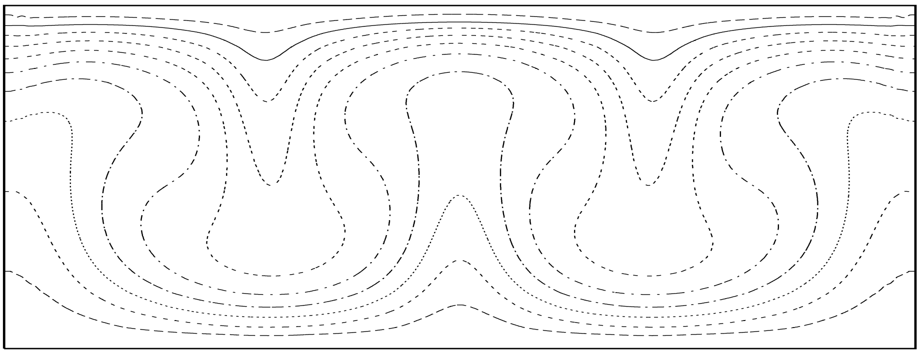


図 6.16: $Ra = 7500$ メッシュ150×50 温度分布

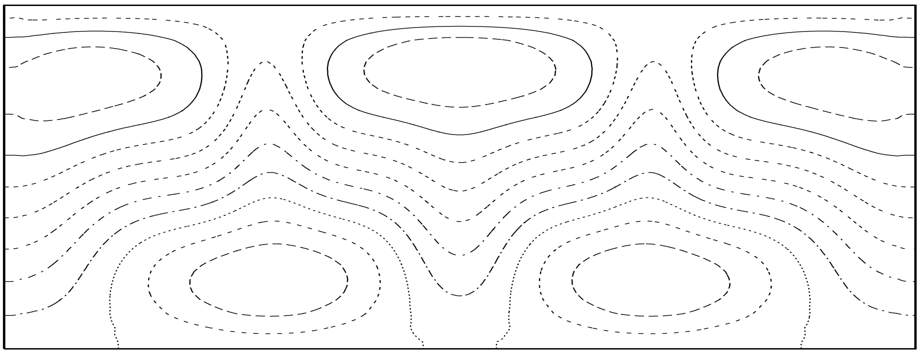


図 6.17: $Ra = 7500$ メッシュ150×50 密度分布

密度が不安定になり、対流が起きたようだ。$Ra = 5000$ の流線図で多少奇妙な部分がある。境界の扱いが不十分であるため発生したものかもしれない。また、シミュレーションの初期で、壁付近から、密度不安定が起き、全体に広がっていくのを確認できた。

第 7 章

まとめ

本研究では、格子ボルツマン法を用いて熱流動現象をシミュレートすることができた。以下、得られた結果を挙げる。

- 格子ボルツマン方程式から、ナビエ・ストークス方程式へ近似される際に、平衡分布関数の条件式が導き出されるが、式の数が、変数の数よりも少ないため、一意に決定できない。この問題を、エネルギーのボルツマン分布を考慮することで決定することにした。これにより、粒子の状態数が２５種類ある本研究でのノード間パスでも、温度といった物理量に妥当な平衡分布関数を得ることができた（例えば、温度が上昇すると、高いエネルギーを持つ粒子の分布が高くなる）。

- ノード間パスの設定、平衡分布関数の係数の決定、外力に対応する項の工夫により、粒子の移動、衝突という単純な規則を持つ格子ボルツマン法でも、熱流動、特に自然対流現象をシミュレートできることがわかった。ノード間パスについては、本研究で用いた形状でなくとも、熱流動現象をシミュレートできることが示されているため、異なる格子形状でも、外力の工夫により、自然対流現象を表現できる可能性はある。

- ノードの上に、境界が存在するという、格子ボルツマン法では一般的に使われている方法では、境界付近のノードの物理量が不安定であることが確認された。これは、エネルギー保存則を考慮に入れるために、粒子の分布を変更したことからによるものと考えられる。特に１ステップで、２ノード間を移動する粒子を持つことが原因であろう。このため、ノードの中間に境界が位置するという概念でノード間パスを

構成し、計算したところ、以前より妥当な結果を得ることができた。これは、境界とみなしているノードから流出するエネルギーの高い粒子が（仮想的な）壁に跳ね返り、境界最近傍のノードに流入し、エネルギーの高い粒子でのエネルギー伝達がなされていると思われる。以前の境界モデルで考えると、このようなことはできなかったため、不安定になったようだ。同方向に異なるスピードの粒子を持つモデルでは、こちらの概念の方が適していると思われる。ただ、これによっても、境界付近のノードのエネルギー伝達の不安定は、完全に除去することはできなかった。本研究では、境界条件に対して、実験的に条件に対するアルゴリズムを考えたが、理論的にも考える必要があると思われる。また、これらのことから、境界（壁）条件は、デリケートに扱わなくてはならないことがわかる。

これらの結果から、格子ボルツマン法における境界条件の扱いに対する理論的な解釈等、考える必要がある。ただ、境界の扱いは、他の計算スキームでも難しいので、本研究では、ある程度実験的に試行錯誤したが、以上のような結果になった。境界層の理論等を考慮しなけてはならないのだろうか。

また、境界条件にも関係すると思われるが、条件の厳しい計算体系では、粒子分布確率が負になるという結果が得られ、数値的に不安定になり計算不可能に陥ってしまう。つまり、隣接ノードの物理量の差が大きすぎる（物理量の分布が急勾配）時に負の確率が計算されてしまうようだ。

格子ボルツマン法は、平衡状態からのズレに注目して定式化していると考えることもできるので、このような非平衡状態といえる状況下に適用することは不適切なのでは、とも思える。

それから、現実の現象と合わせる場合、例えば、粒子の速度をどの程度にするかといった格子ボルツマン法の粒子分布状態と実際の物理量との適切な対応関係がはっきりしていない。本研究で計算した体系は全てモデルであるので、上のような対応関係を調節してはいないが、計算不安定になる体系の傾向があるようだ。このようなところから、格子ボルツマン法における数値計算の安定条件（差分法等の CFL 条件に相当）が考えられる可能性がある。

謝辞

本研究を行なうにあたり、御指導を頂いた松澤 照男教授に深く感謝します。

また、助言や指摘を行なってくれた研究室の皆様、同じく格子ボルツマン法の研究を行なっており助言をいただいた神戸大学大学院自然科学研究科、高田 尚樹様に深く感謝します。

参考文献

[1] Shuling Hou, Qisu Zou, Shiyi Chen, Gray Doolen, Allen C.Cogley, Simulation of Cavity Flow by the Lattice Boltzmann Method, J.Comp.Physics 118,329-347,1995.

[2] D.R.Noble, J.G.Georgiadis and R.O.Buckius, Int.J.Numer.Methods.Fluids 23, 1-18, 1996.

[3] F. J. Alexander, S. Chen and D. J. Sterling, Physical Review,E 47,pp.2249-2252 (1993).

[4] Y. Chen, H. Ohashi and M. Akiyama, Physical Review,E 50,pp.2776-2783 (1994).

[5] U.Ghia, K.N.Ghia, and C.T.Shin, High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method, J.Comp.Phys., 48, 387-411(1982)

[6] De vaul Davis, Natural Convection in a square cavity, Int.J.Num.Meths.Fluids, 3, 249-264 (1983)

[7] Hudong Chen, Chris Teixeira and Kim Molvig, http://www.exa.com/Technology/Papers /ApproachCFD/CFDpg1.html

[8] 小竹進, 分子熱流体, 丸善, 1990.

[9] 井上良紀, 木谷勝, 乱れと波の非線形現象, 朝倉書店, 1993.

[10] 香月正司, 中山顕, 熱流動の数値シミュレーション, 森北出版, 1990.

[11] 相吉英太郎, 志水清孝, 数理計画法演習, 朝倉書店, 1985.